ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆԻ ԳԻՏԱԿԱՆ ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
УЧЕНЫЕ ЗАПИСКИ ЕРЕВАНСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

Բնական գիտություններ 2, 1986 Естественные науки

*Физика*

УДК 537.226; 537.311.32; 538.956

Г. С. МКРТЧЯН, Д. М. СЕДРАКЯН

# БЕССТОЛКНОВИТЕЛЬНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА

Обсуждается вопрос релаксации поляризации разбавленного раствора полярных молекул в неполярной среде при включении электрического поля.

1. Поляризация разбавленного раствора дипольных молекул в неполярном веществе описывается теорией Дебая [1]. В этой теории полярная молекула считается шариком, движущимся в вязкой среде. Взаимодействием шариков друг с другом пренебрегается. Если в момент времени $t=0$ включается постоянное электрическое поле, то средняя проекция дипольного момента молекулы на направление поля равна

$$\langle\mu_z(t)\rangle=\frac{1}{3}\,\frac{\mu^2E_0}{T}\,(1-e^{-t/\tau_0}). \tag{1}$$

Здесь $\mu$—величина дипольного момента полярной молекулы, $E_0$—величина напряженности электрического поля, $T$—температура среды, $\tau_0$—время релаксации. Для жидкой среды $\tau_0$ определяется коэффициентом вязкости, а для газовой среды—временем свободного пробега полярной молекулы. Следовательно, при изменении температуры и плотности среды $\tau_0$ меняется в широком диапазоне.

В данной работе показывается, что релаксация дипольного момента в электрическом поле может наступить и без взаимодействия молекулы со средой. При этом временем, определяющим изменение момента, является величина $\tau=\sqrt{\frac{2J}{T}}$, где $J$—момент инерции молекулы. Его можно назвать временем динамической релаксации.

2. Рассмотрим двухатомную полярную молекулу с дипольным моментом величиной $\mu$. Моделью такой молекулы является ротатор (две разноименно заряженные массы на заданном расстоянии друг от друга).

В системе центра инерции функция Гамильтона ротатора имеет вид

$$H=\frac{1}{2J}(p_\theta^2+p_\varphi^2\sin^{-2}\theta). \tag{2}$$

Здесь $\theta$ и $\varphi$—углы, определяющие ориентацию оси ротатора; $p_\theta$, $p_\varphi$—сопряженные им импульсы; $J$—момент инерции ротатора. Из уравнений движения легко получить следующее уравнение для проекции $\mu_z = \mu\cos\theta$ дипольного момента на полярную ось:

$$\frac{d^2}{dt^2}\mu_z = -\omega^2\mu_z, \qquad \omega = \sqrt{\frac{2H}{J}}. \tag{3}$$

Здесь H дается выражением (2). Решение (3) имеет вид

$$\mu_z(t) = \mu_z(0)\cos(\omega t) + \frac{1}{\omega}\dot\mu_z(o)\sin(\omega t).$$

С помощью уравнений движения можно связать $\dot\mu_z(0)$ с начальными значениями $\theta(0)$ и $p_\theta(0)$:

$$\mu_z(0) = \mu\cos\theta(0),$$

$$\dot\mu_z(0) = -\frac{\mu}{J}p_\theta(0)\sin\theta(0).$$

Рассмотрим теперь ансамбль таких ротаторов и предположим, что в момент времени $t \to -\infty$ ансамбль описывался распределением Гиббса. Вычислим корреляционную функцию

$$<\mu_z(t)\dot\mu_z(0)> = \left(\int \exp\left[-\frac{H}{T}\right]\mu_z(t)\dot\mu_z(0)d\Gamma\right)\left(\int \exp\left[-\frac{H}{T}\right]d\Gamma\right)^{-1},$$

