

PHY6505: Physique de la matière condensée

Cours 16 Propriétés diélectriques des isolants

François Schiettekatte
Université de Montréal
Automne 2010

Devoir #4:
A&M #26.3, #27.3
à rendre le 24 nov.

1

Densité de polarisation

- Pour chaque élément polarisable dans le solide

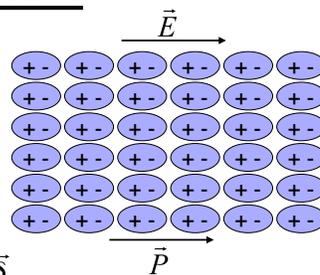
$$\vec{p} = q\vec{\delta}$$

- Pour le solide:
densité de polarisation $\vec{P} = \frac{N}{V}q\vec{\delta}$

- Point de vue macroscopique:

- Pour tout élément de volume à l'intérieur
champ entrant = champ sortant

- Variation du champ seulement à la surface



2

Polarisabilité

- À l'intérieur du matériau

$$\vec{E}^{local} = \vec{E} + \frac{4\pi}{3} \vec{P}$$

- or le champ d'induction $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$

- et $\vec{D} = \vec{E} + 4\pi \vec{P}$

- donc $\vec{P} = \frac{\epsilon - 1}{4\pi} \vec{E}$

- et $\vec{E}^{local} = \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E}$

- Polarisabilité α : rapport du dipôle induit par un ion sur le champ qui agit sur lui

$$\vec{p}(\vec{d}) + e\vec{u}(\vec{d}) = \alpha(\vec{d}) \vec{E}^{local}, \quad \alpha = \sum \alpha(\vec{d}), \quad \vec{d}: \text{position dans la base}$$

- comme $\vec{P} = \frac{1}{v_{cell}} \sum_{\vec{d}} [\vec{p}(\vec{d}) + e\vec{u}(\vec{d})]$, $\vec{P} = \frac{\alpha}{v_{cell}} \vec{E}^{local} \Rightarrow \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{4\pi\alpha}{3v_{cell}}$

À l'intérieur d'une sphère de polarisation \vec{P} le champ est uniforme et donné par

$$\frac{4\pi}{3} \vec{P}$$

Relation de Clausius-Mossotti

Polarisabilité

- Relation de Clausius-Mossotti

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{4\pi\alpha}{3v_{cell}} \Rightarrow \epsilon = \frac{3 + 8\pi\alpha / v_{cell}}{3 - 4\pi\alpha / v_{cell}}$$

- Polarisabilité atomique

- dipôle interne si le nuage électronique se déplace p/r au noyau

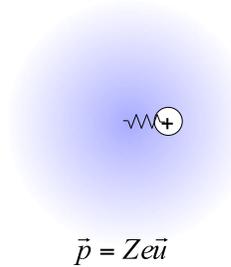
- Polarisabilité de déplacement

- si les ions positifs et négatifs se déplacent les uns p/r aux autres

Dépendance en fréquence de ϵ

- Polarisation atomique
- nuage électronique p/r cœur

- force de rappel Ku
- oscillateur forcé $\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{Zm}} \sim UV$
- Potentiel anharmonique
 - équivalent amortissement



$$\frac{1}{Zm} \times \left(Zm \frac{d^2 \vec{u}}{dt^2} + \frac{Zm}{\tau} \frac{d\vec{u}}{dt} + Zm\omega_0^2 \vec{u} = Ze\vec{E}_0 e^{-i\omega t} \right) \quad \text{onde plane}$$

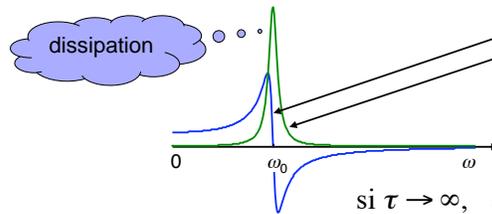
5

Dépendance en fréquence de ϵ

- Solution de la forme $\vec{u}(t) = Ae^{-i(\omega t + \phi)}$

$$\Rightarrow -A\omega^2 + iA\omega/\tau + \omega_0^2 A = \frac{e\vec{E}_0}{m} e^{i\phi} = \frac{e\vec{E}_0}{m} (\cos\phi + i\sin\phi)$$

$$A = \frac{e\vec{E}_0}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega/\tau} = \frac{e\vec{E}_0}{m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega/\tau)^2} \underbrace{((\omega_0^2 - \omega^2))}_{\text{réel}} + \underbrace{i\omega\tau}_{\text{imag}}$$



$$\text{si } \tau \rightarrow \infty, \quad \alpha_{at}(\omega) = \frac{Z_e^2}{m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2}$$

