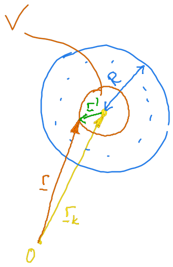
5.5. Mikroskopisches Modell der Polarisierbarkeit

Ziel: Berechnung der Materialkonstante χ_e aus einfachem mikroskop. Modell.

Methode: Berechne induzierte mittlere el. Dipoldichte $\underline{P}$ für gegebenes Feld $\underline{E}$.

UB: Orientierungspolarisation kann nur mittels thermodyn. - statistische Theorie berechnet werden.
Hier: induzierte Polarisation

klass. Atommodell: homogen geladene Kugel mit Radius R und Elektronenladung $Q_e = -Ze < 0$
punktförmiger Kern $Q_K = Z \cdot e > 0$ bei $\underline{r}_K$.



Elektrisches Feld der Elektronen am Ort $\underline{r}$: $\underline{E}_e(\underline{r})$

$$\varepsilon_0 \oint_{\partial V} d\underline{f}\, \underline{E}_e(\underline{r}) = \int_V d^3r\, \rho(\underline{r}) = \int_V d^3r \frac{Q_e}{\frac{4\pi}{3} R^3}$$

Volumenintegration: $4\pi r'^2 \varepsilon_0 |\underline{E}_e(\underline{r}')| = Q_e \frac{|r'|^3}{R^3}$ für $|\underline{r}'| \leq R$

Rotationssymmetrie

$$\underline{E}_e(\underline{r}) = \frac{Q_e}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\underline{r} - \underline{r}_e}{R^3}$$

mit $\underline{r}' = \underline{r} - \underline{r}_e$
$\underline{r}_e$ im Zentrum der Elektronenwolke

Kraft auf den Kern:

$$\underline{F}_K = Q_K\, \underline{E}_e(\underline{r}_K) = \frac{Q_e Q_K}{4\pi\varepsilon_0 R^3} (\underline{r}_K - \underline{r}_e)$$

Kraft des Kerns auf die Elektronen $\underline{F}_e = -\underline{F}_K$

- Bewegungsgleichung mit äußerem Feld $\underline{E}_a$:

$$m_K \ddot{\underline{r}}_K = \underline{F}_K + Q_K \underline{E}_a = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3} (\underline{r}_K - \underline{r}_e) + Ze\, \underline{E}_a$$

$$Z m_e \ddot{\underline{r}}_e = \underline{F}_e + Q_e \underline{E}_a = \frac{Z^2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3} (\underline{r}_K - \underline{r}_e) - Ze\, \underline{E}_a$$

$\underline{r}_R = \underline{r}_K - \underline{r}_e$

$$\Rightarrow \underbrace{\ddot{\underline{r}}_K - \ddot{\underline{r}}_e}_{\ddot{\underline{r}}_R} = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3} \underbrace{\left(\frac{1}{m_K} + \frac{1}{Z m_e}\right)}_{\approx \frac{1}{Z m_e}} \underbrace{(\underline{r}_K - \underline{r}_e)}_{\underline{r}_R} + Ze\, \underline{E}_a \left(\frac{1}{m_K} + \frac{1}{Z m_e}\right)$$

da $m_K \gg Z m_e$
$\frac{1}{m_K} \ll \frac{1}{Z m_e}$

$$\boxed{\ddot{\underline{r}}_R + \omega_0^2\, \underline{r}_R = \frac{e}{m_e} \underline{E}_a} \qquad \text{mit} \quad \omega_0^2 = \frac{Z e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e R^3}$$

Harmonischer Oszillator mit stationärem Zustand $\dot{r}_R = 0$

(noch ohne Dämpfung, kann aber eingefügt werden)

$$(*) \quad \boxed{\underline{r}_R = \frac{e}{m_e \omega_0^2} \underline{E}_a}$$

→ statisches mikroskopisches el. Dipolmoment

$$\underline{p} = \underbrace{\int_V d^3r' \, \rho_e(r') \, \underline{r}'}_{\text{Elektronen};\ \frac{-Ze}{\frac{4\pi}{3}R^3}\int_V d^3r' r' = 0} + Ze \underbrace{\int_V d^3r' \, \delta(\underline{r}' - \underline{r}_R) \, \underline{r}'}_{\text{Kern};\ \underline{r}_R}$$

$$\underline{p} = Ze\,\underline{r}_R \overset{(*)}{=} \frac{Ze^2}{m_e \omega_0^2} \underline{E}_a = \varepsilon_0 \alpha \underline{E}_a$$

Polarisierbarkeit des Atoms $\alpha := \frac{Ze^2}{\varepsilon_0 m_e \omega_0^2} = 4\pi R^3 = 3 V_{atom}$

makroskop. gemittelte Polarisation

$$\boxed{\underline{P} = n\underline{p} = \varepsilon_0 n \alpha \underline{E}_a}$$

(n ... Atomdichte)

