

# 6. Dielektrische Eigenschaften von Isolatoren

Da die Ladungen nicht in einem Isolator nicht frei bewegen können, kann elektr. Feld in Probe eindringen. Man interessiert

- statische Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_0$
- optische Eigenschaften, d.h. Resonanz auf e.m. Strahlung  $\epsilon_{\infty}$
- Frequenz Dk  $\epsilon(\omega)$

**Ausgangspunkt:** Maxwell-Gl der Elektrostatik. Dabei muss unterscheidet werden zw. makroskop. und mikroskop. elektr. Feld

## 6.1 Makroskop. und mikroskop. elektr. Feld

Auf atomarer Skala variiert die Ladungsdichte  $\rho$  ( $\vec{r}$ ) eines Isolatoren sehr schnell, ebenso das mikroskop. Feld  $\vec{E}^{\text{mikro}}$  wegen

$$\nabla \cdot \vec{E}^{\text{mikro}}(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho^{\text{mikro}}(\vec{r})$$

$\rho$  die elektr. Polarisierung

$$\nabla \cdot \vec{D} = \nabla \cdot (\epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}) + \vec{P}(\vec{r})) = 0$$

gemittelt über Einheitszelle

Definiere das makroskop. elektr. Feld in der Probe

 durch  $\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \int d\vec{r}' \vec{E}^{\text{mikro}}(\vec{r}')$

wobei z.B. eine Einheitszelle interpretiert wird. (Volumen  $V$ )


• 3. Allg.  $\vec{E} = \vec{E}_0$  (äußeres Feld). Das äußere Feld erzeugt Polarisation  $\vec{P}$  in der Probe, Diskontinuität von  $\vec{P}$  an der Oberfläche Ladung, wirkt wie fiktive Oberflächenladung, die ein depolarisierendes Feld  $\vec{E}_1$  erzeugt.  $\vec{E}_1$  ist  $\vec{E}_0$  entgegengerichtet.  $E_1 < E_0$

• Für Ellipsoide (einschl. Kugeln, Scheiben, Zylinder) ist bei räumlich homogenem  $\vec{E}_0$  auch  $\vec{P}$  homogen.  $\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}_1$   
äußere, e.o. Feld

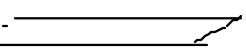
• Wenn  $\vec{E}_0$  // einer Hauptachsen

$N_i$ : Depolarisierungsfaktoren, dimensionslos es gilt:  $N_1 + N_2 + N_3 = 1$

$N_1, N_2, N_3$  für belieb. Ellipsoid mit 3 Hauptachsen

• für Kugel  $3N_1 = 1 \quad N_1 = \frac{1}{3}$  

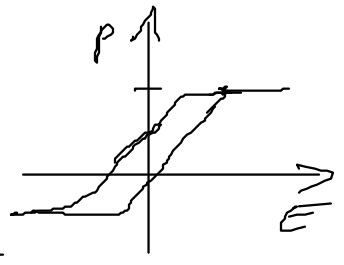
• langer Stab  $N_1 = N_2 = \frac{1}{2} \quad N_3 = 0$    $2N_1 + N_3 = 1$

• Schicht  $N_1 = N_2 = 0 \quad N_3 = 1$  

Die Größe der Polarisation hängt ihrerseits von  $N$  ab. Mit der Def. der diehr. Suszeptibilität  $\chi$  durch

$$\vec{P} = \chi \epsilon_0 \vec{E} \Rightarrow \vec{E}_0 + \vec{E}_T = \vec{E}_0 - \frac{1}{\epsilon_0} N \vec{P}$$

$$\vec{P} = \frac{\chi \epsilon_0}{1 + N \chi} \vec{E}_0$$



• für  $\chi \gg 1$ :  $P \approx \frac{\epsilon_0 \epsilon_0}{N}$  Bsp. Ferroelektrika

### Wie groß ist das lokale Feld am Ort eines Atoms?

Lokales Feld = makroskop. Feld vermindert um den Beitrag des Ions selbst: Lokales Feld = Feld durch äußere Quelle + Feld durch Dipole in der Probe

$$\vec{E}^{lok} = \vec{E}_0 + \vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \vec{E}_3$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\vec{E}}$ 
Feld durch Dipole



$$\vec{E}^{lok} \neq \vec{E}_i$$

Aufspaltung des Feldes durch Dipole durch (gedachte) Kugel um betrachtete Ion

$\vec{E}_2$  Feld durch Polarisierungsladungen auf Innenseite der Kugel

$\vec{E}_3$  Feld durch die Ladung in der Kugel

$$\vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \vec{E}_3 = \sum_i \frac{3(\vec{p}_i \cdot \vec{r}_i) \vec{r}_i - r_i^2 \vec{p}_i}{4\pi \epsilon_0 r_i^5}$$

### Summe der Aufspaltung

Dipole außerhalb der Kugel (Radius  $r_0$ ) liegen, liefern anderen Beitrag, der glatt verläuft, d.h. wir können die Summe ersetzen durch zwei Oberfl. Integrale über Polarisationsladungen.

### Es gilt Satz aus Elektrostatik:

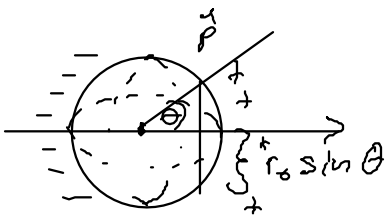
Makroskop. Feld, das durch eine räuml. konst. Polarisierung  $P$  hervorgerufen wird, ist gleich dem Feld, das im Vakuum durch eine fiktive Oberfl. Ladungsdichte  $\sigma = \vec{n} \cdot \vec{P}$ , die auf der Probe sitzt entsteht.  $n \perp$  zur Oberfl.

