

## 12. Eristeet

Eristeiden tyypillisiä piirteitä ovat kovalenttiset sidokset (tai vahvat ionisidokset) ja siitä seuraavat mekaaniset ja sähköiset ominaisuudet.

Makroskooppisen ulkoisen sähkökentän  $\mathbf{E}$  läsnäollessa eriste *polarisoituu*, jolloin sähkövuontiheys

$$\mathbf{D} = \epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (12.1a)$$

voidaan jakaa komponentteihin

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}. \quad (12.1b)$$

Siten

ja

$$\mathbf{P} = (\epsilon_r - 1) \epsilon_0 \mathbf{E} = \kappa \epsilon_0 \mathbf{E}, \quad (12.2)$$

kun

$$\kappa = \epsilon_r - 1 \quad (12.3)$$

on sähköinen susceptiivisuus (engl. electric susceptibility).

### 12.1. Vapaa atomi

Tarkastellaan sähkökentän aiheuttamaa polarisaatiota ensin vapaassa atomissa. Tällöin atomin elektroniverho deformoituu sähkökentän suunnassa, jolloin sekä ydin että elektroniverhon painopisteet siirtyvät siten, että ne muodostavat ulkoisen kentän suuntaisen sähköisen dipolin.

Muodostuva sähköinen dipolimomentti on

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \alpha \epsilon_0 \mathbf{E}_{\text{loc}} \\ &= \alpha \epsilon_0 \mathbf{E}_0, \end{aligned} \quad (12.4)$$

missä  $\alpha$  on kentästä riippumaton polarisoituvuus ja  $\mathbf{E}_{\text{loc}}$  on ns. lokaali eli paikallinen kenttä. Atomin tapauksessa  $\mathbf{E}_{\text{loc}} = \mathbf{E}_0$ .

Yksinkertaisimmassa approksimaatiossa oletetaan, että atomin elektroniverho säilyy pallomaisena vain siirtyen ytimen suhteen vektorin  $\mathbf{d}$  verran. Tällöin tasapainotilanteessa ulkoisen sähkökentän varauksia erottava voima on yhtäsuuri kuin varausten välinen sähköstaattinen Coulombin voima. Oletetaan elektroniverho vielä a-säteiseksi homogeeniseksi varausjakautumaksi, jolloin sen tiheys on  $\rho = Ze / 4/3\pi a^3$ , ja tasapainoehto voidaan kirjoittaa muotoon

Vapaassa atomissa polarisoituvuuden määrää siis atomin koko (tilavuus).

Polarisaation synnyttämä atomaarinen tai molekulaarinen dipoli on hyvin pieni verrattuna molekyylien permanentteihin dipolimomentteihin. Myös ulkoiset ja aineessa olevat makroskooppiset kentät ovat pieniä verrattuna permanenttien dipolien sisäisiin kenttiin. Sen vuoksi on syytä tarkastella erikseen keskimääräistä makroskooppista sähkökenttää ja atomitason lokaalia kenttää.

## 12.2. Lokaali Lorentz-kenttä

Kun homogeeninen eristekide on ulkoisessa sähkökentässä  $\mathbf{E}_0$ , niin eristeen sisällä kenttä on ulkoista kenttää pienempi polarisaation kiteen pinnalla synnyttämien varausten depolarisaatiokentän

$$- N'\mathbf{P}/\epsilon_0$$

vuoksi. Tässä  $N'$  on kiteen muodosta riippuva geometrinen tekijä.

Siten makroskooppinen kenttä kiteen sisällä on

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 - N'\mathbf{P}/\epsilon_0, \quad (12.9)$$

missä yhtälön (12.2) mukaan

$$\mathbf{P} = \kappa \epsilon_0 \mathbf{E}. \quad (12.10)$$

Jaetaan atomitason lokaali kenttä lähi- ja keskimääräiseen (kauko-)kenttään

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E}_{far} + \mathbf{E}_{near}, \quad (12.11)$$

missä  $\mathbf{E}_{far}$ -kentässä esiintyy vain kiteen muodon tai aineen monimutkaisen (kide)rakenteen aiheuttamia poikkeamia homogeenisesta makroskooppisesta kentästä. Oletetaan sen vuoksi, että  $\mathbf{E}_{far} = \mathbf{E}$ .

Lähikenttää voidaan arvioida tekemällä polarisoituneeseen eristeeseen pallomainen kolo. Tällöin depolarisaatiokentän tapaan kolossa on kenttä

$$+ N'\mathbf{P}/\epsilon_0 = \mathbf{P}/3\epsilon_0.$$

Siten kolossa oleva kenttä on

$$\mathbf{E}_{kolo} = \mathbf{E}_{far} + \mathbf{P}/3\epsilon_0 = \mathbf{E} + \mathbf{P}/3\epsilon_0 \quad (12.12)$$

tai atomiin vaikuttava lokaali kenttä vastaavasti

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E} + \mathbf{P}/3\epsilon_0. \quad (12.13)$$

Tätä sanotaan *lokaaliksi Lorentzin kentäksi*.

