

极化能微观机制的探究

理科实验一班
周小龙 PB13000669
朱 勉 PB13000705

content

- 引言
- 位移极化的微观机制
- 取向极化的微观机制
- 小结
- 参考文献

一、引言

- 电介质中的静电能与极化能

$$W_e = \frac{1}{2} \iiint \rho_0 U dV \quad W' = -\frac{1}{2} \iiint \rho' U dV$$

- 极化能的正负

– 负：极化过程是静电场对极化电荷做功（课本P7）

– 正：极化能密度： $\omega_{\text{极}} = \frac{1}{2} \vec{P} \cdot \vec{E}$

一、引言

- 极化能的一些解释

– 在极化过程的中，电场对介质做功，使其发生形变，转化为极化能；

– 在介质中建立电场，要克服分子内部（对位移极化情况）或分子之间（对取向极化情形）的相互作用做功，转化为介质的极化能。

- 缺少微观机制

– 目前已有的解释都是宏观定性的解释；

– 要更好地理解极化能，需要微观机制及定量的公式推导。

二、位移极化的微观机制

- 基本观点

- 无极分子在电场中，电子会被“拉”向一边而核被拉向另一边，从而感生了一个偶极矩，这偶极矩在介质内的平均效果，就是极化强度 \mathbf{P} 。
- 极化的过程中，电场对分子做功，转化为分子的内能，表现为分子的静电势能和动能。所有分子增加的内能之和即极化能。

二、位移极化的微观机制

- 公式推导

- 由波动力学理论，在有策动外力的情况下，电子的行为如同被弹簧拴着一样，而核对其的作用效果如同线性恢复力。
- 电子的运动方程：

$$-eE_i = m \frac{d^2 x}{dt^2} + m\omega_0^2 x \quad (1)$$

其中： m 为电子质量， ω_0 为共振频率， x 为负电荷重心相对正电荷重心的位移， E_i 为考察分子感受的外场，称为有效电场。

二、位移极化的微观机制

- 公式推导

- (1) 式对 dx 积分得:

$$\int_0^{x_0} -eE_i dx = \int_0^{v_0} d\left(\frac{1}{2}mv^2\right) + \int_0^{x_0} m\omega_0^2 x dx = \frac{1}{2}mv_0^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_0^2 \quad (2)$$

其中 v_0 和 x_0 分别为极化完成后电子的速度及位移。

- (2) 式的物理意义:

静电场对分子做功，转化为分子的动能及势能。

二、位移极化的微观机制

- 公式推导

- 极化完成后为静态

$$v_0 = 0 \quad -eE = m\omega_0^2 x_0 \Rightarrow x_0 = \frac{-eE}{m\omega_0^2}$$

$$p_0 = -ex_0 = \frac{e^2 E}{m\omega_0^2}$$

其中 E 和 p_0 分别为极化后的总电场和分子偶极矩。

- 带入 (2) 式: $\int_0^{x_0} -eE_i dx = \frac{1}{2} p_0 E$

二、位移极化的微观机制

- 公式推导

- 有效电场对单位体积介质做功：

$$a = \sum_{i=1}^n \int_0^{x_0} -eE_i dx = \frac{1}{2} np_0 E = \frac{1}{2} PE = w'$$

即：有效电场对介质做功，转化为介质的极化能。

三、取向极化的微观机制

- 基本观点

- 有极分子可抽象为电偶极子。无外场时，分子的取向分布完全无序，不体现极化。在外电场作用下，分子的取向趋向于外场的方向，取向变化在介质内的平均效果即为极化强度 \mathbf{P} 。

- 分子取向改变的过程中，外界电场对分子做功，分子电势能改变。同时由于涨落的存在，体系在演化至平衡态后，分子仍存在无规热运动，具有一定的动能。动能与电势能改变的总的效应即为体系极化能的增加。

幻灯片 10

x2 取向极化部分参照上面的格式来写。
[徐春凯], 2014/6/11

三、取向极化的微观机制

- 公式推导

—考虑一宏观足够小而微观足够大的体积微元 dV ，初始时外电场为零，设完成极化时该微元处总电场为 E_0 。加入外电场后，微元 dV 内的能量由动能和势能组成，这就是其极化能的微观体现。

