

## Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

Die elektrischen Eigenschaften von **Dielektrika** und **Paraelektrika** sind keine speziellen Eigenschaften fester oder kristalliner Substanzen. So sind diese Eigenschaften z.B. auch in Molekülen und Flüssigkeiten zu finden.

### **Dielektrischen Eigenschaften**

Moleküle sind im allgemeinen elektrisch neutral. Sie können aber ein elektrisches Dipolmoment (und auch höhere Momente) besitzen und ihre elektrische Polarisierbarkeit ist im allgemeinen anisotrop.

Für die **elektrische Verschiebung** in einem Medium mit  $\epsilon$  gilt:

$$\mathbf{D}_m = \mathbf{e} \cdot \mathbf{E}$$

Für die elektrische Polarisation gilt:

$$\mathbf{P} = \mathbf{D}_m - \mathbf{D} \quad \text{mit} \quad \mathbf{D}_m = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$$

$$\text{oder} \quad \mathbf{P} = (\mathbf{e} - 1)\epsilon_0 \mathbf{E} = \mathbf{c}\epsilon_0 \mathbf{E}$$

$\mathbf{P}$  mißt den Beitrag der Materie (Moleküle) zur elektrischen Verschiebung

$$\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$$

**el. Feldkonstante**

$$\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$$

**Dielektrizitätszahl**

$$\epsilon_r = C/C_0$$

**Dielektrische Suszeptibilität**

$$\chi = \epsilon - 1$$

## Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

### **Unpolare Moleküle => Dielektrika**

Zentrosymmetrische Moleküle (H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>) sind unpolar und haben kein permanentes Dipolmoment. Bei angelegtem Feld ( $\mathbf{E} \neq 0$ ) kann jedoch ein **induziertes Dipolmoment** entstehen. Für dieses durch Polarisierung im Feld induziertes Dipolmoment gilt

$$\mathbf{p}_{ind} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{E}_{loc} \quad \text{bzw. im Volumen} \quad \mathbf{P} = N\mathbf{p}_{ind} = N\mathbf{a} \cdot \mathbf{E}_{loc}$$

Die **Polarisierbarkeit**  $\alpha$  ist ein Maß für die Verschiebbarkeit von positiver relativ zu negativer Ladung im Molekül und damit eine wichtige Moleküleigenschaft (Verschiebungspolarisation) => siehe Ramanspektroskopie.

### **Anteile zur Verschiebungspolarisation**

- **Elektronenpolarisation:** Das induzierte Dipolmoment entsteht durch Verschiebung der Elektronenwolke relativ zum positiven schweren Kern
- **Ionenpolarisation:** Verschiebung von positiven relativ zu negativen Ionen im Molekül

Die gemessene Polarisierbarkeit ist die Summe aus beiden Anteilen. Anstelle der Polarisierbarkeit  $\alpha$  [As m<sup>2</sup>/V] gibt man häufig das **Polarisierbarkeitsvolumen** an:

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{a}}{4\pi\epsilon_0}$$

## Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

Die Polarisierbarkeit in Molekülen ist im allgemeinen nicht räumlich isotrop. Daher wird diese Größe (bzw.  $\hat{\alpha}$ ) in Komponenten oder als Tensor dargestellt.

### Clausius-Mosotti-Gleichung

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0} \sum_j N_j \mathbf{a}_j$$

