

УДК 537.86

Поляризация диэлектрика не меняет форму молекул

Р.И. Храпко

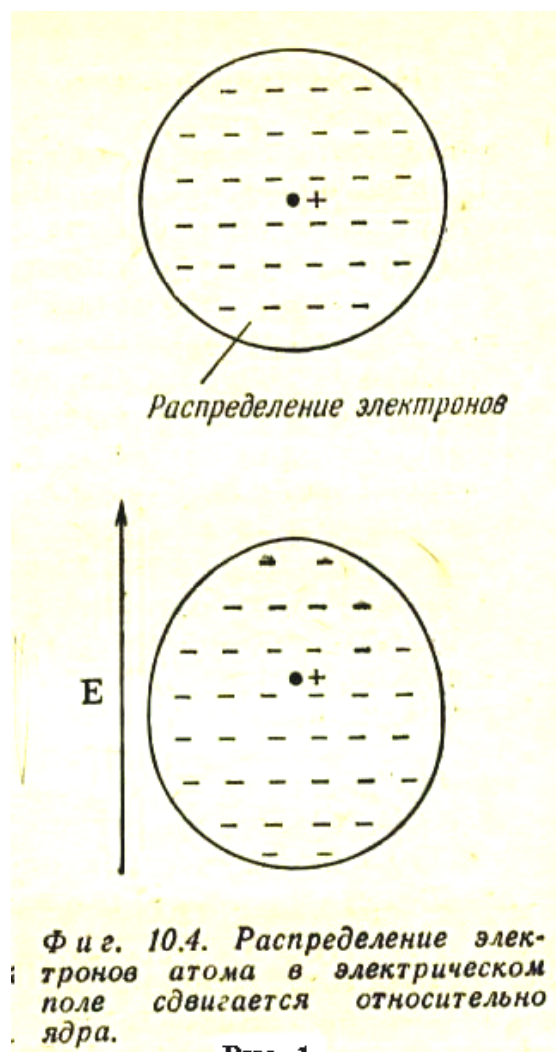
Аннотация

Критикуется представление о квазиупругих диполях диэлектрика, которые растягиваются при поляризации.

Ключевые слова

модель молекул диэлектрика; эффект Штарка.

Теория поляризации диэлектриков содержит, на наш взгляд, несколько дискуссионных моментов. Например, как хорошо известно, электрическая энергия конденсатора увеличивается в ϵ раз, когда конденсатор заполняется диэлектриком с диэлектрической проницаемостью ϵ , если при этом сохраняется макроскопическое электрическое поле E . Другими словами, если мы имеем два одинаковых конденсатора с одинаковым электрическим полем E и, соответственно, с одинаковым напряжением U между пластинами, но один из них заполнен диэлектриком, а другой – нет, то энергия заполненного конденсатора будет больше, чем энергия не заполненного. Возникает вопрос, в каком виде содержится эта добавочная энергия в диэлектрике? Является ли она по-прежнему энергией электрического поля, или она имеет



другую природу? Мы просмотрели дюжину монографий и учебников [1 – 12], однако только в двух [11, 12] нашли ответ на этот вопрос, который сводится к следующему. Дополнительная энергия в диэлектрике затрачивается на удлинение (растяжение) атомов или молекул при их поляризации, поскольку атом рассматривается как пара зарядов разного знака, которые как бы связаны пружинкой. Автор [12] называют эту энергию «энергией пружинки»¹, $kx^2/2$. Мы внимательно изучили эту идею и показали ее ошибочность [13]. В действительности «энергия пружинки» равна нулю, а избыток энергии заполненного диэлектриком конденсатора возникает из-за неоднородности электрического поля внутри диэлектрика и квадратичной зависимости энергии от напряженности поля.

Кроме того, мы отметили, что возникающий при поляризации диполь нельзя рассматривать как пару точечных зарядов $\pm q$, поскольку кулоновская сила $q^2/(4\pi\epsilon_0 r^2)$ их взаимного притяжения сингулярна при $r = 0$. Поэтому, обычно используется модель, согласно которой атомы диэлектрика имеют положительно заряженное ядро, окруженное отрицательными электронами как это изображено на рисунке 1 из [6] или рисунке 2 из [8]. В электрическом поле E ядро притягивается в одну сторону, а электроны в другую. В этом и заключается поляризация. Орбиты или плотности вероятности электронов несколько искажаются; центр тяжести отрицательных зарядов смещается и не совпадает с положительным зарядом ядра. В результате, подобная нейтральная конфигурация в первом приближении эквивалентна маленькому диполю, однако, как мы показали [13], при создании этого диполя энергия не затрачивается.