先考察势能项，只需考察末态的电势能。分子电偶极矩在外电场中的能量为 $-\vec{p} \cdot \vec{E}$

由Boltzmann分布律， \vec{p} 关于的分布 $n(\theta) = Ce^{\frac{pE}{kT} \cos \theta}$

C为归一化常数，满足：

$$\int_0^{2\pi} C e^{\frac{pE}{kT} \cos \theta} \sin \theta d\theta = 1$$

三、取向极化的微观机制

- 公式推导

—以氢原子为例，波尔半径为 $5.3 \times 10^{-11} \text{ m}$ ，元电荷为 $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ ，取外电场场强为 10000 V/m ，则 $PE/k = 6.14 \times 10^{-3}$ ，因此除了常低温环境下均有 $KT \gg PE$ ，则：

$$C \int_0^{2\pi} e^{\frac{pE}{kT} \cos \theta} \sin \theta d\theta = 1 \Rightarrow C = \frac{pE}{2kT} \sinh^{-1} \left(\frac{pE}{2kT} \right)$$

于是体系的静电能 $\langle V \rangle$ 为：

$$\langle V \rangle = \int_0^{2\pi} C e^{\frac{pE}{kT} \cos \theta} \cdot (-pE \cos \theta) \sin \theta d\theta = kT - pE \coth \left(\frac{pE}{kT} \right) \approx -pE$$

而由位力定律得：

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \langle \vec{F} \cdot \vec{r} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \vec{p} \cdot \vec{E} \rangle = -\frac{1}{2} \langle V \rangle = \frac{1}{2} pE$$

三、取向极化的微观机制

- 公式推导

—此处计算的动能，应当对应分子取向改变的动能，即这部分动能由分子的进动动能及章动动能组成，对应自由度为2，而若不考虑位移极化，分子内部无振动，即分子为刚体，有6个自由度，按能均分定律，总的动能为：

$$\langle T_{\Sigma} \rangle = \frac{6}{2} \langle T \rangle = \frac{3}{2} pE$$

故总的能量为：

$$\langle E \rangle = \langle T_{\Sigma} \rangle + \langle V \rangle = \frac{1}{2} pE$$

根据定义，电极化强度为：

$$\bar{p} = \frac{\sum \bar{p}}{V} = \frac{\int_0^{\pi} C e^{\frac{pE}{kT} \cos \theta} p \cos \theta \sin \theta d\theta}{V} = \frac{\bar{p}}{V}$$

三、取向极化的微观机制

- 公式推导

—能量密度为：

$$\omega = \frac{\langle E \rangle}{V} = \frac{\frac{1}{2} pE}{V} = \frac{1}{2} \bar{p} \cdot \bar{E}$$

这与极化能公式相符。

从推导过程中可以看出，加入外界电场以后，电势能反而降低了。这也很容易理解，因为静电体系总是会趋于向静电能最低的位置演化。然而加入电场后，电偶极子的取向有序化，熵减小，这意味着体系分子无序运动的剧烈程度加大，即内能上升。计算表明，这两者的和效应是使能量升高，且升高量恰为体系极化能的增量。

四、小结

- 探索了位移极化和取向极化的微观机制；
- 定量推导出位移极化和取向极化的极化能公式，与已有公式相符，验证了我们提出的微观机制的正确性。

参考文献：

- [1] 胡友秋，程福臻，叶邦角，电磁学与电动力学（上册），科学出版社，2008，第73页
- [2] 赵凯华，陈熙谋，电磁学（第三版），高等教育出版社，2011
- [3] 赵凯华，罗薇茵，热学（新概念物理学教程），高等教育出版社，2011
- [4] E.M.柏塞尔，电磁学（伯克利物理教程第二卷），科学出版社，1979，第419页
- [5] R.P.费恩曼，费恩曼物理学讲义（第二卷），上海科学技术出版社，2005，第133页

幻灯片 15

x2 取向极化部分参照上面的格式来写。
[徐春凯], 2014/6/11

