

5.5. Mikroskopisches Modell der Polarisierbarkeit

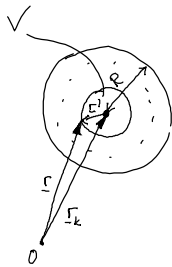
Ziel: Berechnung der Materialkonstante χ_e aus einfachem mikroskop. Modell.

Methode: Berechne induzierte mittlere el. Dipolstärke \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 $Q_k = Ze > 0$ bei \underline{r}_k .



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

$$\epsilon_0 \oint_{\partial V} d\underline{f} \cdot \underline{E}_e(\underline{r}) = \int_V d^3r \rho(\underline{r}) = \int_V d^3r \frac{Q_e}{\frac{4\pi}{3} R^3}$$

Volumenintegration: $4\pi r'^2 \epsilon_0 |\underline{E}_e(\underline{r}')| = Q_e \frac{|r'|^3}{R^3}$ für $|r'| \leq R$

Rotations-symmetrie

$$\underline{E}_e(\underline{r}) = \frac{Q_e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\underline{r} - \underline{r}_e}{R^3}$$

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

Kraft auf den Kern:

$$\underline{F}_k = Q_k \underline{E}_e(\underline{r}_k) = \frac{Q_e Q_k}{4\pi\epsilon_0 R^3} (\underline{r}_k - \underline{r}_e)$$

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

• Bewegungsgleichung mit äußeren Feld \underline{E}_a :

$$m_k \ddot{\underline{r}}_k = \underline{F}_k + Q_k \underline{E}_a = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} (\underline{r}_k - \underline{r}_e) + Ze \underline{E}_a$$

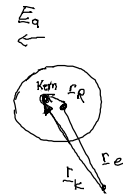
$$Z m_e \ddot{\underline{r}}_e = \underline{F}_e + Q_e \underline{E}_a = \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} (\underline{r}_k - \underline{r}_e) - Ze \underline{E}_a$$

$$\Rightarrow \underbrace{\ddot{\underline{r}}_k - \ddot{\underline{r}}_e}_{\ddot{\underline{r}}_R} = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \underbrace{\left(\frac{1}{m_k} + \frac{1}{Z m_e}\right)}_{\approx \frac{1}{Z m_e}} (\underline{r}_k - \underline{r}_e) + Ze \underline{E}_a \left(\frac{1}{m_k} + \frac{1}{Z m_e}\right)$$

$$\boxed{\ddot{\underline{r}}_R + \omega_0^2 \underline{r}_R = \frac{e}{m_e} \underline{E}_a}$$

mit $\omega_0^2 = \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e R^3}$

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



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

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

(noch ohne Dämpfung, kann aber eingefügt werden)

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

→ statisches mikroskopisches el. Dipolmoment

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

$$\textcircled{*} \quad \underline{p} = Ze \underline{r}_R = \frac{Ze^2}{m_e \omega_0^2} \underline{E}_a = \epsilon_0 \alpha \underline{E}_a$$

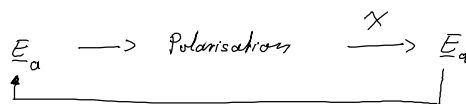
Polarisierbarkeit des Atoms $\alpha' = \frac{Ze^2}{\epsilon_0 m_e \omega_0^2} = 4\pi R^3 = 3 V_{\text{Atom}}$

makroskop. gemittelte Polarisation

$$\underline{P} = n \underline{p} = \epsilon_0 n \alpha \underline{E}_a$$

(n ... Atomdichte)

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

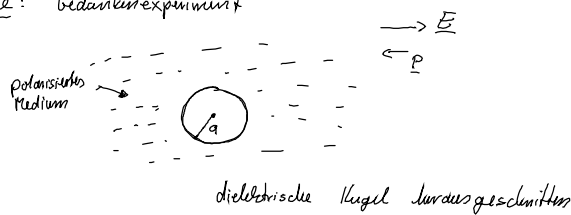


• für verdünnte Gase (keine WW der Felder der einzelnen pol. Atome)

$$\underline{E}_a = \underline{E} \rightarrow \epsilon_r - 1 = n \alpha$$

• für Dielektrikum gibt es WW mit unregelmäßig angeordneten Atomen

Idee: Gedankenexperiment



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

↑
wird jetzt berechnet

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

$$a) \underline{E}_0(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \begin{cases} r/a^3 & r \leq a \\ r/r^3 & r \geq a \end{cases}$$

$$\phi_0(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \begin{cases} b - \frac{r^2}{2a^3} & r \leq a \\ \frac{1}{r} & r \geq a \end{cases}$$



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 $r_0 \rightarrow 0$



$$\phi(r) = \phi_0(r - \frac{1}{2}r_0) - \phi_0(r + \frac{1}{2}r_0)$$

$$\stackrel{\text{Taylor}}{\approx} -r_0 \underbrace{\nabla \phi_0(r)}_{-\underline{E}_0} = r_0 \underline{E}_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \begin{cases} \frac{Q r_0 r}{a^3} & r \leq a \\ \frac{Q r_0 r}{r^3} & r \geq a \end{cases}$$

$$\underline{P} := Q r_0$$

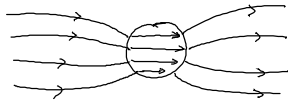
Dipolmoment der herausgeschnittenen Kugel

mit Polarisation:

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

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{3\epsilon_0} \underline{P} r & r \leq a \\ \frac{1}{3\epsilon_0} \frac{a^3}{r^3} \underline{P} r & r \geq a \end{cases}$$

\underline{E}



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

$$\underline{E}_{\text{Kugel}} = -\nabla \phi(r) = \frac{1}{3\epsilon_0} \underline{P} \quad r \leq a \quad (\text{innerhalb})$$

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

$$\underline{E}_a = \underline{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \underline{P}$$

\uparrow Labelfeld $\quad \uparrow$ makroskop. Feld $\quad \uparrow$ Feld der restl. Dipole
 \Rightarrow

$$\underline{P} = \epsilon_0 n \alpha \underline{E}_a \quad (\text{vorhin bestimmt})$$

$$\underline{P} = \epsilon_0 n \alpha \left(\underline{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \underline{P} \right)$$

$$\underline{P} = \epsilon_0 \chi_e \underline{E} \quad \text{mit} \quad \chi_e = \frac{n\alpha}{1 - \frac{1}{3}n\alpha}$$

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

$$n_d = \frac{N_e}{1 + \frac{1}{3}N_e} = \frac{\epsilon_r - 1}{1 + \frac{\epsilon_r - 1}{3}} = \boxed{\frac{2}{3} \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2}} = n_d$$

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

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

- Lorentz-Drift
- 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