• Wir können also die Oberfl. berechnen, die zu  $\vec{E}_1$  und  $\vec{E}_2$  führen

•  $\vec{E}_1$  über Oberfl. der Probe =  $\frac{1}{\epsilon_0} N \vec{P}$

•  $\vec{E}_2$  über Kugel mit Radius  $r_0 \approx 100 \text{ \AA}$ , d.h.  $10^{-20}$  Gitterkonst. auf deren Längenskala ist  $\vec{p}$  räuml. konst.

$$\vec{E}_2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\vec{E}_2}{r_0^2} dA \quad \text{"Lorenzfeld"}$$



$$\vec{E}_2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \int d\Omega r_0 \sin\theta \, n_i d\Omega \cdot p \cos\theta \cos\theta$$

$$= \frac{1}{2\epsilon_0} \vec{p} \left[ -\frac{\cos^3\theta}{3} \right]_{\pi}^0 = \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{p} \quad \text{Unabh. von } r_0!$$

•  $\vec{E}_3$  hängt ab von Details der Kristallstruktur. Im kubischen System und alle Dipole  $\parallel z$ :

$$E_{3z} = \vec{p} \sum_i \frac{3z_i^2 - r_i^2}{4\pi\epsilon_0 r_i^5} = \vec{p} \sum_i \frac{2z_i^2 - x_i^2 - y_i^2}{4\pi\epsilon_0 r_i^5}$$

Symmetrie von Kugel und Kugel in  $x, y, z$ -Richtung äquivalent

$$\sum_i \frac{z_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{x_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{y_i^2}{r_i^5} \Rightarrow \vec{E}_3 = 0$$

• Bei kubischer Symmetrie des Atoms

$$\vec{E}^{loc}(\vec{r}) = \vec{E}(\vec{r}) + \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{p}(\vec{r}) \quad \text{Lorenzbeziehung}$$

besonders bei Beschreibung von Dielektrika.

## 6.2 Dielektrische Konstante und Polarisiertbarkeit

Dielektr. Konstante  $\epsilon$  eines isotropen oder kubischen Mediums

$$\vec{D} = \epsilon \epsilon_0 \vec{E} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{p}$$

$$\vec{p} = (\epsilon - 1) \epsilon_0 \vec{E} = \chi \epsilon_0 \vec{E}$$

•  $\vec{E}$ : makroskop. elektr. Feld

• nicht kubische Kristalle:  $\epsilon, \chi$  Tensoren 2. Stufe

$$p_\mu = \chi_{\mu\nu} \epsilon_0 E_\nu \quad \epsilon_{\mu\nu} = 1 + \chi_{\mu\nu}$$

• kubische Polarizierbarkeit:

$$\vec{p}(\vec{r}) = (\epsilon - 1) \epsilon_0 \vec{E}(\vec{r})$$

$$\vec{E}^{loc}(\vec{r}) = \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E}(\vec{r})$$

### Polarisierbarkeit $\alpha$ eines Atoms (Ions)

$$\vec{p} = \alpha \vec{E}^{loc} \quad \vec{p} \text{ ist das atomare Dipolmoment}$$

$$\text{Polarisation } \vec{P} = \frac{1}{V} \sum_j N_j \vec{p}_j = \frac{1}{V} \sum_j N_j \alpha_j \vec{E}_j^{loc} = \frac{1}{V} \sum_j N_j \alpha_j \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E}$$

$j$  verschiedene Atomsorten

$$= (\epsilon - 1) \epsilon_0 \vec{E}$$



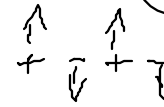
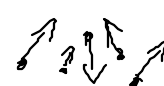
$N_j$  Anzahl

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0} \frac{1}{V} \sum_j N_j \alpha_j$$

Clauwens - Lorentz-Beziehung

Zusammenhang zw. makroskop. ( $\epsilon$ ) und mikroskop. ( $\alpha_j$ ) Größen

## Mikroskop Ursache der Polariserbarkeit

- Elektronische Pol. (oder Atomanal.)  
- Ionische (Verschiebungspol.) 
- Dipolare (Orientierungspol.) 

## 6.3 Verschiebungspolarisation

trifft z.B. bei opt. Gitterschwingungen auf

**Beispiel:** Kristall mit 2 Ionensorten,  $e^-$  und  $e^+$  ohne Atomanal. Pol.  $\vec{p} = e \vec{w}$   $\vec{w} = \vec{u} - \vec{v}$  ( $f = \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_x \partial r_y} = \text{Tensor}$ )  
 bei Verzerrung des Kristalls (langsame Änderung auf atomarer Skala)

**BGLs**  $M \ddot{u} = -2f(u-v) + e E \cos \omega t$   
 $m \ddot{v} = -2f(v-u) - e E \cos \omega t$  red. Masse  $\mu = \frac{mM}{m+M}$

$$\ddot{w} = \ddot{u} - \ddot{v} = \frac{e}{m} E \cos \omega t - \frac{2f}{m} 2w$$

**Ansatz:**  $E \cos \omega t = E_0 e^{-i\omega t}$   $\Rightarrow w = \tilde{w}_0 e^{-i\omega t}$   
 $\tilde{w}_0 = \frac{e E_0}{\mu} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2}$   $\omega_0^2 = \frac{2f}{m}$