WALTHER–MEISSNER–INSTITUT 19. Mai 2011
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 3**

Übungsaufgaben zur

Physik der Kondensierten Materie II, SS 2011

11 Dielektrische Eigenschaften

11.2 Makroskopisches elektrisches Feld

Wird ein ellipsoidförmiger dielektrischer Festkörper in ein homogenes elektrisches Feld $\mathbf{E}^{\rm ext}$ gebracht, so wird dieser homogen polarisiert und wir erhalten im Innern des Festkörpers ein makroskopisches elektrisches Feld der Stärke $\mathbf{E}^{\rm mak} = \mathbf{E}^{\rm ext} + \mathbf{E}_N$ mit dem Entelektrisierungsfeld $\mathbf{E}_N = -N\mathbf{P}/\epsilon_0$. Die Größe N ist dabei der Entelektrisierungsfaktor der Probe, der im allgemeinsten Fall einen Tensor 2. Stufe darstellt, und $\mathbf{P}$ die in der Probe vorliegende homogene Polarisation.

1. Zwischen den Hauptkomponenten des Entelektrisierungstensors besteht die Beziehung $N_{xx} + N_{yy} + N_{zz} = 1$. Welche Werte müssen die Hauptkomponenten für einen langen Stab, eine Kugel und eine dünne Scheibe annehmen?
2. Leiten Sie einen Ausdruck für das in der Probe herrschende makroskopische elektrische Feld $\mathbf{E}^{\rm mak}$ her.
3. Welcher Zusammenhang besteht in diesem Fall zwischen der dielektrischen Verschiebungsdichte $\mathbf{D}$ und dem extern angelegten elektrischen Feld $\mathbf{E}^{\rm ext}$?
4. Berechnen Sie das Verhältnis $E^{\rm mak}/E^{\rm ext}$ für einen Festkörper mit einer Dielektrizitätskonstante von $\epsilon = 2.5$, wenn dieser die Form eines langen Stabes, einer Kugel oder einer dünnen Scheibe besitzt. Das externe elektrische Feld soll dabei parallel zum Stab bzw. senkrecht zur Scheibe angelegt sein.

11.3 Plasmafrequenz und elektrische Leitfähigkeit von Metallen

Mit optischen Messungen bestimmen Sie die Plasmafrequenz eines organischen Leiters zu $\omega_p = 1.8\times10^{15}\ \mathrm{s}^{-1}$. Die Relaxationszeit der Elektronen in diesem Material beträgt bei Raumtemperatur $\tau = 2.83\times10^{-15}\,\mathrm{s}$.

1. Berechnen Sie aus diesen Daten die elektrische Leitfähigkeit σ. Gehen Sie dabei von einer verschwindend kleinen elektronischen Polarisierbarkeit des Materials aus. Hinweis: Die effektive Masse der Ladungsträger ist nicht bekannt und wird hier auch nicht benötigt.

2. Aus der Kristall– und chemischen Struktur erhält man die Dichte der Leitungselektronen zu $n = 4.7 \times 10^{21}\,\mathrm{cm}^{-3}$. Berechnen Sie mit diesem Wert die effektive Masse $m^\star$ der Elektronen.

11.4 Ferroelektrisches Kriterium für Atome

Gegeben sei ein System aus zwei Atomen mit festem Abstand a und der Polarisierbarkeit α für jedes Atom. Welche Beziehung muss zwischen a und α gelten, wenn das System ferroelektrisch sein soll?
Hinweis: Das Dipolfeld ist am stärksten entlang der Dipolachse.

11.5 Lineare ferroelektrische Anordnung

Gegeben sei eine Kette von Atomen mit der Polarisierbarkeit α und dem gegenseitigen Abstand a. Zeigen Sie, dass die Anordnung eine spontane Polarisierung entwickeln kann, wenn

$$\alpha \geq \frac{\pi a^3}{\sum\limits_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3}} \; .$$

WALTHER–MEISSNER–INSTITUT 19. Mai 2011
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 3**

Lösungen der Übungsaufgaben zur

Physik der Kondensierten Materie II, SS 2011

11 Dielektrische Eigenschaften

11.2 Makroskopisches elektrisches Feld

1. Für eine *Kugel* müssen aus Symmetriegründen die drei Hauptkomponente des Entelektrisierungstensors gleich sein (eine homogene Kugel vorausgesetzt). Es gilt dann $N_{xx} = N_{yy} = N_{zz} = 1/3$.

   Für einen *Stab*, dessen Länge als unendlich angenommen wird, tritt an dessen Längsrichtung keine Entelektrisierung auf. Falls die Längsrichtung die z–Richtung ist, gilt $N_{zz} = 0$. Aufgrund der Zylindersymmetrie in der xy–Ebene müssen die beiden verbleibenden Komponenten wiederum gleich sein, d.h. es gilt $N_{xx} = N_{yy} = 1/2$.

