

## 6.3.2 Polarisationsmechanismen

### Grundmechanismen

Im Grunde müssen wir nur **vier** grundsätzliche **Polarisationsmechanismen** anschauen:

- **Grenzflächenpolarisation** .  
Grenzflächen wie Korngrenzen, Phasengrenzen usw. sind oft geladen und enthalten unkompenzierte Dipole – schon weil es zum Beispiel in Ionenkristallen gar nicht anders geht. Wer's nicht glaubt, betätigt diesen [Link](#).
- **Atompolarisation** (manchmal auch **elektronische Polarisation** genannt).  
Ein elektrisches Feld zieht immer die "Elektronenwolke" eines Atoms in eine Richtung, und den Atomkern in die andere. Als Effekt liegen die Ladungsschwerpunkte nicht mehr aufeinander – ein elektrisches Dipolmoment wird induziert.
- **Ionische Polarisation**.  
In diesem Fall muss die Bindung einen ionischen Anteil haben, d. h. die Atome sind mehr oder weniger geladen. Was dann im Prinzip passiert, haben wir uns [schon angeschaut](#): Die vorhandenen Dipole werden größer oder kleiner, heben sich also nicht mehr perfekt gegenseitig auf. Es wird ein Netto-Dipolmoment induziert.
- **Orientierungspolarisation** .  
Sie funktioniert mit elektrischen Dipolen erstmal nur bei **Flüssigkeiten**, die aus "polaren" Molekülen bestehen, d. h. aus Molekülen mit einem festen Dipolmoment, wie z. B. **H<sub>2</sub>O**. In einer Flüssigkeit kann sich das Dipolmoment mit dem Molekül in alle mögliche Richtungen drehen. Bei Wasser ohne elektrisches Feld mit wild herumwirbelnden Wassermolekülen werden auch alle Richtungen mit gleicher Wahrscheinlichkeit vorkommen. Mit elektrischem Feld werden die Dipolmomente alle etwas in Feldrichtung gedreht; wiederum wird ein Netto-Dipolmoment induziert.

Das war's im Großen und Ganzen. Der **4. Mechanismus**, die **Orientierungspolarisation**, interessiert uns hier aus **zwei** Gründen, obwohl wir uns sonst eher nicht mit Flüssigkeiten abgeben:

1. Er ist in (mathematisch) exakt identischer Weise der wichtigste Mechanismus wenn wir nicht elektrische, sondern **magnetische** Dipole anschauen, d.h. magnetische Materialien betrachten. Deshalb nehmen wir ihn hier mal mit.
2. Er steckt hinter dem, was in der "**Mikrowelle**" so passiert. Und das sollte der **ET&IT-Ing.** seinem Gspusi oder der Verwandtschaft schon erklären können.

Jetzt schauen wir uns diese Mechanismen noch etwas im Detail an:

### Grenzflächenpolarisation

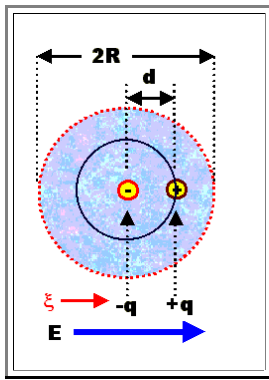
Grenzflächenpolarisation ist wichtig, aber kann nicht einfach berechnet werden – sie hängt halt von vielen Dingen ab.

- Dielektrika mit großer Suszeptibilität bzw. Dielektrizitätskonstanten in "billigen" Kondensatoren nutzen die Grenzflächenpolarisation in zusammengesinterterem Zeugs mit kleinen Körnern und daher vielen Grenzflächen.
- Sie sind "billig", weil ihr Frequenzverhalten, Durchbruchverhalten und sonstige Qualitätsmerkmale nicht spitze sind. Und das liegt auch am Dielektrikum!
- In integrierten Schaltungen sind Ladungen an den vielen Grenzflächen – die Ursache für die Grenzflächenpolarisation – oft absolut tödlich. Ein Großteil der Forschung und Technik im Bereich Mikroelektronik oder Solarzellen dreht sich um dieses Phänomen, das dann allerdings üblicherweise unter anderen Bezeichnungen läuft.

Mehr dazu brauchen wir erst mal nicht zu wissen.