### Beispiele für einfache Moleküle

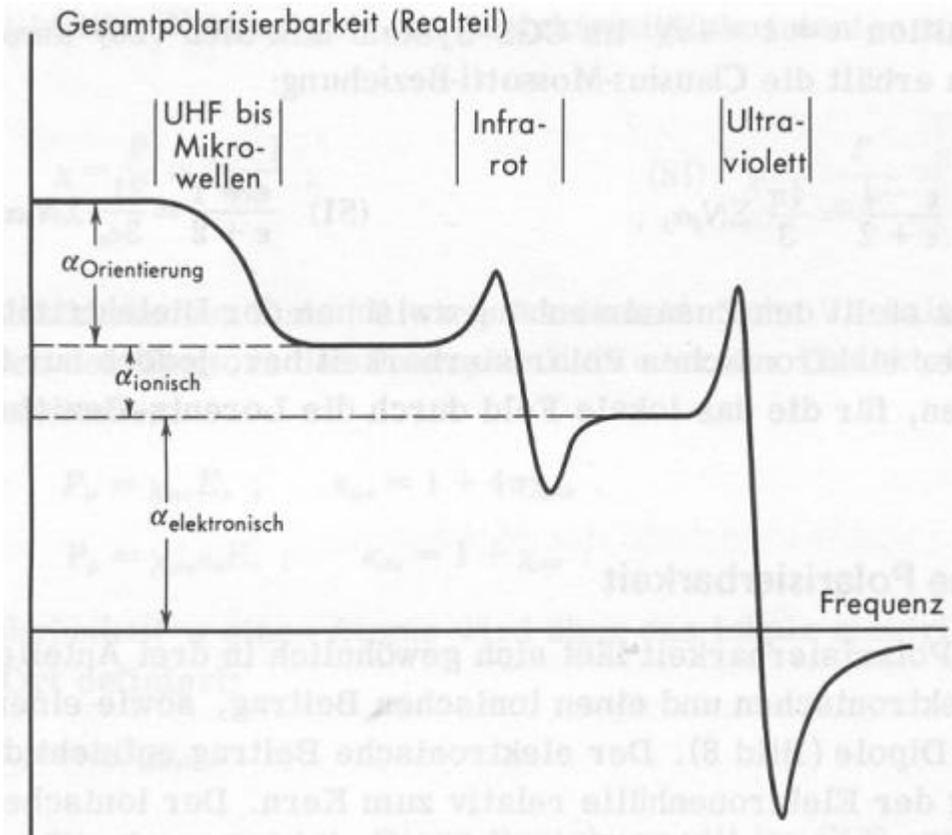
Polarisierbarkeitsvolumina $\alpha'$ , in $10^{-30} \text{ m}^3$			
	$\bar{\alpha}'$	$\alpha'_{\perp}$	$\alpha'_{  }$
H <sub>2</sub>	0,79	0,61	0,85
O <sub>2</sub>	1,60		
Cl <sub>2</sub>		3,2	6,6
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	10,3	6,7	12,8
H <sub>2</sub> O	1,44		
CCl <sub>4</sub>	10,5		

### Polare Moleküle => Paraelektrika

Im Unterschied zu unpolaren Molekülen besitzen polare Moleküle ein **permanentes Dipolmoment**  $p_p$ . In diesem Fall tritt neben der Verschiebungspolarisation die sogenannte **Orientierungspolarisation** auf. Die Orientierungspolarisation beruht auf der Ausrichtung permanenter Dipole in einem von außen angelegten Feld. Diese Orientierung ist stark temperatur- und frequenzabhängig.

# Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

**Frequenzabhängigkeit** der verschiedenen Beiträge zur Polarisierbarkeit (schematisch)



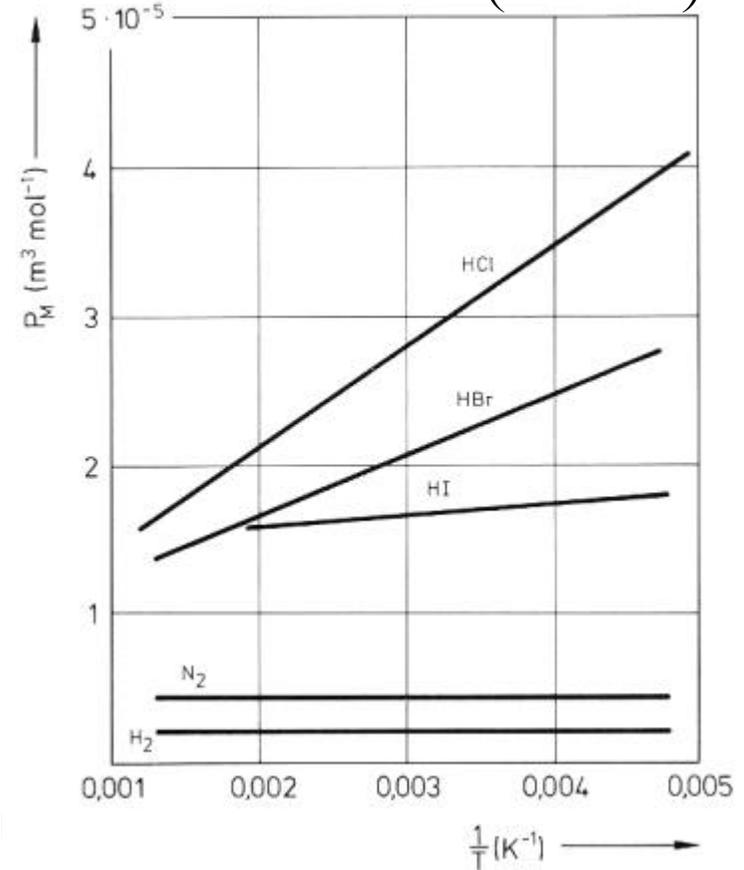
## Dielektrika

- $1 < \epsilon < 10$ ,
- keine /geringe Temperaturabhängigkeit

## Paraelektrika

- $10 < \epsilon < 100$ ,
- Temperaturabhängigkeit

$$\epsilon - 1 = N \left( a + \frac{p_p^2}{3k_B T} \right)$$



Kristallographie I

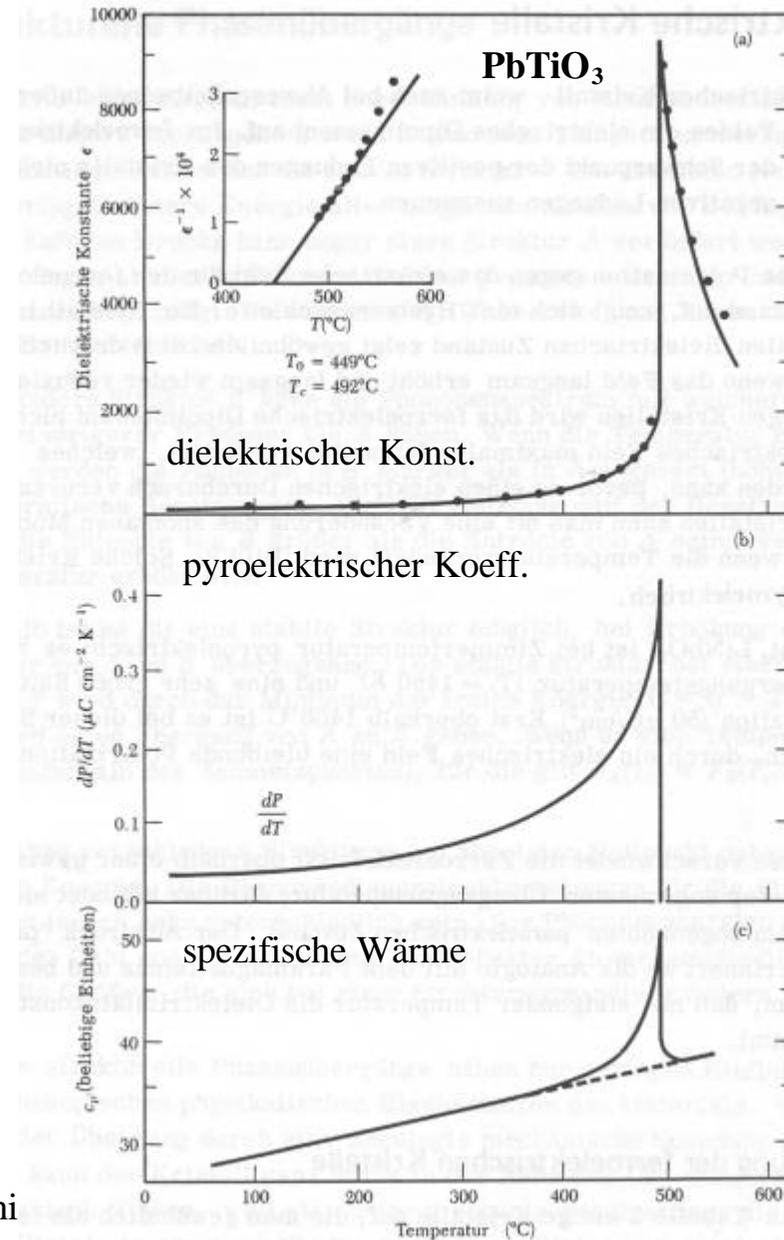
# Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