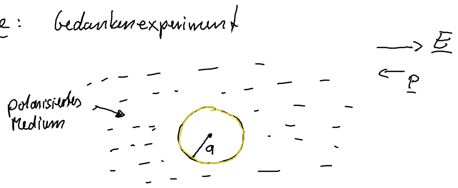
Problem: $\underline{E}_a$ nicht bekannt, da Felder der anderen Dipole mitberücksichtigt werden müssen
→ nicht selbstkonsistent

$$\underline{E}_a \longrightarrow \text{Polarisation} \xrightarrow{\alpha} \underline{E}_a$$

- für verdünnte Gase (keine WW der Felder der einzelnen pol. Atomen)
  $\underline{E}_a = \underline{E} \longrightarrow \varepsilon_r - 1 = n\alpha$

- für Dielektrikum gibt es WW mit umliegenden Atomen

Idee: Gedankenexperiment



dielektrische Kugel herausgeschnitten

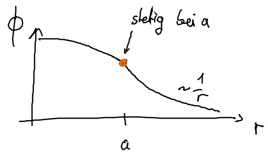
$$\underline{E} = \underline{E}_a + \underline{E}_{Kugel}$$

↑ wird jetzt berechnet

Wir brauchen: a) Feld einer homogen geladenen Kugel
b) Feld einer " polarisierten Kugel

a) $\underline{E}_0(r) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0}\begin{cases} \underline{r}/a^3 & r \leq a \\ \underline{r}/r^3 & r \geq a \end{cases}$

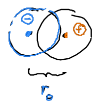
$\phi_0(\underline{r}) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0}\begin{cases} b - \frac{r^2}{2a^3} & r \leq a \\ \frac{1}{r} & r \geq a \end{cases}$



Bestimmung der Integrationskonstante b durch Stetigkeitsbedingung $b = \frac{3}{2a}$

b) Homogen polarisierte Kugel

Überlagerung von 2 entgegengesetzt geladenen Kugeln mit Abstand r_0 wobei $r_0 \to 0$



$\phi(\underline{r}) = \phi_0(\underline{r} - \tfrac{1}{2}\underline{r}_0) - \phi_0(\underline{r} + \tfrac{1}{2}\underline{r}_0)$

$\overset{\text{Taylor}}{\approx} -\underline{r}_0 \underbrace{\nabla\phi_0(\underline{r})}_{-\underline{E}_0} = \underline{r}_0\,\underline{E}_0 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\begin{cases} \frac{Q\,\underline{r}_0\,\underline{r}}{a^3} & r \leq a \\ \frac{Q\,\underline{r}_0\,\underline{r}}{r^3} & r \geq a \end{cases}$

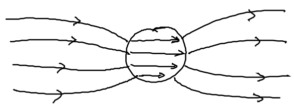
$\underline{p} := Q\,\underline{r}_0$

Dipolmoment der herausgeschnittenen Kugel

mit Polarisation:

$\underline{P} = \frac{\underline{p}}{\frac{4\pi}{3}a^3}$

$\phi(\underline{r}) = \begin{cases} \frac{1}{3\varepsilon_0}\underline{P}\,\underline{r} & r \leq a \\ \frac{1}{3\varepsilon_0}\frac{a^3}{r^3}\underline{P}\,\underline{r} & r \geq 0 \end{cases}$



Feld einer hom. polarisierten Kugel (erzeugt von allen umliegenden Dipolen)

$\underline{E}_{Kugel} = -\nabla\phi(\underline{r}) = -\frac{1}{3\varepsilon_0}\underline{P} \qquad r \leq a \qquad$ (Innerhalb)

$\underline{E} = \underline{E}_a + \underline{E}_{Kugel}$

$\underline{E}_a = \underline{E} + \frac{1}{3\varepsilon_0}\underline{P}$

Lokalfeld — makroskop. Feld — Feld der nächst. Dipole

=>

$\underline{P} = \varepsilon_0 n\alpha\,\underline{E}_a$ (vorhin bestimmt)

$\underline{P} = \varepsilon_0 n\alpha\left(\underline{E} + \frac{1}{3\varepsilon_0}\underline{P}\right)$

$\boxed{\underline{P} = \varepsilon_0\chi_e\,\underline{E}}$ mit $\chi_e = \frac{n\alpha}{1 - \frac{1}{3}n\alpha}$

Zusammenhang zwischen Polarisation und makroskop. Feld $\underline{E}$.

oder: $n\alpha = \frac{\chi_e}{1+\frac{1}{3}\chi_e} = \frac{\varepsilon_r - 1}{1 + \frac{\varepsilon_r - 1}{3}} = \boxed{3\frac{\varepsilon_r - 1}{\varepsilon_r + 2} = n\alpha}$

Formel von Clausius-Mosotti
oder "Lorentz - Lorenz" Gleichung

Einschub: • Hendrik Anton Lorentz (1853 - 1928)
Niederländer

- Lorentz - Trafo
- 1902 Nobelpreis für Zeeman Effekt (zusammen mit Zeeman)
- Lorentz - Kraft

• Ludwig Lorenz (1829 - 1891) Däne

- Lorenz Eichung
- Lichtstreuung (Lorenz - Mie) EM Wellen

• Edward Lorenz (1917 - 2008) Amerikaner

- Schmetterlingseffekt (Lorenz attraktor), chaos Theorie
