

Метод α -регуляризации А.Н. Тихонова в диэлектрической спектроскопии сегнетоэлектриков

© В.Ф. Тиллес, Е.С. Соловьева

Пензенский государственный университет,
440026 Пенза, Россия

E-mail: micro@diamond.stup.ac.ru

Предложена методика расчета спектра релаксаторов по экспериментальным частотным зависимостям действительной части комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon'(\omega)$. Логарифмическая трансформация аргумента в уравнении Г. Фрелиха позволяет решать уравнения А.Н. Тихонова для спектра $\epsilon'(\omega)$. Уширение спектра релаксаторов вследствие погрешности эксперимента снижается на 20–30%, так как точность измерения действительной части $\epsilon'(\omega)$ обычно в 5–10 раз выше, чем мнимой $\epsilon''(\omega)$.

PACS: 77.22.-d, 77.22.Gm, 77.84.Dy

Свойства сегнетоэлектриков в существенной степени определяются кинетикой доменных границ. Известно, что в перовскитоподобных сегнетоэлектриках энергии активации 180° и 90° стенок различны, поэтому представляет интерес изучить влияние дефектов на время релаксации доменной стенки в слабых полях в низкочастотном и инфранизкочастотном (далее НЧ–ИНЧ) диапазонах, так как именно при таком воздействии движение доменных стенок и межзеренных границ носит релаксационный характер и описывается уравнениями дебаевского типа [1,2].

При определении времени релаксации по диаграммам Коула–Коула невозможно разделить релаксационные процессы с временами релаксации, различающимися менее чем на порядок (рис. 1). Приходится использовать модель, учитывающую функцию плотности распределения релаксаторов по временам релаксации $f(\tau)$ в диапазоне времен от τ_a до τ_b , которая предложена Г. Фрелихом [3]

$$\epsilon^*(\omega) = \epsilon_\infty + (\epsilon_\infty - \epsilon_0) \int_{\tau_a}^{\tau_b} \frac{f(\tau) d\tau}{1 + i\omega\tau},$$

$$\int_0^\infty f(\tau) d\tau = 1. \quad (1)$$

Известно, что задача решения интегрального уравнения Фрелиха относительно $f(\tau)$ является некорректной, так как даже очень малые относительные ошибки определения $\epsilon^*(\omega)$ приводят к настолько большим ошибкам, что численное решение не имеет ничего общего с точным. Для решения этой существенно некорректной задачи может быть применен метод регуляризации Тихонова с выбором параметра регуляризации α по методу обобщенной невязки как наиболее универсальный. Метод не требует никакой другой априорной информации о решении, кроме выполнения требования его гладкости [4].

Точность расчета $f(\tau)$ по экспериментальным зависимостям оказывается удовлетворительной, если погреш-

ность последних не превышает 2% [4]. При использовании данных с большими ошибками ($\geq 5\%$) метод регуляризации, как и традиционные графические методики, недостаточно эффективен. Повышение точности расчета $f(\tau)$ путем увеличения количества экспериментальных точек или проведение нескольких серий экспериментов в области низких частот приводит к неприемлемому увеличению времени эксперимента. В [4] предлагается математическое сглаживание экспериментальных результатов, при этом функция распределения рассчитывается исключительно по зависимости $\epsilon''(\omega)$.

С учетом того, что точность измерения $\epsilon'(\omega)$ практически на порядок выше, чем $\epsilon''(\omega)$, предлагается провести замену переменных. Пусть

$$s = -\log_g(\tau), \quad x = \log_g(\omega), \quad (2)$$

тогда частотная зависимость комплексной диэлектрической проницаемости примет вид

$$\epsilon^*(b^x) = \epsilon_\infty + (\epsilon_\infty - \epsilon_0) \times \int_{\log_g \tau_a}^{\log_g \tau_b} \frac{f(g^s) \cdot g^s \cdot ds}{1 + i g^{-(x-s)}} \cdot (-\ln g), \quad (3)$$

где основание логарифма выбирается так, чтобы количество точек, выбранных из спектра диэлектрической проницаемости, было, с одной стороны, максимальным для повышения точности, а с другой — таким, чтобы не переполнять ресурсы ЭВМ при решении системы линейных уравнений. Данная трансформация имеет полезные для решения обратной задачи следствия: во-первых, ядро становится симметричным и самосопряженным; во-вторых, производная обрабатываемой функции на концах области определения стремится к нулю.