## Ferroelektrika

Ein ferroelektrischer Kristall weist auch in Abwesenheit eines äußeren Feldes ein elektrisches Dipolmoment auf. Durch Umlagerungen geladener Atome können Nachbaratome polarisiert werden, und sich zu polarisierten **Domänenstrukturen** ausbilden.

### Eigenschaften

- Auf Festkörper beschränkt
- Übergangstemperatur (Curie Temperatur  $T_c$ ) zwischen Para –und Ferroelektrizität.
- Hysterese in der Polarisierung beim Umpolen des  $E$ -Feldes (Domänenstruktur „hängt“ teilweise im alten Zustand)
- Dielektrizitätskonstante:  $10^3 < \epsilon < 10^5$

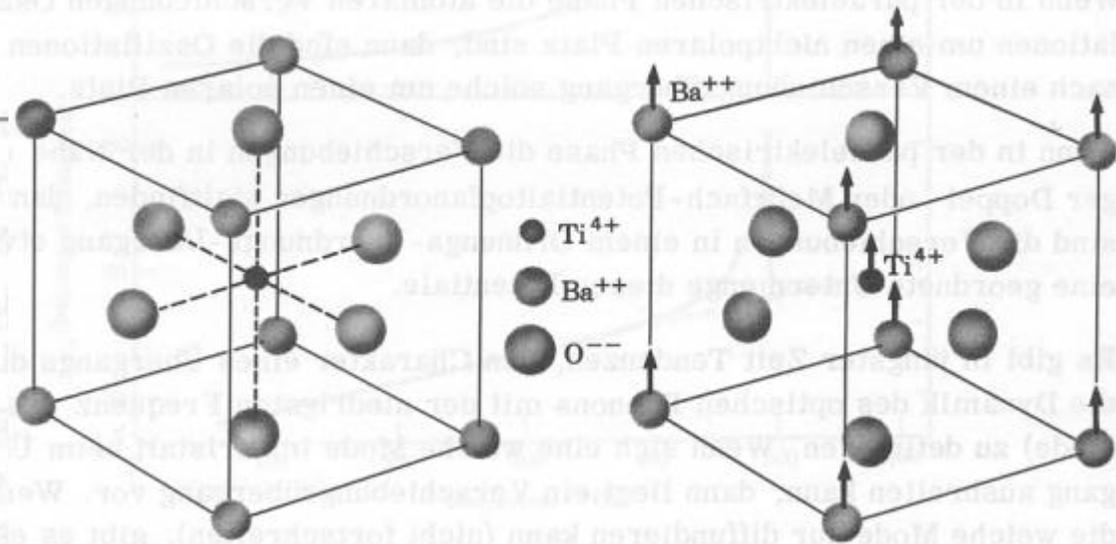


# Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

## Bariumtitanat in Perowskit-Struktur

### Beispiele für Ferroelektrika

		$T_c$ , in K
<i>KDP-Typ</i>	$\text{KH}_2\text{PO}_4$	123
	$\text{KD}_2\text{PO}_4$	213
	$\text{RbH}_2\text{PO}_4$	147
	$\text{RbH}_2\text{AsO}_4$	111
	$\text{KH}_2\text{AsO}_4$	96
	$\text{GeTe}$	670
<i>TGS-Typ</i>	Triglycin-Sulfat	322
	Triglycin-Selenat	295
<i>Perovskite</i>	$\text{BaTiO}_3$	393
	$\text{SrTiO}_3$	~0
	$\text{KNbO}_3$	712
	$\text{PbTiO}_3$	763
	$\text{LiTaO}_3$	890
	$\text{LiNbO}_3$	1470