6

Dépendance en fréquence de ϵ

- Polarisabilité de déplacement
- Ions +/- dans la cellule

- même genre de solution, mais avec $M_{\text{cation}}, M_{\text{anion}}$

$$m \rightarrow M, \quad M^{-1} = M_{\text{cation}}^{-1} + M_{\text{anion}}^{-1}$$

$$\omega_0 \rightarrow \bar{\omega} = \sqrt{\frac{K_{\text{dépl.}}}{M}} \sim IR$$

$$A = \frac{e\bar{E}_0}{M} \frac{1}{(\bar{\omega}^2 - \omega^2)^2 + (\omega/\tau)^2} \underbrace{((\bar{\omega}^2 - \omega^2))}_{\text{réel}} + \underbrace{i\omega\tau}_{\text{imag}}$$

$$\text{si } \tau \rightarrow \infty, \quad \alpha_{\text{depl}}(\omega) = \frac{e^2}{M} \frac{1}{(\bar{\omega}^2 - \omega^2)}$$

7

Dépendance en fréquence de ϵ

- Supposons qu'on puisse simplement additionner les polarisabilités

$$\alpha = \alpha_{\text{anion}} + \alpha_{\text{cation}} + \alpha_{\text{déplacement}}$$

- Comparaison atomique vs déplacement:

$$Zm \ll M \Rightarrow \omega_0 \gg \bar{\omega}, \quad \hbar\omega_0 \sim 10 \text{ eV}, \quad \hbar\bar{\omega} \approx \hbar\omega_D \sim 10 \text{ meV}$$

8

Dépendance en fréquence de ϵ

□ Haute fréquence: $\bar{\omega} \ll \omega \ll \omega_0$

- Les atomes n'ont plus le temps de réagir en se déplaçant les uns p/r aux autres

$$\epsilon_\infty = \epsilon(\omega \gg \bar{\omega}) = \frac{3 + 8\pi\alpha_\infty / v_{cell}}{3 - 4\pi\alpha_\infty / v_{cell}}, \quad \alpha_\infty = \underbrace{\alpha'_{anion} + \alpha'_{cation}}_{\alpha_\infty}, \quad \alpha'_{depl} \rightarrow 0$$

variation ~nulle car $\omega \ll \omega_0$

□ Statique: $\omega \rightarrow 0 \Rightarrow A_{depl} \rightarrow \frac{e\vec{E}_0}{M\bar{\omega}^2} \Rightarrow \vec{u} = \frac{e\vec{E}_0}{M\bar{\omega}^2} e^{-i(\omega t + \phi)}$

$$\vec{p} = \alpha\vec{E}_0, \quad \alpha = \alpha_\infty + \alpha_{depl}$$

$$\vec{p} = e\vec{u} + \alpha_\infty\vec{E}_0 = (\alpha_{depl} + \alpha_\infty)\vec{E}_0 \Rightarrow \alpha_{depl}(0) = \frac{e^2}{M\bar{\omega}^2}$$

$$\epsilon_0 = \epsilon(\omega = 0) = \frac{3 + 8\pi\alpha_0 / v_{cell}}{3 - 4\pi\alpha_0 / v_{cell}}, \quad \alpha_0 = \alpha_\infty + \frac{e^2}{M\bar{\omega}^2} \quad 9$$

Dépendance en fréquence de ϵ

$$\alpha = \alpha_\infty + \frac{e^2}{\underbrace{M}_{(\alpha_0 - \alpha_\infty)\bar{\omega}^2}} \frac{1}{\bar{\omega}^2 - \omega^2 + i\omega/\tau}$$

$$\alpha_0 = \frac{3v_{cell}}{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 2} \right) \quad \alpha_\infty = \frac{3v_{cell}}{4\pi} \left(\frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 2} \right)$$

$$\Rightarrow \epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\bar{\omega}^2(\epsilon_\infty - \epsilon_0)}{\left(\omega^2 + i\frac{\omega}{\tau}\right)\left(\frac{\epsilon_0 + 2}{\epsilon_\infty + 2}\right) - 1}$$

$$\Rightarrow \epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\bar{\omega}^2(\epsilon_\infty - \epsilon_0)}{\left(\omega^4 + \left(\frac{\omega}{\tau}\right)^2\right)\left(\frac{\epsilon_0 + 2}{\epsilon_\infty + 2}\right) - 1} \left(\omega^2 - i\frac{\omega}{\tau}\right)$$