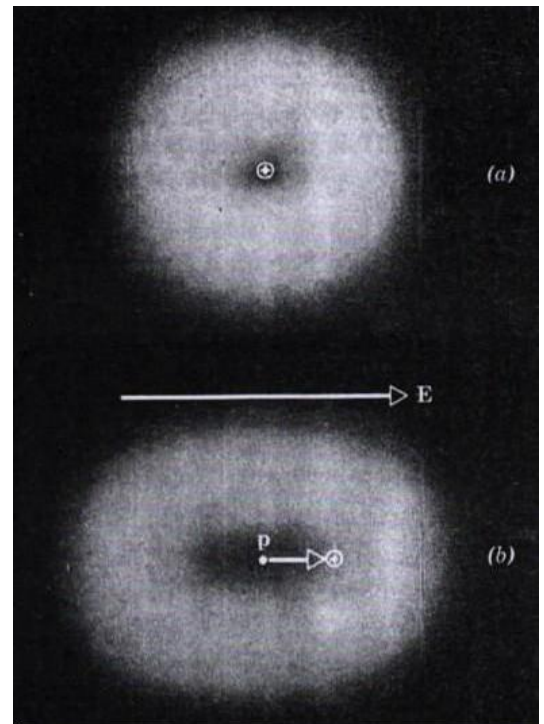


Fig. 29-12 (a) An atom, showing the nucleus and the electron cloud. The center of negative charge coincides with the center of positive charge, that is, with the nucleus. (b) If an external field E is applied, the electron cloud is distorted so that the center of negative charge, marked by the dot, and the center of positive charge no longer coincide. An electric dipole appears.

Рис. 2. Ошибочно изображено растяжение атома при поляризации внешним электрическим полем.

¹ Spring energy.

Целью настоящей заметки является исправление существенной неточности, присущей распространенной модели поляризации, той, которая представлена на рисунках 1 и 2. На наш взгляд нет причин для растяжения электронного облака при поляризации атома. Изображенное на рисунках растяжение облака было бы возможно в неоднородном силовом поле. Подобным образом приливные гравитационные силы растягивают тело при, скажем, падении его в черную дыру. Однако однородное силовое поле, в частности, электрическое поле в отношении электрона, просто смещает электронное облако относительно положительного ядра без существенного изменения его формы. Точный расчет волновой функции электрона в атоме при наличии внешнего поля выходит за рамки настоящей заметки. Однако некоторые доводы против растяжения облака можно привести на основании решения уравнения Шредингера в параболических координатах при расчете эффекта Штарка [14].

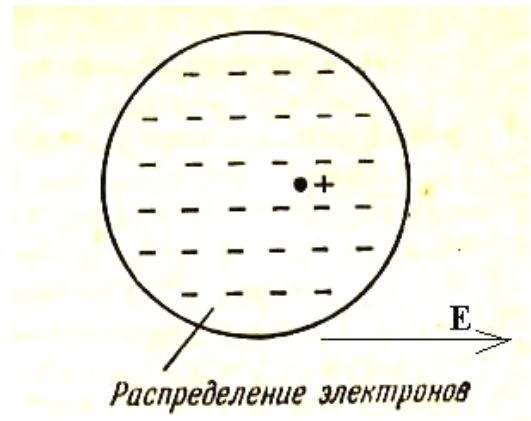


Рис. 3.

При поляризации атома происходит смещение электронного облака

Смещение электронного облака при поляризации атома, которое не сопровождается его растяжением, схематически показано на рисунке 3.

Хотелось бы обратить внимание на еще одну неточность рисунка 2. Дело в том, что темное пятно в центре означает малую вероятность для электрона находиться вблизи ядра, тогда как в действительности эта вероятность как раз наибольшая вблизи ядра для невозбужденного состояния атома.

