

V 48

## **Dipolrelaxation in Ionenkristallen**

Johannes Lamers  
johannes.lamers@udo.edu

Sebastian Fischer  
sebastian5.fischer@udo.edu

Durchführung: 31.05.2021

Abgabe: DATUM

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Zielsetzung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
2.1	Dipole in Ionenkristallen . . . . .	3
2.2	Herleitung des Polarisationsstroms über Polarisationsansatz . . . . .	4
2.3	Herleitung des Polarisationsstroms über Stromdichte . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Durchführung</b>	<b>5</b>
<b>4</b>	<b>Diskussion</b>	<b>7</b>

# 1 Zielsetzung

## 2 Theorie

Werden mehrere Atome über Ionenbindung zusammengehalten, wird dies als Ionenkristall bezeichnet. Die genaue Kristallstruktur variiert je nach Ionenkristall. In diesem Versuch liegt der Fokus auf Kaliumbromid, ein Ionenkristall aus Kalium- und Bromatomen. Das Kaliumbromid ist ein kubisch flächenorientierter Kristall, jedes Ion hat also 6 direkte Nachbarn.

### 2.1 Dipole in Ionenkristallen

Damit in einem Ionenkristall ein Dipolmoment anliegen kann, muss er mit einem Fremdmaterial dotiert werden. Dadurch, dass ein zweifach positiv geladenes Ion den Platz eines Kations einnimmt, kommt es zu einem Ladungsungleichgewicht, wodurch das Kation nach außen verdrängt wird und somit an seiner ursprünglichen Stelle eine Leerstelle entsteht. Demnach kommt es zu einer Verschiebung des Ladungsschwerpunktes, wodurch ein permanentes Dipolmoment, welches zur Leerstelle hin ausgerichtet ist, entsteht. Bei Raumtemperatur sind die Zustandswahrscheinlichkeiten über die Boltzmann-Statistik zu beschreiben. Das Gesamtdipolmoment ist also bei Raumtemperatur null. Eine Umorientierung der Dipole ist dann möglich, wenn die nötige Aktivierungsenergie  $W$  aufgebracht werden kann, um das Gitterpotential des Kristalls zu überwinden. Dies kann durch thermische Energie gewährleistet werden, wobei die Relaxationszeit, also die mittlere Zeit zwischen zwei Umorientierungen durch

$$\tau(T) = \tau_0 \exp\left(\frac{W}{k_B T}\right) \quad (1)$$

gegeben ist.  $\tau_0$  ist dabei die charakteristische Relaxationszeit, welche ein Grenzwert für  $\tau$  bei  $T \rightarrow \infty$  angibt.

Wirkt ein äußeres elektrisches Feld auf den Ionenkristall, so richten sich die Dipole entlang der E-Feldlinien aus. Dafür muss die Zeit der Dipole im E-Feld groß gegenüber der Relaxationszeit sein. Wird bei einer bestehenden Ausrichtung der Dipole das System hinreichend abgekühlt, wird deren Ausrichtung praktisch eingefroren, sie bleibt also auch nach Abschalten des E-Feldes bestehen. Dies lässt sich dadurch erklären, dass bei geringen Temperaturen nicht mehr die nötige Aktivierungsenergie  $W$  durch Thermische Energie aufgebracht werden kann. Wird darauf hin das System wieder mit einer konstanten Heizrate erwärmt, können die Dipole nach und nach wieder in ihre anfängliche Ausrichtung relaxieren. Dadurch tritt ein Relaxationsstrom auf, der durch die zeitliche Änderung der Polarisierung zustande kommt.

## 2.2 Herleitung des Polarisationsstroms über Polarisationsansatz

Die makroskopische Polarisation kann für hohe Temperaturen, dh.  $pE \ll k_B T$  durch

$$P = \frac{Np^2 E}{3k_B T} := y \quad (2)$$

genähert werden. Dabei ist  $N$  die Dichte der Dipole pro Volumen.  $y(T_p)$  ist der Anteil der ausgerichteten Dipole, der mit der temperaturabhängigen Stromdichte  $j(T)$  über

$$j(T) = y(T_p) p \frac{dN}{dt} \quad (3)$$

zusammenhängt, wobei  $\frac{dN}{dt}$  die Relaxationsrate ist, die durch  $-\frac{N}{\tau(T)}$  beschreiben werden kann, mit

$$N = N_p \exp\left(-\frac{1}{b} \int_{T_0}^T \frac{dt'}{\tau(T')}\right). \quad (4)$$

Die Zahl  $N_p$  beschreibt die zum Beginn des Heizprozesses bestehenden ausgerichteten Dipole pro Volumen und Heizrate  $b := \frac{dT}{dt}$ . Damit lässt sich insgesamt der Dipolarisationsstrom durch

$$j(T) = \frac{p^2 E N_p}{3k_B T_p \tau_0} \exp\left(-\frac{1}{b} \int_{T_0}^T \exp\left(-\frac{W}{k_B T'}\right) dT'\right) \cdot \exp\left(-\frac{W}{k_B T'}\right) \quad (5)$$

ausdrücken.