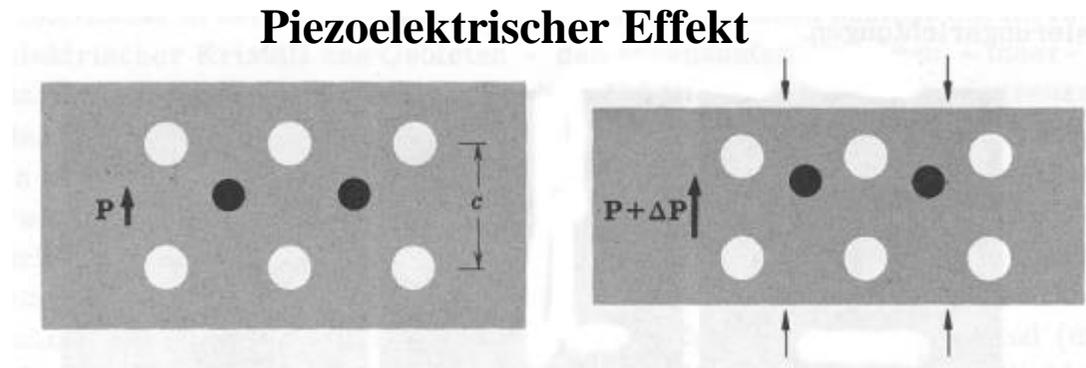
Bariumtitanat oberhalb  
des Curie-Punktes

Bariumtitanat unterhalb  
des Curie-Punktes:  
Die Struktur ist leicht  
deformiert. Die Anionen  
sind leicht bezüglich der  
Kationen verschoben  
=> induziertes Dipolmoment

## Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

### **Piezoelektrika**

Alle Kristalle in einem ferroelektrischen Zustand sind auch piezoelektrisch. Wird eine mechanischer Druck auf den Kristall ausgeübt, so ändert dieser als Reaktion hierauf mit einer veränderten elektrischen Polarisation.



Von technischer Bedeutung ist der sogenannte **umgekehrte Piezoelektrische Effekt**. Dabei wird durch das Anlegen einer elektrischen Spannung am Kristall eine Längenänderung  $\Delta l$  in der Kristallstruktur hervorgerufen. Dieser Effekt ist auch mit Wechselspannungen beobachtbar.

### **Beispiele**

Quarz:  $Dl \approx 10^{-7} \text{ cm /V}$

BaTiO<sub>3</sub>:  $Dl \approx 10^{-5} \text{ cm /V}$

### **Anwendung**

- präzise Positionierungen (z.B. Stelltische für AFM)
- Kristalllautsprecher
- Uhrenquarz

Analog zu Piezoelektrika:

### **Pyroelektrika**

=> Längenänderung durch Wärme

## Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

### **Dia- Para- und Ferromagnetika**

Wie bei den elektrischen Eigenschaften der Materie, z.B. die elektrischen Polarisation, kann im Falle des Magnetismus eine magnetische Polarisation **J** definiert werden:

$$\mathbf{J} = \mathbf{B}_m - \mathbf{B} = (m-1)m_0\mathbf{H}$$

Hier sind **B** die magnetische Flußdichte und **H** die magnetische Feldstärke.

**magn. Feldkonstante**

$$\mu_0 = 1.257 \cdot 10^{-6} \text{ Vs/Am}$$

**Permeabilität:  $\mu$**

**magnetische Suszeptibilität:  $\chi_m = \mu - 1$**

Magnetische Dipole in der Materie werden von den Spins der Elektronen hervorgerufen. Es gibt dabei induzierte Momente (Diamagneten) und permanente Momente (Para- und Ferromagneten). Aufgrund der magnetischen Suszeptibilität kann die folgende Einteilung vorgenommen werden:

### **Diamagnetismus**

$\chi_m < 0$ : negative Werte der magnetischen Suszeptibilität wiesen daraufhin, daß **H** und **B** einander entgegengerichtet sind. Alle Substanzen sind zumindest auch diamagnetisch. Allerdings können andere stärkere Formen des Magnetismus den Diamagnetismus überdecken.

# Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

## Diamagnetismus

$\chi_m > 0$ : positive Werte der magnetischen Suszeptibilität wiesen daraufhin, daß **H** und **B** in die gleiche Richtung zeigen. Im Material liegen permanente Dipole vor (ungepaarte Elektronen äußerer Schalen), die sich im äußeren Feld ausrichten.