### Atompolarisation

Wenn wir ein stark vereinfachtes sphärisches Atom in ein elektrisches Feld stecken, bekommen wir sowas:



- Die Elektronenhülle hat's etwas nach links, den Atomkern etwas nach rechts gezogen, die Ladungsschwerpunkte liegen jetzt um ein  $\xi$  auseinander – damit ist ein Dipolmoment  $\mathbf{z} \cdot \mathbf{e} \cdot \xi$  *induziert* worden ( $\mathbf{z}$  = Ordnungszahl,  $\mathbf{e}$  = Elementarladung).
- Das äußere Feld  $\mathbf{E}$  zieht die Ladungen auseinander, die innere Coulombwechselwirkung zieht sie zurück – ganz so, als ob die Ladungen durch eine *Feder* gekoppelt wären. Das Kräftegleichgewicht bestimmt, wie groß  $\xi$  sein wird. Ohne groß zu rechnen, können wir für  $\xi \ll R$  (d. h. sehr viel kleiner als die Atomgröße) annehmen, dass  $\xi \propto E$  sein wird.
- Damit können wir *drei* wichtige Schlussfolgerungen ziehen:
  - Atompolarisation funktioniert *immer*. Ein Teil der Suszeptibilität bzw. Dielektrizitätskonstante *jedes* Materials kommt von diesem Polarisationsmechanismus.
  - Wir haben (was wir ja *wollten*) "bewiesen", dass für die Atompolarisation  $\mathbf{P} \propto \mathbf{E}$  gilt.
  - Wir haben außerdem den Frequenzgang schon im Prinzip bestimmt: Wenn wir ein elektrisches Wechselfeld mit der Kreisfrequenz  $\omega = 2\pi\nu$  anlegen, wackeln wir periodisch an einer kleinen Masse (die der Elektronenwolke), die über eine Feder an einem sehr schweren Gegenstand (dem Atomkern) hängt. Bei irgendeiner Frequenz sollte dann **Resonanz** auftreten – die Schwingungsamplitude wird groß!

Wie wichtig ist die Atompolarisation in der Praxis? Anders gefragt, bei welchen Materialien ist die Suszeptibilität / Dielektrizitätskonstante *überwiegend* durch diesen Mechanismus bestimmt?

Wir merken uns nur zwei Punkte dazu:

- Bei halbwegs sphärischer Verteilung der Elektronen um ein Atom ist der Mechanismus *sehr schwach*. Die Dielektrizitätskonstante der Edelgase ist z. B. nur unwesentlich größer als 1.
- Bei nicht-sphärischer Verteilung der Elektronen, wie z. B. in den kovalenten Bindungen aller relevanten **Halbleiter**, ist der Effekt *sehr stark*!

**Die Suszeptibilität / Dielektrizitätskonstante von Halbleitern wie Silizium kommt überwiegend von der Atompolarisation**

$\epsilon_r(\text{Si}) = 12$   
 $\epsilon_r(\text{Ge}) = 16$

## Ionische Polarisation

Dieser Polarisationsmechanismus wirkt primär in Ionenkristallen wie **NaCl** oder **LiF**, aber auch in allen Kristallen mit ionischer Komponente wie SiO<sub>2</sub> oder so gut wie allen anderen Oxiden (die Sauerstoffatome binden die Elektronen fast immer etwas fester als der Rest, sind also netto etwas negativ geladen).

- Wie zuvor gilt: Das Feld zieht die vorhandenen Dipole auseinander oder drückt sie zusammen – es wird ein Netto-Dipolmoment induziert. Das Feld zieht oder drückt dabei gegen die "Bindungspotentialfeder"!
- Aha – das haben wir gehabt! Die "**Federkonstante**" einer Bindung war  $\mathbf{Y} \cdot \mathbf{a}$ , mit  $\mathbf{Y}$  = **Elastizitätsmodul**, wie wir ihn hier nach englischem Vorbild ("**Youngs Modulus**") nennen wollen, um Verwechslungen mit dem Buchstaben "E" für das elektrische Feld auszuschließen;  $\mathbf{a}$  ist der Bindungsabstand oder ungefähr die Gitterkonstante.
- Wir können damit sogar *berechnen*, mit welcher Kraft  $\mathbf{F}$  an einem Ion mit Ladung  $\mathbf{q}$  gezogen und bei welcher Auslenkung  $\xi$  Kräftegleichgewicht herrschen wird. Wir haben (immer nur mit Beträgen der Kräfte)

<b>Feldkraft auf Ladung:</b>	$F_{\text{elek}} = q \cdot E$
<b>Rückziehende Bindungsfederkraft:</b>	$F_{\text{Bindg}} = Y \cdot a \cdot \xi$
<b>Kräftegleichgewicht zur Auslenkung <math>\xi</math></b>	$Y \cdot a \cdot \xi = q \cdot E$
<b>⇒ Auslenkung <math> \xi </math></b>	$ \xi  = \frac{q \cdot E}{Y \cdot a}$