где

$$d\Gamma = dp_\theta(0)dp_\varphi(0)d\theta(0)d\varphi(0).$$

Получим

$$<\mu_z(t)\dot\mu_z(0)> = \frac{4}{3}\,\frac{\mu^2}{\tau}\int\limits_0^\infty \sin\left(\frac{2rt}{\tau}\right)e^{-r^2}r^2dr. \tag{4}$$

Здесь

$$\tau = \sqrt{\frac{2J}{T}}. \tag{5}$$

Полученный результат можно выразить через вырожденную гипергеометрическую функцию

$$<\mu_z(t)\dot\mu_z(0)> = \frac{4}{3}\,\frac{\mu^2 t}{\tau^2}F\left(2,\ \frac{3}{2},\ -\frac{t^2}{\tau^2}\right). \tag{6}$$

Пусть теперь ротаторы находятся в слабом электрическом поле, направленном вдоль полярной оси. Тогда средняя проекция дипольного момента ротатора на направление поля дается формулой Кубо [2]:

$$<\mu_z(t)> = \frac{1}{T}\int\limits_0^\infty e^{-\eta/\tau_0}<\mu_z(\eta)\dot\mu_z(0)>E(t-\eta)d\eta. \tag{7}$$

Здесь $\tau_0$—время релаксации функции распределения ротаторов, связанное с их взаимодействием с термостатом.

3. Вычислим значение $<\mu_z(t)>$ для конкретных зависимостей $E(t)$.

Для импульсного поля $E(t)=E_0\exp\left[-\frac{t^2}{\varepsilon^2}\right]$ из (6) и (7) при $0<\varepsilon\ll\tau,\ \tau_0$, для $t>\varepsilon$ следует

$$\langle\mu_z(t)\rangle=\frac{4\sqrt{\pi}}{3}\frac{\mu^2E_0}{T}\left(\frac{t\varepsilon}{\tau^2}\right)e^{-t/\tau_0}F\left(2,\ \frac{3}{2},\ -\frac{t^2}{\tau^2}\right). \tag{8}$$

Используя асимптотику гипергеометрической функции [3]

$$F(a,\ c,\ x)_{x\to-\infty}=\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)}(-x)^{-a}[1+O(|x|^{-1})],$$

получаем следующее выражение для $\langle\mu_z(t)\rangle$ при $\frac{t}{\tau}\gg1$:

$$\langle\mu_z(t)\rangle\approx-\frac{2\sqrt{\pi}}{3}\frac{\mu^2E_0}{T}\left(\frac{\tau^2\varepsilon}{t^3}\right)e^{-\frac{t}{\tau_0}}. \tag{9}$$

Из (9) следует, что даже если отсутствует взаимодействие с термостатом ($\tau_0\to\infty$), все равно имеет место релаксация $\langle\mu_z\rangle$ к равновесному нулевому значению.

В качестве второго примера рассмотрим включение постоянного поля

$$E(t)=E_0\theta(t),$$

где $\theta(t)$—тета-функция. Из (4) и (7) имеем

$$\langle\mu_z(t)\rangle=\frac{4}{3}\frac{\mu^2E_0}{T}\int\limits_0^\infty\left(\int\limits_0^{t/\tau}e^{-\eta s}\sin(2r\eta)\,d\eta\right)r^2e^{-r^2}dr. \tag{10}$$

Здесь $s=\tau/\tau_0$. Найдем сначала равновесное значение $\langle\mu_z(t)\rangle$, для чего подставим в (10) $t\to\infty$. После несложных преобразований получим

$$\langle\mu_z(\infty)\rangle=\frac{1}{3}\frac{\mu^2E_0}{T}\left[1-\frac{s^2}{4}\int\limits_0^\infty\frac{e^{-\frac{1}{4}s^2p}}{1+p}dp\right]. \tag{11}$$

Полученный результат можно выразить через интегральную экспоненту $E_i(x)$ [3]:

$$\langle\mu_z(\infty)\rangle=\frac{1}{3}\frac{\mu^2E_0}{T}\left[1+\frac{s^2}{4}e^{\frac{s^2}{4}}E_i\left(-\frac{s^2}{4}\right)\right]. \tag{12}$$

Выражение в скобках меньше единицы и стремится к нулю при $s\gg1$. При $s\ll1$ $\langle\mu_z\rangle$ близко к значению $(3T)^{-1}\mu^2E_0$. Здесь возможна аналогия с редукционным фактором теории Дебая [4].

