2003.10.27 担当 吉森 明

I-4. 誘電率への応用

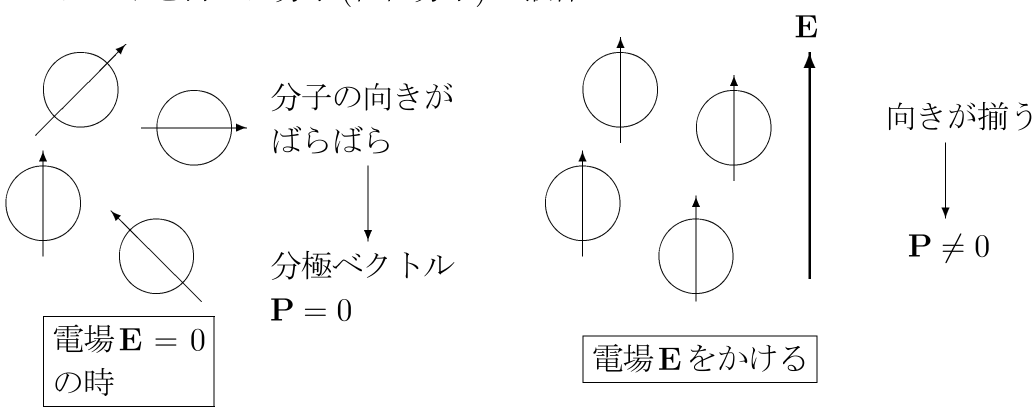
目標 久保公式を誘電率へ応用する。仮定が問題になることを理解し、公式の適応の仕方を学ぶ。誘電緩和とデバイモデルを理解する。

- 誘電現象は線形応答で考えられる。
- 緩和があると、応答に時間おくれが出来る。
- 外場が交流の時の式。
- 外場は電場と仮定した時の誘電率と相関関数の関係。
- 極性分子の密度が大きい時、外場を電場とすると間違っていること。
- デバイモデルの時の、応答関数の実部と虚部の関係。

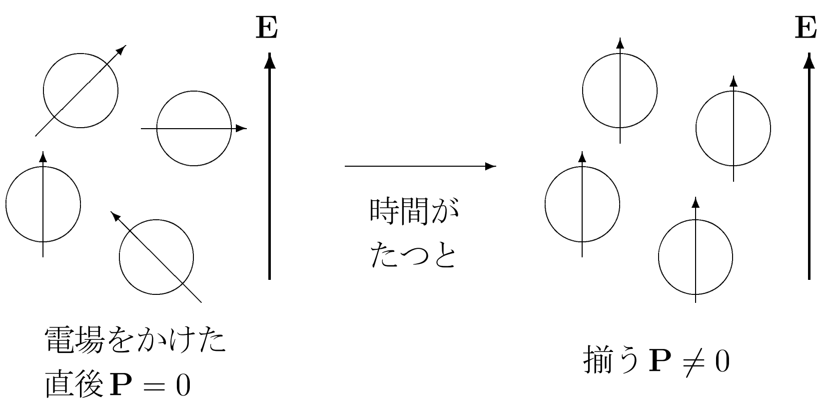
目次 (1) 誘電現象
(2) 交流外場
(3) 久保公式の応用
(4) 外場とは何か?
(5) デバイ円