   Für eine in der xy–Ebene unendlich ausgedehnte *Scheibe* tritt innerhalb der Ebene keine Entelektrisierung auf. Das heißt, es gilt $N_{xx} = N_{yy} = 0$. Damit muss für die dritte Hauptkomponente $N_{zz} = 1$ gelten.

   Reale Proben besitzen immer endliche Abmessungen, weshalb die für den Stab und die Scheibe ermittelten Werte nur Näherungen darstellen.

2. Wir gehen von einem linearen Zusammenhang $\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}^{\text{mak}}$ zwischen Polarisation und makroskopischem elektrischem Feld aus. Es gilt dann:

$$\mathbf{E}^{\text{mak}} = \mathbf{E}^{\text{ext}} + \mathbf{E}_N = \mathbf{E}^{\text{ext}} - N\frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0} = \mathbf{E}^{\text{ext}} - N\chi\mathbf{E}^{\text{mak}} \quad . \tag{1}$$

   Lösen wir nach $\mathbf{E}^{\text{mak}}$ auf, so erhalten wir

$$\mathbf{E}^{\text{mak}} = \frac{\mathbf{E}^{\text{ext}}}{1+N\chi} = \frac{\mathbf{E}^{\text{ext}}}{1+N(\epsilon-1)} = \frac{\mathbf{E}^{\text{ext}}}{1-N+N\epsilon} \quad . \tag{2}$$

   Das heißt, das makroskopische elektrische Feld im Innern eines Festkörpers hängt linear von der Stärke des externen Feldes ab. Da $0 \leq N \leq 1$, und χ stets positiv ist, können wir folgern, dass die Stärke des makroskopischen Feldes im Dielektrikum stets kleiner oder gleich der Stärke des externen Feldes ist.

3. Der allgemeine Zusammenhang zwischen der dielektrischen Verschiebungsdichte $\mathbf{D}$ und dem makroskopischen elektrischen Feld $\mathbf{E}^{\text{mak}}$ lautet

$$\mathbf{D} \;=\; \epsilon_0 \mathbf{E}^{\text{mak}} + \mathbf{P} \quad . \tag{3}$$

Mit $\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}^{\text{mak}}$ folgt daraus

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \epsilon_0 \mathbf{E}^{\text{mak}} + \epsilon_0 \chi \mathbf{E}^{\text{mak}} \;=\; (1+\chi)\epsilon_0 \mathbf{E}^{\text{mak}} \\ &= \epsilon \epsilon_0 \mathbf{E}^{\text{mak}} \quad . \end{aligned} \tag{4}$$

Setzen wir jetzt noch (2) ein, so erhalten wir

$$\mathbf{D} \;=\; (1+\chi)\epsilon_0 \mathbf{E}^{\text{mak}} \;=\; \frac{1+\chi}{1+N\chi}\,\epsilon_0 \mathbf{E}^{\text{ext}} \quad . \tag{5}$$

4. Für einen Festkörper mit $\epsilon = 2.5$ erhalten wir die elektrische Suszeptibilität zu $\chi = \epsilon - 1 = 1.5$.
Für einen *langen Stab* beträgt für die Feldrichtung parallel zum Stab der Entelektrisierungsfaktor $N = 0$ und damit nach (2)

$$\mathbf{E}^{\text{mak}} = \mathbf{E}^{\text{ext}}$$

Das heißt, das elektrische Feld im Innern des Stabes stimmt mit dem von außen angelegten Feld überein.

Bei einer *dünnen Scheibe* mit einem äußeren Feld senkrecht zur Scheibe ist $N = 1$ und damit

$$\mathbf{E}^{\text{mak}} = \frac{\mathbf{E}^{\text{ext}}}{1+\chi} = \frac{\mathbf{E}^{\text{ext}}}{\epsilon}$$

Das bedeutet, dass das externe Feld im Innern der Scheibe auf $\mathbf{E}^{\text{ext}}/\epsilon$ abgeschwächt wird. Für den betrachteten Festkörper entspricht die Absenkung gerade einem Faktor $1/2.5 = 0.4$.