Мы приведем теперь доводы против растяжения электронного облака атома при поляризации. Параболические координаты ξ, η, φ связаны с декартовыми координатами соотношениями [14]

$$\begin{aligned}
 x &= \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi, & y &= \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi, & z &= (\xi - \eta)/2, & r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = (\xi + \eta)/2 \\
 \xi &= r + z, & \eta &= r - z, & \varphi &= \arctg \frac{y}{x}.
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

Координатные линии параболических координат в плоскости x, z или y, z представлены, например, в [15]. Важно отметить, что на положительной полуоси z , то есть там, где $z = r$, справедливо $\eta = 0, \xi = 2z$, а на отрицательной полуоси z , то есть там, где $z = -r$, справедливо $\xi = 0, \eta = -2z > 0$.

Для основного состояния атома водорода уравнение Шредингера выглядит так [14]:

$$(\Delta - e^2 + \frac{2}{r} - 2Ez)\psi = 0. \quad (4.2)$$

Здесь параметр $-e^2$ означает удвоенную энергию E состояния атома, $e^2 = -2E$, а напряженность электрического поля, направленного вдоль оси z , обозначена, как и выше, буквой E . Решение уравнения (4.2) ищется в виде $\psi = \frac{\chi_1(\xi)\chi_2(\eta)}{\sqrt{\xi\eta}}$. Это позволяет разделить

переменные:

$$\frac{d^2\chi_1}{d\xi^2} = \left(\frac{e^2}{4} - \frac{\beta_1}{\xi} - \frac{1}{4\xi^2} + \frac{E\xi}{4}\right)\chi_1, \quad \frac{d^2\chi_2}{d\eta^2} = \left(\frac{e^2}{4} - \frac{\beta_2}{\eta} - \frac{1}{4\eta^2} - \frac{E\eta}{4}\right)\chi_2, \quad \beta_1 + \beta_2 = 1. \quad (4.3)$$

При отсутствии электрического поля, $E = 0$, эти уравнения очевидно имеют решения

$$\chi_{10} = \sqrt{\xi} \exp(-\xi/2), \quad \chi_{20} = \sqrt{\eta} \exp(-\eta/2), \quad e^2 = 1, \quad \beta_{10} = \beta_{20} = 1/2, \quad (4.4)$$

так что мы имеем $\psi_0 = \exp(-r)$, как и должно быть, однако мы обратим внимание на графики функций χ_{10} и χ_{20} вдоль оси z и на изменение этих графиков при появлении электрического поля E . Эти графики изображены на рисунке 4.

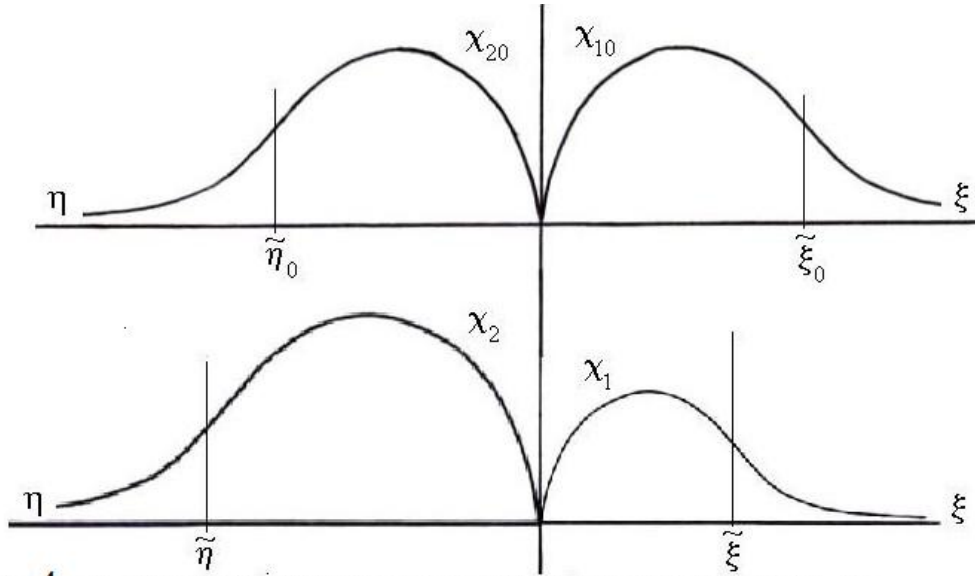


Рис. 4. Показано, как изменяется волновая функция электрона при появлении электрического поля: сдвиг электронного облака при $z > 0$ равен сдвигу при $z < 0$

Точки перегиба графиков, $\tilde{\xi}$, $\tilde{\eta}$, на основании (4.3), удовлетворяют уравнениям

$$F_1(\tilde{\xi}, E) = 0, \quad F_2(\tilde{\eta}, E) = 0, \quad (4.5)$$

где

$$F_1(\xi, E) = \frac{e^2}{4} - \frac{\beta_1}{\xi} - \frac{1}{4\xi^2} + \frac{E\xi}{4}, \quad F_2(\eta, E) = \frac{e^2}{4} - \frac{\beta_2}{\eta} - \frac{1}{4\eta^2} - \frac{E\eta}{4}. \quad (4.6)$$

При $E = 0$ уравнения (4.5) и (4.4) дают начальные координаты точек перегиба: $\tilde{\xi}_0 = \tilde{\eta}_0 \cong 2.4$.