## 12.3. Clausius–Mossotti-yhtälö

Kun lokaalissa kentässä  $\mathbf{E}_{loc}$  polarisoituneiden atomien kokonaislukumäärä on  $N$ , on polaroituma

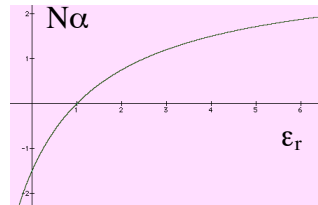
$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= N\mathbf{p} = N \alpha \epsilon_0 \mathbf{E}_{loc} \\ &= N \alpha \epsilon_0 (\mathbf{E} + \mathbf{P}/3\epsilon_0). \end{aligned}$$

Siten

Yhtälön (12.2) mukaan  $\mathbf{P} = \kappa \epsilon_0 \mathbf{E}$ , joten

Siten

$$N \alpha = 3 (\epsilon_r - 1) / (\epsilon_r + 2). \quad (12.15)$$



Jos aine koostuu erilaisista atomeista  $\alpha_i$ , jota kutakin on  $N_i$  kappaletta, niin

$$\sum_i N_i \alpha_i = 3 \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2}. \quad (12.16)$$

Tämä on *Clausius–Mossotti-yhtälö*.

Jos staattiselle polarisoituvuudelle johdettu Clausius–Mossotti-yhtälö yleistetään myös optisilla taajuuksilla oskilloiville sähkömagneettisille kentille, siis valolle, niin yhtälön (6.46) mukaan

$$\mathcal{N}^2 = \epsilon_r. \quad (12.17)$$

Sillä edellytyksellä, että polarisoituvuus yhtälössä (12.16) on esim. elektronista alkuperää ja kykenee seuraamaan optisten taajuuksien oskillointia, voidaan (12.16) kirjoittaa ns.

*Lorenz–Lorentz-yhtälöksi*

$$\sum_i N_i \alpha_i = 3 \frac{\mathcal{N}^2 - 1}{\mathcal{N}^2 + 2}. \quad (12.18)$$

Staattisen kentän ja optisilla taajuuksilla oskilloivan kentän permittiivisyyksiä merkitään usein symboleilla  $\epsilon_r(0)$  ja  $\epsilon_r(\infty)$ .

## 12.4. Permittiivisyyden taajuusriippuvuus

Tarkastellaan seuraavaksi erilaisista polarisaatiomekanismeista johtuvia permittiivisyyden taajuusriippuvuuksia.

### 12.4.1. Elektroninen polarisoituvuus

Keveiden elektronien mukautuminen oskilloivaan sähkökenttään on nopeaa. Siten ne polarisoituvat helposti suurilla taajuuksilla kentän kuitenkään absorboitumatta. Eriste on läpinäkyvä myös matalamilla taajuuksilla, koska eristeen elektronit ovat "kiinni" atomeissa ja atomien välisissä sidoksissa. Riittävän korkeilla taajuuksilla eli suurilla sm-säteilyn kvantin energioilla eristekin tietysti absorboi kentän energiaa elektroniin transiioihin.

Oletetaan, että eristeen elektronit ovat sitoutuneet atomeihinsa/sidoksiin harmonisin voimin  $-k \mathbf{x} = -m\omega_i^2 \mathbf{x}$ . Tällöin elektronien klassinen liikeyhtälö (ilman mitään vaimennustermejä) on

$$m \ddot{\mathbf{x}} + m\omega_i^2 \mathbf{x} = 0. \quad (12.20)$$

Jos sm-kenttä  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}$  vaikuttaa, niin elektronien liikeyhtälö tulee muotoon

$$m \ddot{\mathbf{x}} + m\omega_i^2 \mathbf{x} = -e\mathbf{E},$$

joka voidaan ratkaista yrittäällä

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 e^{i\omega t}.$$

Sijoittamalla tämä liikeyhtälöön saadaan

Ja koska  $\mathbf{p} = \alpha \epsilon_0 \mathbf{E}$ , niin

$$\alpha(\omega) = e^2 / [\epsilon_0 m (\omega_i^2 - \omega^2)]. \quad (12.21)$$

Vastaava kvanttiteorian avulla saatu lauseke on

$$\alpha(\omega) = e^2 / \epsilon_0 m \sum_i f_i / (\omega_i^2 - \omega^2), \quad (12.22)$$

missä  $f_i$  ovat verrannollisia elektronien transiitodennäköisyyksiin energialla  $\hbar\omega_i$ . **Siten polarisoituvuus  $\alpha(\omega)$  on pieni, jos alin transiioenergia  $\hbar\omega_i$  on suuri ja päin vastoin, alueella  $\omega < \omega_i^{\text{alin}}$ , ks. kirjan taulukko 12.1.**

