2005 年度物性物理学特論 授業ノート 4

2003.11.4 担当 吉森 明

I-5. 誘電率への応用

目標 久保公式が合わない時、どの仮定が間違っているかを誘電率の例で分かるようにする。デバイモデルと誘電率の関係を理解する。

- 分子液体の密度が低い時、α_ω は誘電率から真空の誘電率を引いたものになる。
- 密度が大きくなると、久保公式の仮定が破れる。
- 相関関数が指数関数の物をデバイモデルという。久保公式から $\alpha(t)$ も指数関数。
- デバイモデルの時、応答関数の実部と虚部のグラフを書くと円になる。

目次 (1) 密度が小さい時の誘電率と久保公式

(2) 密度が大きい時の誘電率と久保公式

(3) デバイ円

問題 水の分極ベクトルの時間相関関数は、

$$\lim_{k\to 0}\frac{\langle P_x(k,t)P_x(k,0)\rangle}{\langle (P_x(k,0))^2\rangle}=e^{-t/\tau_D} \tag{1}$$

となることが知られている。ここで、$\mathbf{P}(k,t)$ を、空間に依存する分極ベクトルを空間についてフーリエ変換したベクトルとすると、$P_x(k,t)$ は、そのベクトルの波数に垂直な成分を表す。τ_D は、デバイ緩和定数と呼ばれ、水では約 8ps と測られている[*1]。マイクロ波を使って、誘電率を測ったとき、虚部のピークがどの振動数に出るか求めなさい。

(1) 密度が小さい時の誘電率と久保公式

○ I-2 で、1 次元の誘電応答が

$$P(t)=\int_{-\infty}^{t}\alpha(t-t')E(t)dt' \tag{2}$$

$$\alpha(t)=-\beta\langle\dot{P}(t)P(0)\rangle \tag{3}$$

となることを議論した。3 次元で書くと $\mathbf{P}(t)=(P_x(t),P_y(t),P_z(t))$ となり、$\mathbf{E}(t)$ も同様に成分で書くと、

$$P_\mu(t)=\sum_{\nu=x,y,z}\int_{-\infty}^{t}\alpha_{\mu\nu}(t-\tau)E_\nu(\tau)d\tau \tag{4}$$

[*1] M. Maroncelli, J. MacInnis, and G. R. Fleming, Science, **243** 1675 (1989) に引用文献が載っている。

となり、1 成分の時と同様に、

$$\alpha_{\mu\nu}(t) = -\beta\langle \dot{P}_\mu(t) P_\nu(0)\rangle \tag{5}$$

が示せる (宿題 12 参照)。ただし、これは分子液体の密度の小さい時だけ正しい。

記号の省略のために、$\phi_{\mu\nu}(t) = \langle \dot{P}_\mu(t) P_\nu(0)\rangle$ とすると、

$$\alpha_{\mu\nu}(t) = -\beta\phi_{\mu\nu}(t) \tag{6}$$

また、I-2 では、$E(t) = E_0 \cos\omega t$ のとき $\alpha_\omega = -\beta\tilde{\phi}(-i\omega)$ も示した。ただし、

$$\alpha_\omega = \int_0^\infty \alpha(t) e^{i\omega t} dt \qquad \tilde{\phi}(s) = \int_0^\infty \phi(t) e^{-st} dt \tag{7}$$

○ 誘電率 ϵ を考える。

$$\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P} \tag{8}$$

ここで、ϵ_0 は、真空の誘電率。全ての量が時間変化すると考えると、フーリエ変換して、

$$\mathbf{D}_\omega = \epsilon_\omega\mathbf{E}_\omega = \epsilon_0\mathbf{E}_\omega + \mathbf{P}_\omega \tag{9}$$

誘電率が ω に依存するのは、応答に時間遅れがあるため。また、I-2 で $\mathbf{P}_\omega = \alpha_\omega\mathbf{E}_\omega$ を示したから、$\mathbf{D}_\omega = \epsilon_0\mathbf{E}_\omega + \alpha_\omega\mathbf{E}_\omega = (\epsilon_0 + \alpha_\omega)\mathbf{E}_\omega$ となる。一方、$\mathbf{D}_\omega = \epsilon_\omega\mathbf{E}_\omega$ だから、

$$\boxed{\epsilon_\omega = \epsilon_0 + \alpha_\omega} \tag{10}$$

久保公式から、$\epsilon_\omega = \epsilon_0 - \beta\tilde{\phi}(-i\omega)$ が示せる。

ω 依存の誘電率は、マイクロ波などの実験で測定できる。

宿題:

12 (10 点) 授業でやったのと同じ方法で、(5) 式を示しなさい。ただし、1 成分の時にした仮定は、すべて満たされるとする。特に、仮定 2 は、ハミルトニアンが $H = H_0 - \mathbf{P}\cdot\mathbf{E}(t)$ で書けるとする。

13 (10 点) 電場が一方向に $E(t) = \Re E_0 e^{i\omega t}$ の様に時間変化する時、t が 0 から $2\pi/\omega$ まで経った時の電場の吸収

$$I = -\int_0^{\pi/\omega} P(t)\dot{E}(t) dt \tag{11}$$

を線形応答の範囲で ω、α''_ω と E_0 を使って表しなさい。ただし、$\Re$ は実部を表し、$P(t)$ は分極ベクトルの電場方向の成分で、(2) 式が成り立つとする。また、α''_ω は、$\alpha(t)$ のフーリエ変換の虚部を表す。これを使って、吸収と誘電率の関係を求めなさい。