Рассмотрим подробнее интересующий нас случай $s\ll1$, т. е. $\tau\ll\tau_0$. Для времен $0\leqslant t\ll\tau_0$ выражение (10) преобразуется к виду

$$\langle\mu_z(t)\rangle=\frac{1}{3}\frac{\mu^2E_0}{T}\left[1-2\int\limits_0^\infty\cos\left(\frac{2rt}{\tau}\right)e^{-r^2}r\,dr\right].$$

Этот результат можно выразить через вырожденную гипергеометрическую функцию

$$\langle\mu_z(t)\rangle=\frac{1}{3}\,\frac{\mu^2E_0}{T}\left[1-F\left(1,\ \frac{1}{2},\ -\frac{t^2}{\tau^2}\right)\right]. \qquad (13)$$

Отсюда при $t\gg\tau$ получаем

$$\langle\mu_z(t)\rangle\approx\frac{1}{3}\,\frac{\mu^2E_0}{T}\left(1+\frac{\tau^2}{2t^2}\right), \qquad (14)$$

т. е. при $t\gg\tau$ $\langle\mu_z\rangle$ стремится к равновесному значению $(3T)^{-1}\mu^2E_0$. Этот пример также показывает, что взаимодействие с термостатом не является необходимым условием релаксации $\langle\mu_z\rangle$ к равновесному значению. Если формально положить в (10) $\tau_0\to\infty$, то выражение (13) будет справедливо во всей области $0\leqslant t<\infty$.

С помощью (6) можно вычислить восприимчивость $\chi(\omega)$ газа из N полярных молекул:

$$\chi(\omega)=\frac{N}{T}\int_0^\infty e^{-t/\tau_0}\langle\mu_z(t)\dot{\mu}_z(0)\rangle e^{i\omega t}dt.$$

Для случая $\tau_0\gg\tau$ в области частот $\omega\gg\tau_0^{-1}$ выражение для $\chi(\omega)$ имеет вид

$$\chi(\omega)=i\frac{\pi N\mu^2}{3T}x^2e^{-x^2}\operatorname{sign}x+\frac{N\mu^2}{3T}\left[1-x^2e^{-x^2}\operatorname{Ei}(x^2)\right],$$

где $x=\omega\tau/2$. Мнимая часть $\chi(\omega)$ имеет максимум при $x=1$, то есть при $\omega=2\tau$.

*Кафедра общей физики* *Поступила 20.02.1986*

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Фрелих Г.** Теория диэлектриков, Изд-во ИЛ, 1960.
2. **Левич В. Г.** Курс теоретической физики, т. II, М.: Наука, 1971.
3. **Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф.** Специальные функции. М.: Наука, 1968.
4. **Богородицкий Н. П., Волокобинский Ю. М., Воробьев А. А., Тареев Б. М.** Теория диэлектриков, Изд-во Энергия, 1965.

Գ. Ս. ՄԿՐՏՉՅԱՆ, Դ. Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ

## ԴԻՊՈԼԱՅԻՆ ՄՈՄԵՆՏԻ ՀԱՐՎԱԾՆԵՐՈՎ ՉՊԱՅՄԱՆԱՎՈՐՎԱԾ ՌԵԼԱՔՍԱՑԻԱ

### Ամփոփում

*Քննարկվում է ոչ բևեռային միջավայրում բևեռային մոլեկուլների նոսր լուծույթի բևեռացման ռելաքսացիայի հարցը էլեկտրական դաշտի միացման պահին։*