## 12.4.2. Ionipolarisoituvuus

Ionikiteisissä materiaaleissa, sellaisissa kuin NaCl, KCl, jne., **staattinen tai pienitaajuinen sähkökenttä** polarisoi kiteen atomaarista rakennetta, tavallaan ionipareja. Ionien liike on hidasta elektronien liikkeeseen verrattuna, joten niiden resonanssitaajuudet ja absorptio tapahtuvat paljon pienemmillä taajuuksilla kuin elektronien, **tyypillisesti infrapuna-alueella.**

### Pitkittäiset (LO) ja poikittaiset (TO) optiset moodit

Optisten hilavärähtelyjen (fononien) taajuudet ovat valon taajuuden luokkaa ja vastakkaismerkkisten ionivarausten liikkeet ovat vastakkaissuuntaisia. **Poikittainen sm-kenttä kytkeytyy vain poikittaiseen värähtelymoodiin** (transverse optical, TO), **mutta ei pitkittäiseen moodiin** (longitudinal optical, LO).

Koska valon aallonpituus on hyvin pitkä, on siihen kytkeytyvien fononien aaltovektori hyvin pieni,  $\mathbf{q} \approx 0$  ja samanmerkkiset ionivaraukset liikkuvat samassa tahdissa. Kun tarkastellaan tilavuutta  $V$ , jossa on  $N$  ioniparia, sen polarisaatio on

$$\mathbf{P} = [Nn_0e/V] (\mathbf{u} - \mathbf{v}). \quad (12.23)$$

Jos oletetaan ionien välille harmoninen voima  $-C\mathbf{r}$  ja niihin vaikuttavan lokaali sähkökenttä  $\mathbf{E}_{\text{loc}}$ , tulee liikeyhtälöksi

Yhtälöstä (12.23) saadaan nyt

$$-\omega^2 \mathbf{P} = \Omega_p^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}_{loc} - (C/M) \mathbf{P} \quad (12.29)$$

### LO-moodi

Tarkastellaan pitkittäisiä aaltoja levymäisten kerroksien läpi, jolloin depolarisaatiotekijä  $N' = 1$ . Silloin

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 - \mathbf{P}/\varepsilon_0 \quad (12.30)$$

ja yhtälöstä (12.13) seuraa

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E} + \mathbf{P}/3\varepsilon_0 = \mathbf{E}_0 - 2/3 \mathbf{P}/\varepsilon_0. \quad (12.31)$$

Koska pitkittäisiä sm-aaltoja ei ole, tällaisen aallon edetessä  $\mathbf{E}_0 = 0$  ja

$$\mathbf{E}_{loc} = -2/3 \mathbf{P}/\varepsilon_0. \quad (12.32)$$

Sijoittamalla tämä yhtälöön (12.29) saadaan

$$-\omega^2 \mathbf{P} = -2/3 \Omega_p^2 \mathbf{P} - (C/M) \mathbf{P},$$

josta

$$\omega^2 = \omega_L^2 = C/M + 2/3 \Omega_p^2. \quad (12.34)$$

### TO-moodi

Poikittaisen sm-kentän vaikuttaessa

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E} + \mathbf{P}/3\varepsilon_0. \quad (12.31)$$

Kun tämä sijoitetaan yhtälöön (12.29) saadaan

$$-\omega^2 \mathbf{P} = \Omega_p^2 \varepsilon_0 (\mathbf{E} + \mathbf{P}/3\varepsilon_0) - (C/M) \mathbf{P}. \quad (12.36)$$

Ominaistaajuus  $\omega = \omega_T$  saadaan, kun  $\mathbf{E} = 0$ , jolloin

$$\omega^2 = \omega_T^2 = C/M - 1/3 \Omega_p^2. \quad (12.37)$$

Nähdään siis, että  $\omega_T < \omega_L$  ja  $\omega_T^2 + \Omega_p^2 = \omega_L^2$ .

Suskeptiivisuus voidaan kirjoittaa yhtälöstä (12.36),

$$-\omega^2 \mathbf{P} = \Omega_p^2 \epsilon_0 (\mathbf{E} + \mathbf{P}/3\epsilon_0) - (C/M) \mathbf{P}$$