

Zusammenfassung

Berechnung der Relaxationspolarisation mehrphasiger Dielektrika

Es ist das Ziel dieses Projektes, die Relaxationspolarisation zusammengesetzter wechselwirkender Systeme zu berechnen, wenn die elementaren Bausteine der einzelnen Systeme bekannt sind. Die Bausteine wechselwirken über ihre elektrischen Felder nicht nur innerhalb der Systeme miteinander, sondern auch über die Systemgrenzen in das Nachbarsystem hinein. Bausteine sind die neutralen Atome mit elektronischer Polarisierbarkeit α für die induzierte Hochfrequenzpolarisation und Ladungen, die in Doppelmuldenpotentialen thermisch aktiviert fluktuieren, für die Relaxation. Die Barriere W_0 zwischen den Potentialminima und ihr Abstand R sind, wie α , Eingabeparameter. Weitere Parameter sind die Dichten der neutralen Atome, die Dichten der Doppelmuldenpotentiale und die Ladungsstärken (e , $2e$). Die Felder bzw. Potentiale an den Orten aller Bausteine werden mit der Spiegelungsmethode berechnet. Mit einem dynamischen Monte-Carlo Verfahren erhält man iterativ die zeitliche Entwicklung der Polarisation. Bisher wurden entweder polarisierbare neutrale Atome oder Dipole in Doppelmuldenpotentialen betrachtet. Die wesentlichen Ergebnisse sind:

Wechselwirkende neutrale Atome in amorpher Struktur liefern das Clausius-Mossotti Verhalten. Nicht wechselwirkende Dipolsysteme mit $W_0 = \text{const.}$ ergeben eine Relaxation mit exponentiellem Zeitverhalten, das bei Wechselwirkung in eine gedehnte Exponentialfunktion übergeht. Diese erhält man auch im Falle einer Verteilung von W_0 . Liegt zusätzlich ein wechselwirkendes System vor, wird die Dehnung entsprechend breiter. Die Relaxationszeit des gesamten Systems folgt ohne Wechselwirkung dem Arrhenius - und mit Wechselwirkung dem Vogel-Fulcher - Gesetz.

In Serie liegende wechselwirkende Systeme mit je einer Relaxationszeit zeigen auch im Gesamtverhalten -anders als im Ersatzbild konzentrierter Elemente erwartet - zwei Relaxationszeiten. Bei zwei Systemen in Serie mit verschiedenen Verteilungen von Relaxationszeiten, liegt die Gesamtantwort zwischen den Einzelantworten, wie auch im Experiment beobachtet.

In der Weiterführung des Projektes wird zunächst die Wechselwirkung zwischen induzierten Dipolen und relaxierenden Ladungssystemen, vornehmlich Ionen, und, nur zum Vergleich, auch Dipolen, betrachtet.

Im nächsten Punkt wird der Einfluß von thermischen Vibrationen auf die Entwicklung der Polarisation untersucht. Mit diesen Grundlagen können nun die Rechnungen an Hand durchgeführter Experimente, bei dem zwei Systeme in Serie liegen, kalibriert werden. Dann wird der Einfluß von Interfaces auf die Gesamtpolarisation untersucht. Dünne Schichten aus verschiedenen Systemen werden aufeinander gestapelt und es wird die Gesamtpolarisation in Abhängigkeit von der Zahl der Interfaces und das Polarisationsprofil berechnet. Die Rechnungen werden mit Realexperimenten überprüft. Geplant sind Stapel von Hafniumoxid und Aluminiumoxid.

Abstract

Computation of relaxational dielectric polarization of composites

The aim of this project is to calculate the relaxation polarization of composite interacting systems, when the elementary building blocks of each system are known. The building blocks interact via their electric fields not only within the systems but also across the boundaries into the neighboring system. Building blocks are the neutral atoms with their electronic polarizability α for the induced high frequency polarization, and charges which fluctuate thermally activated in double well potentials for the relaxation. The barrier height W_0 between the potential minima and their distance R are, like α , input parameters. Other input parameters are the densities of the neutral atoms, the densities of the double well potentials and the charge strengths (e , $2e$). The fields or potentials at the locations of all charges are calculated using the method of images. A dynamic Monte Carlo procedure is used to obtain iteratively the time development of the polarization. So far, only either polarizable neutral atoms or dipoles in double well potentials have been considered. The main results are:

Interacting neutral atoms in amorphous structure provide the Clausius-Mossotti behavior. Non-interacting dipole systems with $W_0 = \text{const}$ give a relaxation with an exponential time behavior, which in case of interaction is converted into a stretched exponential function and also in the case of a distribution of W_0 . If in addition an interacting system is present, the stretching becomes correspondingly broader. The relaxation time of the whole system follows without interaction the Arrhenius law and with interaction the Vogel-Fulcher behavior.

Interacting systems in series with one relaxation time each also show two relaxation times in the total behavior - different from what is expected in the equivalent circuit of concentrated elements. For two systems in series with different distributions of relaxation times, the overall response lies between the individual responses as observed experimentally.

In the continuation of the project, first the interaction between induced dipoles and relaxing charge systems, mainly ions, and only for comparison, also dipoles, will be considered.

In the next point the influence of thermal vibrations on the evolution of the polarization will be investigated. With these basics, the calculations can now be calibrated on the basis of experiments performed with two systems in series. Finally, the influence of interfaces on the total polarization is investigated. Thin layers of different systems are stacked on top of each other and the total polarization is calculated as a function of the number of interfaces as well as the polarization profiles at the interfaces. The calculations will be checked with real experiments. Stacks of hafnium oxide and aluminum oxide are planned.