С учетом того, что действительная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости однозначно связаны соотношением Крамера–Кронига решение уравнения (3) относительно $y(s) = g^s \cdot f(g^s)$ сводится к

решению любого из уравнений

$$\xi'(x) = \int_a^b \frac{y(s) \cdot ds}{1 + g^{-2(x-s)}}$$

или

$$\xi''(x) = \int_a^b \frac{g^{-(x-s)} y(s) \cdot ds}{1 + g^{-2(x-s)}}, \quad (4)$$

где $\xi'(x) = (\varepsilon'(g^x) - \varepsilon_0) / [(\varepsilon_\infty - \varepsilon_0)(-\ln(g))]$, $\xi''(x) = \varepsilon''(g^x) / [(\varepsilon_\infty - \varepsilon_0)(-\ln(g))]$, $a = \log_g \tau_b$, $b = \log_g \tau_a$.

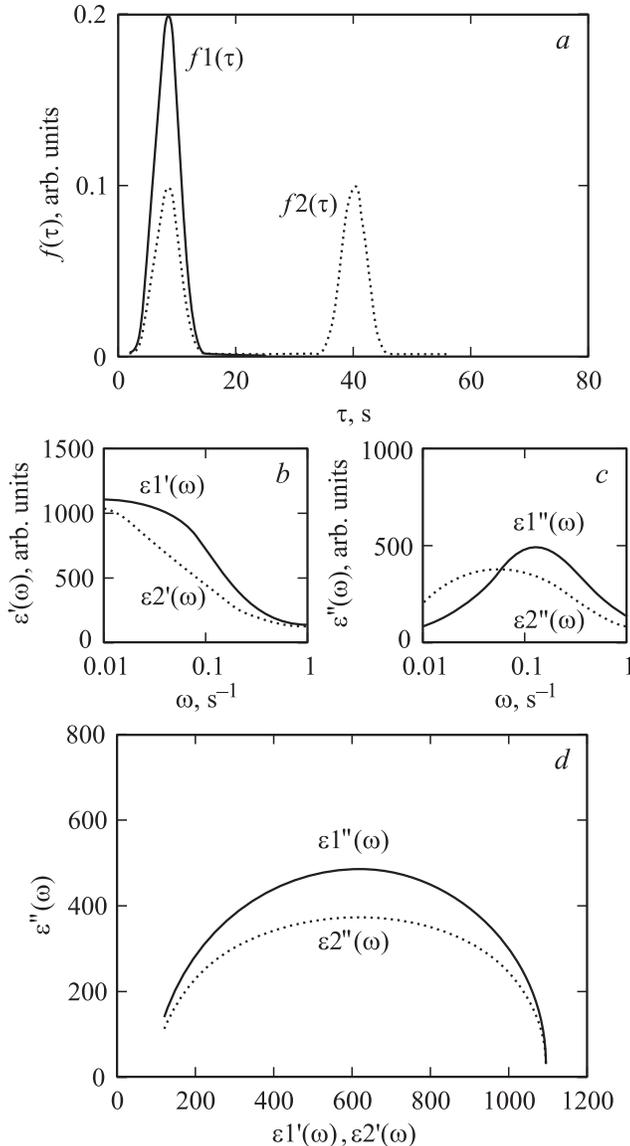


Рис. 1. Результаты моделирования диэлектрических характеристик для двух функций распределения релаксаторов. *a* — функции распределения: *f1* — с одним характерным временем релаксации, *f2* — с двумя характерными временами релаксации; *b* — действительные части диэлектрических проницаемостей; *c* — мнимые части диэлектрических проницаемостей; *d* — диаграммы Коула–Коула.