Bei niedrigen Temperaturen zu Anfang des Heizprozesses fließt kein signifikanter Strom, es kann also durch die Näherung

$$\int_{T_0}^T \exp\left(-\frac{W}{k_B T'}\right) dT' \approx 0 \quad (6)$$

die Stromdichte in diesem Bereich als

$$j(T) = \frac{p^2 E N_p}{3k_B T_p \tau_0} \exp\left(-\frac{W}{k_B T'}\right) \quad (7)$$

annähern.

### 2.3 Herleitung des Polarisationsstroms über Stromdichte

Der Polarisationsstrom kann im Allgemeinen durch

$$j(T) = -\frac{dP(t)}{dt} = \frac{P(t)}{\tau(T)} \quad (8)$$

beschrieben werden. Mit der zeitabhängigen Polarisation

$$P(t) = P_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau(T)}\right) \quad (9)$$

lässt die Gleichung, zusammen mit der Zeit  $t$  in Integraldarstellung, als

$$j(T) = \frac{P_0}{\tau} \exp\left(-\int_0^t \frac{dt}{\tau(T)}\right) \quad (10)$$

, und mit der bereits bekannten Definition der Heizrate  $b := \frac{dT}{dt}$  als

$$j(T) = \frac{P_0}{\tau} \exp\left(-\int_{T_0}^T \exp\left(-\frac{W}{k_B T'}\right) dT'\right) \quad (11)$$

ausdrücken.

## 3 Durchführung

Der Versuch wird gemäß Abbildung 1 aufgebaut. Als Probe wird ein mit Strontium dotierter Kaliumbromid(KBr)-Kristall verwendet.

Die Probe befindet sich innerhalb eines Plattenkondensators auf der unteren Kondensatorplatte. Der Kondensator ist innerhalb eines Rezipienten (Abbildung 2) mit einem Vakuum von etwa 0,001 mbar, welches von einer angeschlossenen Vakuumpumpe aufrechtgehalten wird. Ohne das Vakuum würde sich auf Grund seiner hygroskopischen Eigenschaftensich auf dem Kristall eine Wasserschicht bilden, welche der Genauigkeit des Versuches schade. Um die Temperatur des Kristalls zu beeinflussen befinden sich am Boden des Rezipienten eine Heizspule und ein Kühlfinger. Die jeweilige Heizrate kann über den Heizstrom reguliert werden. Zum Kühlen wird der Kühlfinger in flüssigen Stickstoff getaucht. Zum Ablesen der aktuellen Temperatur befindet sich ein Thermoelement auf dem Boden des Rezipienten.

Als erstes wird ein E-Feld im Kondensator mit einer Spannung von 950 V erzeugt. Zeitgleich wird der Kristall auf ca 55 °C erhitzt. Nach eine ausreichend langen Zeit (ca. 900 s) wird der Kühlfinger in flüssigen Stickstoff getaucht um so den Kristall auf −80 °C