Für die *kugelförmige Probe* ist $N = 1/3$ und damit das Feldstärkeverhältnis

$$\frac{|\mathbf{E}^{\text{mak}}|}{|\mathbf{E}^{\text{ext}}|} = \frac{1}{1+\frac{\epsilon-1}{3}} = \frac{2}{3} = 0.666\ldots \quad .$$

11.3 Plasmafrequenz und elektrische Leitfähigkeit von Metallen

Da die elektronische Polarisation des Materials verschwindend klein sein soll, können wir $\chi_{\text{el}} = 0$ und damit $\epsilon_{\text{el}} = 1 + \chi_{\text{el}} = 1$ setzen. Dies ist in vielen Fällen eine gute Näherung. Damit können wir für die Plasmafrequenz den Ausdruck

$$\omega_p \;=\; \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 \epsilon_{\text{el}} m^\star}} \;=\; \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m^\star}} \tag{6}$$

verwenden.

1. Die elektrische Leitfähigkeit σ bei der Frequenz $\omega = 0$ ist gegeben durch

$$\sigma(0) \;=\; \frac{ne^2\tau}{m^\star} \;=\; \frac{ne^2}{\epsilon_0 m^\star}\,\epsilon_0\tau \;=\; \omega_p^2\,\epsilon_0\tau \;. \tag{7}$$

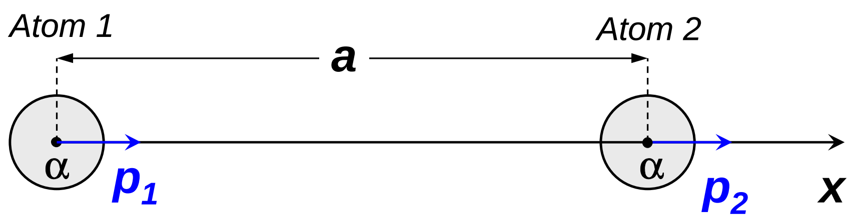
Mit $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$As/Vm und den angegebenen Werten für ω_p und τ erhalten wir, $\sigma = 8.11 \times 10^5\ \Omega^{-1}\mathrm{m}^{-1}$ oder $\rho = 1.23 \times 10^{-5}\,\Omega$m.

2. Lösen wir den Ausdruck für die Plasmafrequenz nach $m^\star$ auf, so erhalten wir

$$m^\star \;=\; \frac{ne^2}{\epsilon_0\omega_p^2} \;. \tag{8}$$

und damit $m^\star = 4.19 \times 10^{-30}$kg oder $m^\star/m_e = 4.61$. $m^\star$ ist nur dann mit der effektiven Masse identisch, wenn die Fermi–Oberfläche eine Kugel ist. Ansonsten erhält man die effektive Masse im niederfrequenten Bereich, während im hochfrequenten Bereich für beliebige Fermi–Oberflächen eine so genannte optische effektive Masse eingeführt wird.

11.4 Ferroelektrisches Kriterium für Atome



Das Dipolmoment p_2 des Atoms 2 mit Polarisierbarkeit α am Ort $x = a$ ist gegeben durch

$$p_2 = \alpha\epsilon_0 E^{\mathrm{lok}} = \alpha\epsilon_0 E(a) \tag{9}$$

Wir müssen nun das lokale elektrische Feld $E^{\mathrm{lok}} = E(a)$ bestimmen, das durch das Atom 1 an der Stelle $x = a$ des Atoms 2 erzeugt wird. Nehmen wir an, dass das Atom 1 einen elektrischen Dipol der Stärke p_1 besitzt, so können wir für das resultierende Dipolfeld schreiben:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) \;=\; \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{3(\mathbf{p}\cdot\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}} - \mathbf{p}}{r^3} \;. \tag{10}$$

Hierbei ist $\widehat{\mathbf{r}}$ der Einheitsvektor in Richtung von $\mathbf{r}$. Nehmen wir an, dass $\mathbf{p}_1$ in Richtung der Verbindungsachse der beiden Atome zeigt, so können wir $\mathbf{r} = a\widehat{\mathbf{x}}$ schreiben und ferner das Skalarprodukt durch eine Multiplikation der Beträge ersetzen. Wir erhalten damit

$$E(a) \;=\; \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{3p_1 - p_1}{a^3} \;=\; \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{2p_1}{a^3} = \frac{p_1}{2\pi\epsilon_0 a^3} \;. \tag{11}$$

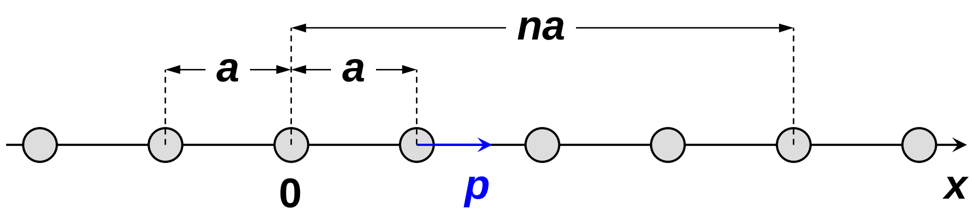
Mit $p_2 = \alpha\epsilon_0 E^{\mathrm{lok}} = \alpha\epsilon_0 E(a)$ erhalten wir dann

$$p_2 \;=\; \frac{\alpha}{4\pi}\,\frac{2p_1}{a^3} = \frac{\alpha p_1}{2\pi a^3} \;. \tag{12}$$