Beispiele Dia- und Paramagnetischer Substanzen mit Suszeptibilitäten bei Raumtemperatur	<i>Diamagnetische Stoffe</i>		<i>Paramagnetische Stoffe</i>	
	H <sub>2</sub>	$-0,002 \cdot 10^{-6}$	O <sub>2</sub>	$1,86 \cdot 10^{-6}$
H <sub>2</sub> O	$-9,0 \cdot 10^{-6}$	O <sub>2</sub> flüssig	$3620 \cdot 10^{-6}$	
NaCl	$-13,9 \cdot 10^{-6}$	Dy <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> · 8 H <sub>2</sub> O	$632000 \cdot 10^{-6}$	
Cu	$-7,4 \cdot 10^{-6}$	Al	$21,2 \cdot 10^{-6}$	
Bi	$-153 \cdot 10^{-6}$	CuSO <sub>4</sub> · 5 H <sub>2</sub> O	$176 \cdot 10^{-6}$	

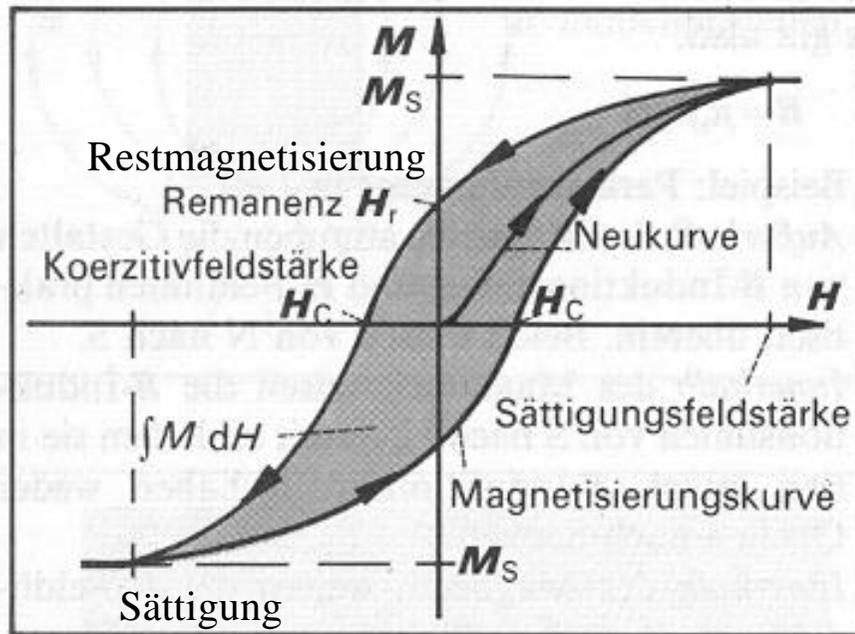
## Ferromagnetismus

$\chi_m > 0$ : positive Werte der magnetischen Suszeptibilität (wie Paramagnetismus). Ferromagnetismus entsteht durch Ausrichtung ganzer Gruppen (Weiss'sche Bezirke) permanenter Dipole => sehr große Werte der Suszeptibilität. Ferromagnetismus tritt nur bei kristallinen Substanzen auf.

# Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

## Ferromagnetismus

typisches Hysterverhalten bei Ferromagnetika



Hysteresisschleife (Stahl)

## Weitere Eigenschaften

➤ Ferromagnetika sind Substanzen mit  $\chi_m \gg 1$  (bis über 1000)

➤ ferromagnetische Substanzen

- Eisen ( $T_c = 1043$  K); V2A ( $T_c < 300$  K)
- Nickel ( $T_c = 631$  K)
- Gadolinium ( $T_c = 289$  K)
- Cobalt ( $T_c = 1404$  K)