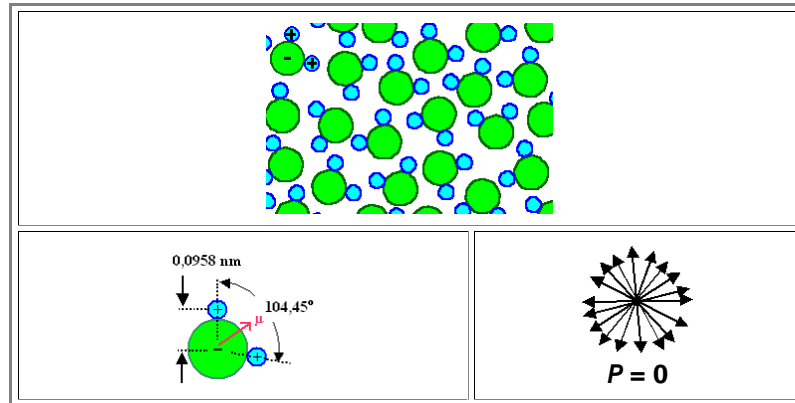
Damit können wir jetzt hergehen und im Prinzip die **DK** oder die Suszeptibilität von Ionenkristallen berechnen.

Tun wir aber nicht, sondern nehmen nur zur Kenntnis: Der Effekt kann groß sein; Ionenkristalle haben verhältnismäßig große Suszeptibilitäten, siehe die Tabelle.

Was aber auch ohne Übung jetzt klar sein sollte: Im dielektrischen Verhalten der Materie steckt schon jetzt die "Mechanik" und "Thermodynamik" – Bindungspotentiale, Elastizitätsmodul, mittlere Geschwindigkeiten – wir haben das alles nicht nur aus Jux und Tollerei gelernt!

## Orientierungspolarisation

Das Modell für diesen Polarisationsmechanismus ist Wasser –  $\text{H}_2\text{O}$ . Schauen wir uns das "Wasserbild" noch mal genauer an:



Was wir sehen, ist eine Momentaufnahme mit ganz kurzer Belichtungszeit. Die Wassermoleküle sind in ständiger Bewegung – sie laufen und rotieren; wir wissen im Prinzip sogar wie schnell! Ja? OK – Zeit für eine Übung.

### Rechenübung

#### Aufgabe 6.3-1

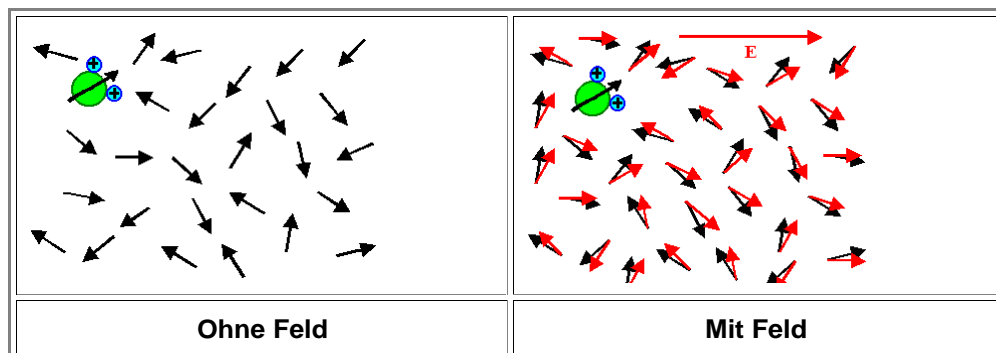
Das Dipolmoment eines Wassermoleküls ist übrigens **1,84 Debye**. (1 Debye =  $3,33564 \cdot 10^{-30} \text{ Cm}$ ; warum soll immer nur ich blöde alte Zahlenangaben umrechnen? Mach's mal selber!)

Die wassereigenen Dipole führen also einen rasenden Tanz auf: Ihr Dipolmoment macht einen "random walk" bezüglich der Richtung und des Ortes. Die Vektorsumme aller Dipolmoment wird sich sehr exakt zu Null addieren.

Schalten wir jetzt ein elektrisches Feld ein, wird der Dipol versuchen, sich in Feldrichtung auszurichten, denn dadurch gewinnt er Energie. Anders ausgedrückt. Sein pos. Kopf will sich so nahe als möglich zum negativen Feldpol orientieren, denn er wird von ihm angezogen, sein negativer Hintern aus denselben Gründen zum Positivpol. Dazu muss der Dipol rotieren.