Zum einen ist natürlich $p_1 = p_2 = 0$ eine Lösung dieser Gleichung. Im Falle eines Ferroelektrikums interessieren wir uns aber für die Lösung mit $p_1 = p_2 = p \neq 0$. Dann muss nach (12) $\alpha = 2\pi a^3$ gelten. Das ferroelektrische Kriterium lautet also

$$\alpha \;=\; 2\pi a^3 \;. \tag{13}$$

11.5 Lineare ferroelektrische Anordnung



Die Lösung erfolgt wie in Aufgabe 11.4. Für ein Atom am Ort $x = 0$ wir ein elektrisches Dipolmoment

$$p_0 = \alpha E^{\rm lok} = \alpha\epsilon_0 E(x=0)$$

induziert, wobei $E^{\rm lok} = E(0)$ das am Ort $x = 0$ erzeugte elektrische Feld der elektrischen Dipolmemente p_i aller anderen Atome an den Positionen $x_i = n_i a$ ist. In Aufgabe 11.4 haben wir für das elektrische Feld eines in x-Richtung ausgerichteten Dipolmoments zu

$$E(x) = \frac{1}{2\pi\epsilon_0}\,\frac{p_1}{x^3}$$

abgeleitet. Wir nehmen nun an, dass die Dipolmomente p_i aller Atome der Kette gleich sind, d.h. $p_1 = p_2 = p_3 = \ldots = p_i = p$. Da jedes Atom zwei Nachbarn im Abstand $x = n \cdot a$ mit $n = 1, 2, 3, \ldots$ hat, erhalten wir insgesamt für das auf ein bestimmtes Atom wirkende elektrische Feld:

$$\begin{aligned} E &= 2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{p}{2\pi\epsilon_0(na)^3} = \frac{p}{\pi\epsilon_0 a^3}\underbrace{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^3}}_{=\zeta(3)} = \frac{p}{\pi\epsilon_0 a^3}\zeta(3) \qquad (14)\\ \zeta(3) &= 1.2020569032\ldots \end{aligned}$$

in Gl. (21) haben wir die Riemannsche ζ–Funktion [Bernhard Riemann, 1826 – 1866]

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^z}$$

definiert. Andererseits ist aber $p = \alpha\epsilon_0 E^{\rm lok}$. Setzen wir für $E^{\rm lok}$ den Ausdruck (21) ein, so ergibt sich die Beziehung

$$p = \alpha\epsilon_0 E = p\,\frac{\alpha}{\pi a^3}\zeta(3)\ . \qquad (15)$$

Offensichtlich ist $p = 0$ eine Lösung. Aber auch für

$$\alpha = \frac{\pi a^3}{\zeta(3)} = \alpha_{\rm krit} \qquad (16)$$

ist ein im Prinzip beliebiges endliches elektrisches Dipolmoment p möglich. Das heißt, für $\alpha = \alpha_{\rm krit}$ ist eine ferroelektrische Anordnung von Dipolmomenten möglich. Wichtig ist, dass wir eine solche Anordnung auch dann erhalten, wenn die einzelnen Atome zunächst kein elektrisches Dipolmoment besitzen. Durch Fluktuationen treten aber immer lokale Dipolmomente auf, die dann ferroelektrisch ausgerichtete Dipolmomente auf Nachbaratomen erzeugten, die wiederum positive auf das sie erzeugende Dipolmoment zurückwirken. Für $\alpha < \alpha_{\text{krit}}$ ist die ferroelektrische Anordnung von induzierten Dipolmomenten energetisch nicht stabil. Eine durch Fluktuationen hervorgerufene lokale ferroelektrische Anordnung würde nach kurzer Zeit wieder zerfallen. Erst für $\alpha \geq \alpha_{\text{krit}}$ wird die ferroelektrische Anordnung stabil.

Nach den obigen Gleichungen kann das elektrische Dipolmoment im Prinzip beliebig große Werte annehmen. Dies resultiert aber aus der Tatsache, dass wir eine lineare Beziehung $p = \alpha\epsilon_0 E^{\text{lok}}$ zwischen Dipolmoment und lokalem Feld angenommen haben. Diese lineare Beziehung gilt aber nur für kleine lokale Felder und damit kleine Dipolmomente. Für reale Systeme sorgen Nichtlinearitäten dafür, dass nicht beliebig große Werte von p möglich sind.