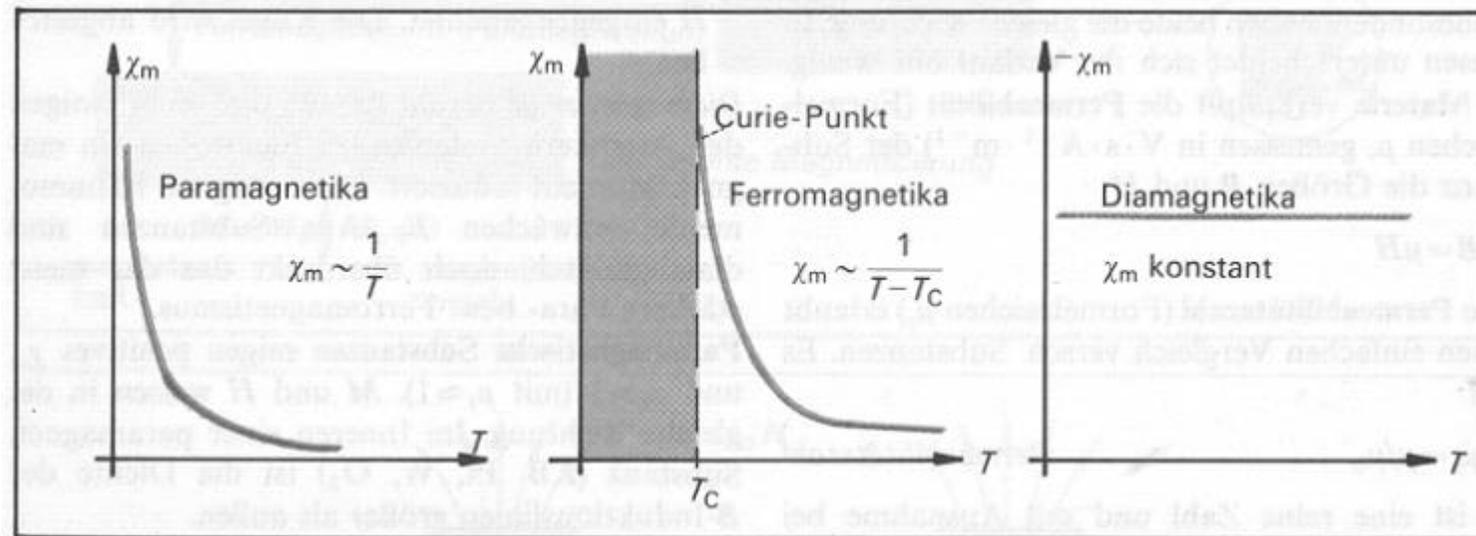
➤  $\int M dH =$  aufgewandte Energie: hängt von der Substanz ab

## ➤ Anwendungen

- magnetisch weich, enge Hystereseschleife mit kleinen Energieverlusten (Motoren, Transformatoren)
- magnetisch hart, breite Hystereseschleifen, große Koerzitivfeldstärken (Magnetkernspeicher in Computern)

# Elektrische und magnetische Materialeigenschaften

## Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung

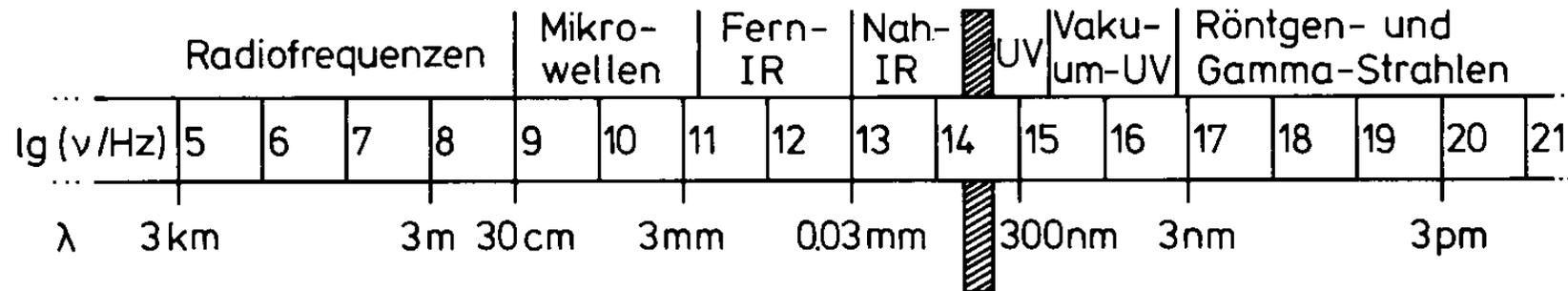


## Weitere wichtige Festkörpereigenschaften

- Dynamik der Kristallgitter
  - Elektronen im Festkörper
  - Halbleiter
- } siehe spezielle Vorlesungen