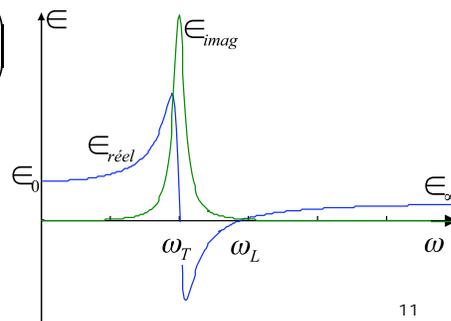
10

Dépendance en fréquence de ϵ

■ soit $\omega_T^2 = \bar{\omega}^2 \left(\frac{\epsilon_\infty + 2}{\epsilon_0 + 2} \right)$,

$\omega_L^2 = \omega_T^2 \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0}$ — Équation de Lyddane-Teller-Sachs

$\Rightarrow \epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \left(\frac{\omega^2 + i\omega/\tau - \omega_L^2}{\omega^2 + i\omega/\tau - \omega_T^2} \right)$



11

Dépendance en fréquence de ϵ

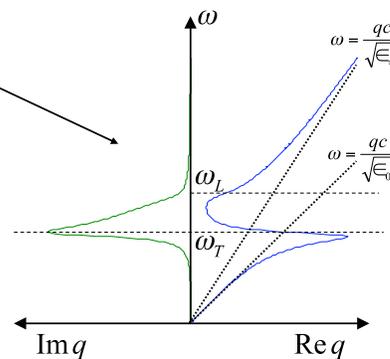
■ Relation de dispersion

- Ondes transversales

$$\frac{\omega \epsilon(\omega)}{c^2} = q^2$$

- Ondes longitudinales

- $\epsilon(\omega) = 0$
- possible si $\tau \rightarrow \infty$, $\omega = \omega_L$
d'où l'indice L



12

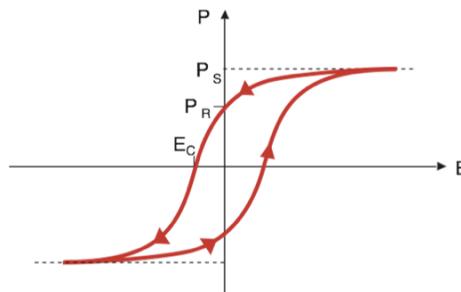
Et les semi-conducteurs?

- Jusqu'ici, discussion des cristaux ioniques
- Semi-conducteurs
 - Électrons localisés dans liens covalents
 - Forte polarisabilité
 - Constante diélectrique élevée

13

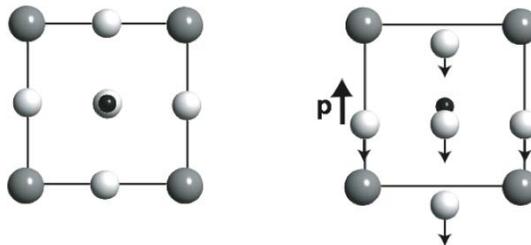
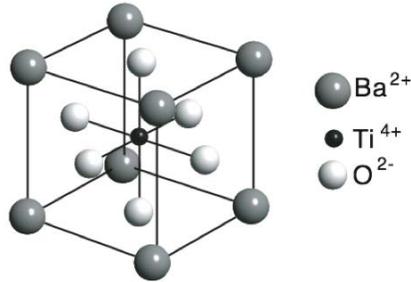
Ferroélectriques

- polarisation spontanée sans champ externe ou stress
- très semblable au ferromagnétisme sous plusieurs aspects:
 - alignement de dipôles
 - domaines
 - température de Curie, "paraélectrique" au dessus de T_C
- Mais interactions directes du champ électrique
 - Ferromagnétisme: interactions directes du champ magnétique des dipôles beaucoup trop faible pour être responsable du phénomène



14

BaTiO₃

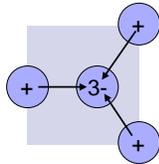


Source: www.phys.au.dk/~philip/book/lectures/lecture9.ppt

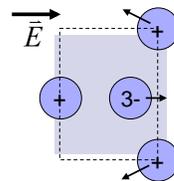
15

Piézoélectricité

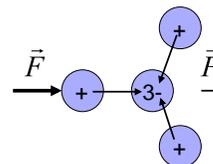
À l'équilibre
pas de dipôle net



L'application d'un champ
électrique produit une déformation



L'application d'une contrainte
produit une polarisation



16