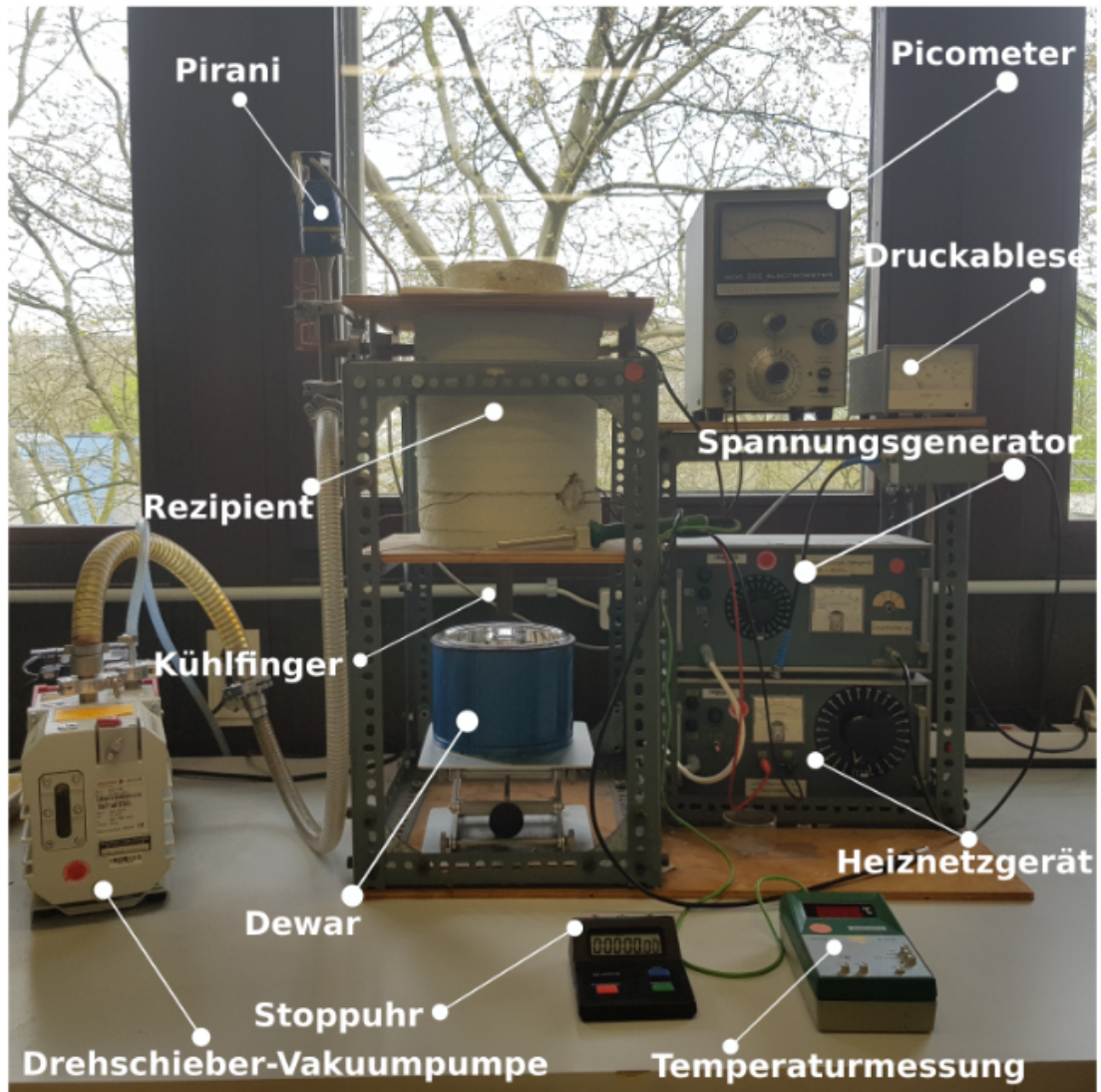
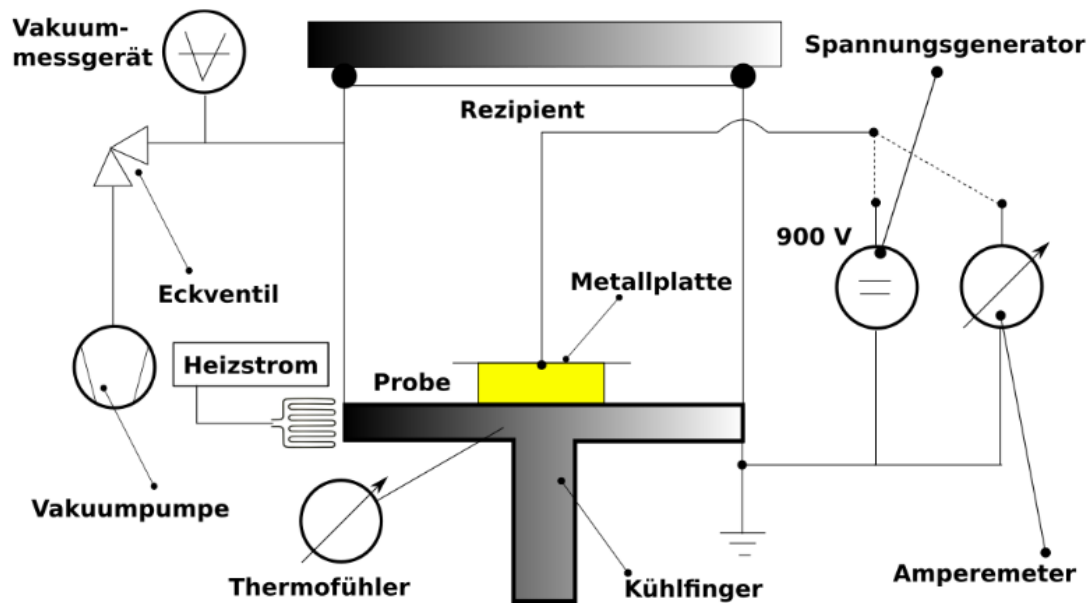


Abbildung 1: Aufbau des Versuches.



**Abbildung 2:** Skizzenhafte Darstellung des Aufbaus und Schaltbild der wichtigsten Komponenten.

abzukühlen. Sobald die Temperatur erreicht ist, wird das E-Feld abgestellt und der Kondensator für 6 min kurzgeschlossen. Daraufhin beginnen die Messungen.

Bei einer möglichst konstant gehaltenen Heizrate von  $1,5\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$  wird pro Minute die Temperatur und der Strom notiert. Diese/r lässt sich vom Thermoelement bzw. vom Amperemeter ablesen. Dabei ist der Strom gemeint, welcher durch die Spannung innerhalb des Kristalls erzeugt wird und durch die in Abbildung 2 dargestellte Schaltung fließt. Während der Messungen gilt es möglichst wenige große oder schnelle Bewegungen durchzuführen. Diese würden bereits die feinen Messungen des Stroms stören. Der ganze Prozess des Erhitzens, E-Feld erzeugen, Abkühlen etc. wird mit einer Heizrate von diesmal  $2\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$  wiederholt.

## 4 Diskussion