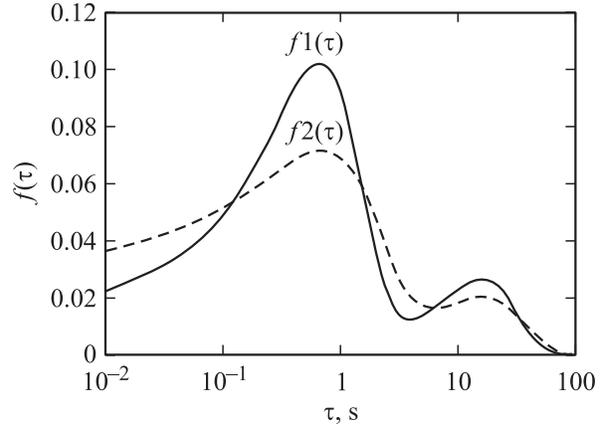


Рис. 2. Функции распределения релаксаторов по временам релаксации, рассчитанные по экспериментальным спектрам. *f1*(τ) — по спектру $\varepsilon'(\omega)$, *f2*(τ) — по спектру $\varepsilon''(\omega)$.

Далее решается уравнение общего вида

$$Ay = \int_a^b K(x, y) \cdot y(s) ds = \xi(x), \quad c \leq x \leq d, \quad (5)$$

где для действительной части комплексной диэлектрической проницаемости

$$\xi(x) = \xi'(x)$$

$$\text{и ядро } K(x, y) = (1 + g^{-2(x-s)})^{-1}, \quad (6)$$

а для мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости

$$\xi(x) = \xi''(x)$$

$$\text{и ядро } K(x, y) = g^{-(x-s)}(1 + g^{-2(x-s)})^{-1}. \quad (7)$$

Для решения уравнения (5) может быть использована любая стандартная методика, например из [5]. Тестирование разработанной в системе Turbo-Pascal программы проводилось на модельных спектрах при внесении погрешности в виде белого шума на уровне 3% от среднего значения $\xi'(x)$. Уширение функции распределения релаксаторов при расчете по уравнению (6) составило 25%, в то время как расчет по уравнению (7) привел к уширению спектра релаксаторов на 60%.

Результаты обработки спектров $\varepsilon'(\omega)$ и $\varepsilon''(\omega)$, снятых в диапазоне частот $10^{-3} - 10^3$ Hz на образце керамики титаната бария, представлены на рис. 2. Видно, что спектр релаксаторов, определенный по $\varepsilon'(\omega)$ (кривая *f1*) уже приблизительно на 30%, чем спектр релаксаторов, определенный по $\varepsilon''(\omega)$ (кривая *f2*). Погрешность измерения $\varepsilon'(\omega)$ не превышает 2%, погрешность измерения $\varepsilon''(\omega)$ около 10%.

Таким образом, методику определения функции распределения релаксаторов по спектру $\varepsilon'(\omega)$ можно считать более эффективной, чем по спектру $\varepsilon''(\omega)$, при соответствующем соотношении погрешностей измерения $\varepsilon'(\omega)$ и $\varepsilon''(\omega)$.

Список литературы

- [1] Р.М. Печерская, В.Ф. Тиллес. Изв. АН. Сер. физ. **64**, 6, 1084 (2000).
- [2] В.Ф. Тиллес, Р.М. Печерская, А.М. Метальников. Изв. АН. Сер. физ. **67**, 8, 1206 (2003).
- [3] Г. Фрелих. Теория диэлектриков. Наука, М. (1960). 269 с.
- [4] А.М. Metalnikov, V.F. Tilles. The third international seminar on relaxor ferroelectrics. Abstract book. Dubna (2000). P. 86.
- [5] С.М. Усманов. Релаксационная поляризация диэлектриков: Расчет спектров времен диэлектрической релаксации. Наука, М. (1996). 144 с.