(1) 誘電現象

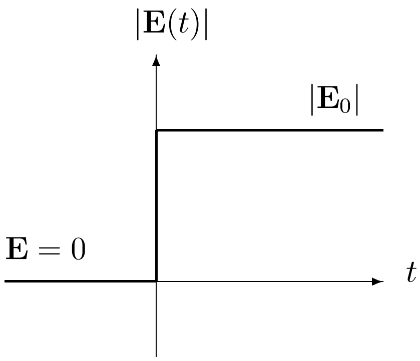
双極子モーメントを持った分子 (極性分子) の液体



○ 応答に時間おくれ (α が t に依存) がある理由
電場をかけても直ぐに分子が応答しない

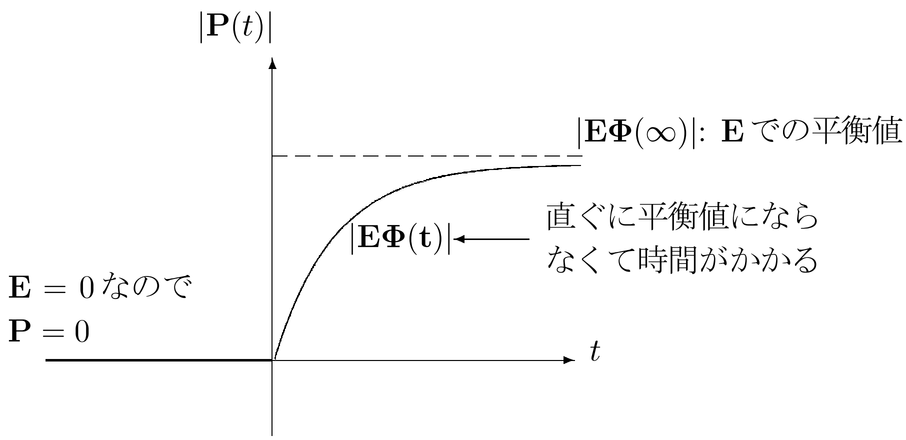


今簡単のために$\mathbf{E}(t) = \begin{cases} \mathbf{E}_0 & t \leq 0 \\ 0 & t > 0 \end{cases}$とすると、



§1-3の計算どおり、

$$\mathbf{P}(t) = \int_{-\infty}^{t} \boldsymbol{\alpha}(\tau) d\tau \mathbf{E}_0 = \mathbf{\Phi}(\mathbf{t})\mathbf{E}_0 \tag{1}$$



(2) 交流外場

実験的には、交流電場をかける。

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_\omega e^{i\omega t} \tag{2}$$

線形応答の式に代入すると、

$$\mathbf{P}(t) = \int_{-\infty}^{t} \boldsymbol{\alpha}(t - t')\mathbf{E}_\omega e^{i\omega t'} dt' \tag{3}$$

$\tau = t - t'$とすると、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(t) &= \int_{0}^{\infty} \boldsymbol{\alpha}(\tau)\mathbf{E}_\omega e^{i\omega(t-\tau)} d\tau \qquad (4) \\ &= \boldsymbol{\alpha}_\omega \mathbf{E}_\omega e^{i\omega t} \qquad (5) \end{aligned}$$

ここで、

$$\boldsymbol{\alpha}_\omega = \int_{0}^{\infty} \boldsymbol{\alpha}(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau \tag{6}$$

つまり、外場が交流の時は、$\mathbf{P}(t)$も$e^{i\omega t}$に比例。$\mathbf{P}(t) = \mathbf{P}_\omega e^{i\omega t}$とすると、

$$\boxed{\mathbf{P}_\omega = \boldsymbol{\alpha}_\omega \mathbf{E}_\omega} \tag{7}$$

つまり、積分がただの積になる。

(4) 外場とは何か?

系はほとんど無限大と見なせ、境界の影響を無視できる場合、電場の平均は、

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{r},\omega)\rangle = \mathbf{F}(\mathbf{r},\omega) + \int d\mathbf{r}' \mathbf{T}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{P}(\mathbf{r}',\omega) \tag{8}$$

一方、ハミルトニアンに入っているのは、$\mathbf{F}$ だから、久保公式は、

$$\mathbf{P}_\omega = \boldsymbol{\alpha}_\omega \mathbf{F}_\omega \tag{9}$$

として

$$\alpha_\omega^{\mu\nu} = -\beta\tilde{\psi}_\omega^{\mu\nu} \tag{10}$$

と書ける。ただし、$\alpha_\omega^{\mu\nu}$は、テンソル$\boldsymbol{\alpha}$の$\mu\nu$成分。また、$\mathbf{E}_\omega \neq \mathbf{F}_\omega$の場合でも、$\mathbf{P}_\omega$と$\langle \mathbf{E}_\omega\rangle$には、線形応答は成り立っているので、それを、

$$\mathbf{P}_\omega = \boldsymbol{\chi}_\omega \langle \mathbf{E}_\omega\rangle \tag{11}$$

と書く。周波数依存の誘電率とは、

$$\boldsymbol{\epsilon}_\omega = \boldsymbol{\epsilon}_0 + \boldsymbol{\chi}_\omega \tag{12}$$