Вычислим теперь, как смещаются точки перегиба $\tilde{\xi}$ и $\tilde{\eta}$ при появлении электрического поля. Мы учтем при этом отсутствие линейного эффекта Штарка для основного состояния атома, $de^2/dE = 0$, и зависимость параметров разделения переменных β от E :

$\beta_1 = 1/2 + E/2$, $\beta_2 = 1/2 - E/2$. Подсчитаем производные $d\tilde{\xi}/dE$ и $d\tilde{\eta}/dE$ при $E = 0$:

$$\frac{d\tilde{\xi}}{dE} = -\frac{dF_1}{\partial F_1} = \frac{\frac{1}{2\tilde{\xi}_0} - \frac{\tilde{\xi}_0}{4}}{\frac{1}{2\tilde{\xi}_0^2} + \frac{1}{2\tilde{\xi}_0^3}} \quad \frac{d\tilde{\eta}}{dE} = -\frac{dF_2}{\partial F_2} = \frac{-\frac{1}{2\tilde{\eta}_0} + \frac{\tilde{\eta}_0}{4}}{\frac{1}{2\tilde{\eta}_0^2} + \frac{1}{2\tilde{\eta}_0^3}}. \quad (4.7)$$

Видно, что смещения точек перегиба графиков $\chi_1(\xi)$ и $\chi_2(\eta)$ отличаются друг от друга только знаком, а потому уширение электронного облака при поляризации атома не происходит.

Результаты, представленные в этой заметке и/или в статье [13], были направлены в редакции следующих научных журналов (в скобках указана дата подачи статьи): УФН (25.05.06), AJP (30.08.06), The Phys. Teach. (24.10.06), EJP (11.03.07), JPA (30.04.08), Известия вузов, Физика (13.05.08), Phys.Ed. (19.05.08), Физическое образование в вузах (22.08.08).

Библиографический список

1. Rohrlich F. Classical Charged Particles (Addison-Wesley, Mass. 1965) –731 p.
2. Stratton J. A. Electromagnetic Theory (N. Y., London, 1941) –658 p.
3. Jackson J. D. Classical Electrodynamics (John Wiley, 1999) –808 p.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля (М.: Наука, 1973) –504 с.
5. Abraham M, Becker R. The Classical Theory of Electricity and Magnetism (Hafner, N. Y.) – 289 p.
6. Фейнман Р. et al. Фейнмановские лекции по физике 5 (М.: Мир, 1977) - 300с.
7. Ohanian H C. Physics (W. W. Norton, N. Y., 1985) 1012 p.
8. Halliday D, Resnick R. Physics. Part 2 (N.Y. Wiley, 1962) -780 p.
9. Савельев И В. Курс общей физики, том 2. – М.: Наука, 1970.- 431с.
10. Сивухин Д В. Общий курс физики, том III, часть 1. – М.: Наука, 1996.- 320с.
11. Тамм И Е. Основы теории электричества. – М.: Физматлит, 2003.- 616с.
12. Griffiths D J. Introduction to Electrodynamics. - N.J.: Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1989.- 684p.

13. Храпко Р И. Где спрятана энергия поляризации диэлектрика?
http://www.mai.ru/projects/mai_works/articles/num23/article6/author.htm (2006)
14. Ландау Л, Лифшиц Е. Квантовая механика. – М.: ОГИЗ, 1948.- 567с. § 37, § 73.
15. Корн Г, Корн Т. Справочник по математике. – М.: Наука, 1984, 832с.

Сведения об авторе

Храпко Радий Игоревич, доцент кафедры физики Московского авиационного института (государственного технического университета), к.ф.-м.н.

125993 Москва, Волоколамское шоссе 4, Российская Федерация.

+7 499 144-63-12, khrapko_ri@hotmail.com.