Dazu hat er aber nicht viel Zeit. Sobald das Molekül wieder mit einem Kollegen kollidiert, haut's den Dipol wieder in eine Zufallsrichtung.

Der Nettoeffekt bei realen Flüssigkeiten und realen Feldstärken (maximal um **10 MV/cm**) ist einerseits sehr klein, d. h. die Vektorsumme ist nur leicht von Null verschieden, andererseits groß genug, um große Suszeptibilitäten zu machen – Wasser hat schließlich eine Dielektrizitätskonstante von um die **80**! Es sieht schematisch etwa so aus:



Die Berechnung der Orientierungspolarisation ist zwar nicht besonders schwierig, aber mathematisch durchaus trickreich. Was wir tun müssen, ist klar: Wir minimieren wie immer einfach die freie Energie des Systems, um den Gleichgewichtszustand zu finden.

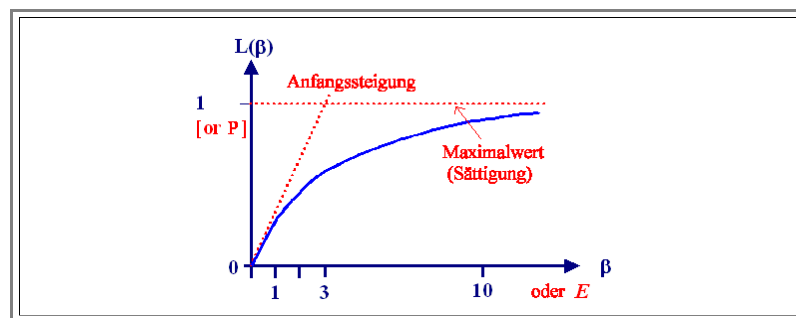
- Die Ausrichtung der Dipole im Feld "bringt" Energie, aber "kostet" Entropie, denn ein System mit ausgerichteten Dipolen ist zweifelsohne ordentlicher als eines mit statistisch verteilten Dipolen. Wer wissen will, wie's geht, betätigt den [Link](#).
- Was rauskommt, ist:

$$P = N_V \cdot \langle \mu \rangle = N_V \cdot \mu \cdot L(\beta)$$

$$L(\beta) = \coth(\beta) - \frac{1}{\beta}$$

$$\beta = \frac{\mu \cdot E}{k_B T}$$

- $L(\beta)$  heißt Langevin-Funktion, sie kommt in Problemen dieser Art häufig vor. Die Größen sind  $N_V$  = Dichte der Dipole (d. h. der Wassermoleküle),  $\langle \mu \rangle$  = Vektormittel der Dipolmomente, also  $P / N_V$ . Das Ganze sieht so aus:



- Die Kurve zeigt quantitativ  $L(\beta)$ ; durch einfaches Umskalieren der Achsen erhält man aber exakt dieselbe Kurve für die Polarisation als Funktion der Feldstärke.

Bei realistischen Feldstärken (unter ca. **10 MV/cm**) und Temperaturen liegt man ganz in Anfangsbereich der Kurve – zwischen  $\beta = 0$  und  $\beta < 1$ .

- Per Reihenentwicklung usw. bekommt man als gute Näherung für die mittlere Polarisation  $P$ :

$$P = \frac{N \cdot \mu^2 \cdot E}{3k_B T}$$

- Der Faktor  $N \cdot \mu^2 / (3k_B T)$  wäre also die [Suszeptibilität](#)  $\chi = \epsilon_r - 1$  multipliziert mit der Vakuumpermittivität  $\epsilon_0$ . Wir haben damit im Prinzip die Dielektrizitätskonstante von Wasser ausgerechnet und außerdem gezeigt, dass in guter Näherung die Polarisation proportional zur Feldstärke ist.
- Wir haben auch verstanden, warum eine bisher rein elektrische Größe wie die **DK** jetzt "plötzlich" temperaturabhängig wird!

## Zusammenfassung

Wir haben zwei unserer drei Ziele erreicht:

- Wir haben im Prinzip gezeigt, dass die Polarisation immer proportional zur Feldstärke anwächst.
- Wir haben im Prinzip auch die Proportionalitätskonstanten, also die Suszeptibilitäten (und damit die **DK**) *ausgerechnet*! (Haha. Gottseidank gibt es den schönen Ausdruck "im Prinzip"!)

Auf zur Verallgemeinerung des Begriffs "Dielektrikum"! Vorher aber noch ein paar schnelle Fragen:

Fragebogen

Schnelle Fragen zu 6.3.2