# Wechselwirkung zwischen Strahlung und Materie

## Wellenlängenbereiche elektromagnetischer Strahlung



### Motivation: Strukturaufklärung

Je kleiner die Strukturen sind, desto kleiner muß auch die Wellenlänge gewählt werden  
(=> Auflösung)

Man kann zwischen den folgenden Verfahrenstypen unterscheiden:

- **bildgebende Verfahren**, Mikroskopische Methoden (TEM, VIS-Licht, REM, AFM)
- **indirekte Verfahren**, Streumethoden (Röntgen-, Neutronen-, und Elektronenbeugung, Lichtstreuung) => indirekt: Fourier-Optik durch „Mathematik anstatt durch Linsen“

## Wechselwirkung zwischen Strahlung und Materie

### Typische Arbeitsbereiche

- Röntgenstrahlung ( $\lambda = 0.1 - 0.2 \text{ nm}$ ): Auflösung  $0.5 - 50 \text{ nm}$
- Elektronenstrahlung ( $\lambda = 0.01 - 0.1 \text{ nm}$ ): Auflösung je nach Präparat  $0.1 - 1 \text{ nm}$
- Neutronenstrahlung ( $\lambda = 0.6 \text{ nm}$ ): Auflösung  $2.0 - 200 \text{ nm}$
- VIS-Licht ( $\lambda = 400 - 700 \text{ nm}$ ): Auflösung ab  $100 \text{ nm}$
- Radar ( $\lambda = 1 \text{ cm}$ ): Auflösung ab Meter

### Strahlungsarten für Strukturaufklärung in der Kristallographie

- **Röntgenstrahlung:** *Photon* mit Ruhemasse:  $0$  ; Photonenwelle; Information über die Elektronendichteverteilung in der untersuchten Materie
- **Neutronenstrahlung:** *n* mit Ruhemasse:  $1.6726231 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ; Materiewelle; Informationen über die Position der Kerne in der untersuchten Materie
- **Elektronenstrahlung:** *e* mit Ruhemasse:  $9.1093897 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  ; Materiewelle; Information über die Elektronendichteverteilung in der untersuchten Materie

## Wechselwirkung zwischen Strahlung und Materie

### Photonen – und Materiewellen

**Photonen** bewegen sich immer mit Lichtgeschwindigkeit  $c$  (im Vakuum  $c = 2.99792 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ ). Obwohl Photonen die Ruhemasse  $0$  zugeordnet wird kann man für sie einen Impuls und eine Energie angeben.

$$\begin{array}{ll} \text{Impuls} & p = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{De-Broglie-Beziehung}) \\ \text{Energie} & E = h\mathbf{n} \quad \text{hier mit} \quad \mathbf{n} = \frac{c}{\lambda} \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{Planck-Konstante} \\ h = 6.6260755 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \end{array}$$

Für **Materiewellen** kann über die endliche Ruhemasse der mechanische Impuls einer Wellenlänge zugeordnet werden (Welle-Teilchen Dualismus):

$$\begin{array}{ll} \text{Impuls} & p = mv = \frac{h}{\lambda} \\ \text{Energie} & E = \frac{p^2}{2m} = h\mathbf{n} \end{array}$$

### Zahlenbeispiele

- Photon:  $\lambda = 0.1 \text{ nm}$ ,  $v = c$ ,  $E = 1.2415 \cdot 10^5 \text{ eV}$
- Neutron:  $\lambda = 0.12 \text{ nm}$ ,  $v = 2200 \text{ m/s}$ ,  $E = 0.025 \text{ eV}$
- Elektron:  $\lambda = 0.004 \text{ nm}$ ,  $v = 1.9 \cdot 10^8$ ,  $E = 100 \text{ keV}$