の関係にある。

(8) 式を空間についてフーリエ変換すると (宿題11)、

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{k},\omega)\rangle = \mathbf{F}(\mathbf{k},\omega) + \mathbf{T}(\mathbf{k})\mathbf{P}(\mathbf{k},\omega) \tag{13}$$

ここで、$\mathbf{T}(\mathbf{k})$ は、テンソルでその$\mu\nu$成分は、

$$T_{\mu\nu}(\mathbf{k}) = -\frac{k_\mu k_\nu}{\epsilon_0 k^2} \tag{14}$$

で与えられる。座標のz軸を$\mathbf{k}$ 方向に取ると、

$$\langle E_z(\mathbf{k},\omega)\rangle = F_z(\mathbf{k},\omega) - \epsilon_0^{-1} P_z(\mathbf{k},\omega) \tag{15}$$

周波数依存の誘電率と相関関数の関係を知りたいので、$\mathbf{k}\to 0$ にすると、

$$\langle E_\omega^z\rangle = F_\omega^z - \epsilon_0^{-1} P_\omega^z \tag{16}$$

ただし、$E_z(0,\omega) = VE_\omega^z$とした。$F$についても、$P$についても同様。

$\chi_\omega^{\mu\nu} = \chi_\omega\delta_{\mu\nu}$を仮定すると、(11) 式から

$$\begin{aligned}\langle E_\omega^z\rangle &= F_\omega^z - \epsilon_0^{-1}\chi_\omega\langle E_\omega^z\rangle & (17)\\ &= \frac{F_\omega^z}{1+\epsilon_0^{-1}\chi_\omega} & (18)\end{aligned}$$

さらに、(11) 式のz成分に代入すると、

$$P_\omega^z = \chi_\omega \frac{F_\omega^z}{1+\epsilon_0^{-1}\chi_\omega} \tag{19}$$

(9) 式と比べると、$\alpha_\omega^{zx} = \alpha_\omega^{zy} = 0$で、

$$\alpha_\omega^{zz} = \frac{\chi_\omega}{1+\epsilon_0^{-1}\chi_\omega} \tag{20}$$

$\chi_\omega^{\mu\nu}=\chi_\omega\delta_{\mu\nu}$だから、$\epsilon_\omega^{\mu\nu}=\epsilon_\omega\delta_{\mu\nu}$で、それに(12)式を使うと、$\chi_\omega=\epsilon_\omega-\epsilon_0$だから、

$$\alpha_\omega^{zz}=\frac{\epsilon_\omega-\epsilon_0}{1+\epsilon_0^{-1}(\epsilon_\omega-\epsilon_0)}=\frac{\epsilon_\omega-\epsilon_0}{\epsilon_0^{-1}\epsilon_\omega}=\epsilon_0\frac{\epsilon_\omega-\epsilon_0}{\epsilon_\omega} \tag{21}$$

久保公式(10)から、

$$-\beta\tilde{\psi}_\omega^{zz}=\epsilon_0\frac{\epsilon_\omega-\epsilon_0}{\epsilon_\omega} \tag{22}$$

宿題:

10 (10 点) 双極子モーメント$\boldsymbol{\mu}$を持った点双極子が$\mathbf{r}'$にある時、$\mathbf{r}$の電場$\mathbf{E}(\mathbf{r})$は、

$$\mathbf{E}(\mathbf{r})=\mathbf{T}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\boldsymbol{\mu} \tag{23}$$

で与えられることを示しなさい。ただし、$\mathbf{T}(\mathbf{r})$は、3次元のテンソルでその$\mu\nu$成分は、

$$T_{\mu\nu}(\mathbf{r})=\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{3r_\mu r_\nu}{r^5}-\frac{\delta_{\mu\nu}}{r^3}\right) \tag{24}$$

r_μは、$\mathbf{r}$のμ成分で、$r=|\mathbf{r}|$。

11 (20 点) (8)式をフーリエ変換すると、(13)式になることを示しなさい。ただし、(8)式の$\mathbf{T}(\mathbf{r})$は、(24)式で与えられる。

12 (20 点) (22)式は、$\tilde{\psi}_\omega^{zz}$とϵ_ωの関係を示している。(15)式で他の成分を考えることにより、$\boldsymbol{\psi}_\omega$の他の成分とϵ_ωの関係を導きなさい。