2005 年度物性物理学特論 授業ノート 5

2005.11.11 担当 吉森 明

お知らせ: 講義日程を次のように変更します。

12 月 2 日 休講 (集中講義のため)

1 月 20 日 開講

最初の日に配布したプリント (ガイダンス) のスケジュールも 1 回ずつずれます。

I-5. 誘電率への応用

(3) デバイ円

具体的なモデルを使って誘電率を計算しよう。$\mathbf{P}(k,t)$ 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、波数に垂直な成分を $P_x(k,t)$ として

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

と仮定する。これを**デバイモデル**と呼ぶ。τ_D は、緩和時間を表す。

デバイモデルが当てはまる液体はいくつか知られていて、例えば、アセトンやアセトアミド、そして水もある周波数領域では、指数関数で表される。それぞれ τ_D =3.2 ps、390 ps、8.32 ps が測定されている。また、アルコール類はデバイモデルのように 1 つの指数関数ではなく、3 つの指数関数で表される。

デバイモデルの場合、

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

したがって、

$$\tilde{\phi}^{xx}(s) = \int_0^\infty \phi^{xx}(t)e^{-st}dt = -\frac{\langle P_x^2\rangle}{\tau_D}\left[\frac{e^{-(1/\tau_D+s)t}}{-(1/\tau_D+s)}\right]_0^\infty \tag{3}$$

$$= -\frac{\langle P_x^2\rangle}{\tau_D}\frac{1}{1/\tau_D+s} = -\langle M^2\rangle\frac{1}{1+s\tau_D} \tag{4}$$

ゆえに

$$\epsilon_\omega = \epsilon_0 - \beta\tilde{\phi}^{xx}(-i\omega) = \epsilon_0 + \frac{\beta\langle P_x^2\rangle}{1-i\omega\tau_D} = \epsilon_0 + \Delta\epsilon\frac{1}{1-i\omega\tau_D} \tag{5}$$

ここで、$\Delta\epsilon = \beta\langle P_x^2\rangle$。

周波数依存の誘電率を実部 ϵ'_ω と虚部 ϵ''_ω に分ける。デバイモデルの場合は、

$$\epsilon'_\omega = \epsilon_0 + \Delta\epsilon \frac{1}{1+\omega^2\tau_D^2} \qquad \epsilon''_\omega = \Delta\epsilon \frac{\omega\tau_D}{1+\omega^2\tau_D^2} \tag{6}$$

縦軸に ϵ''_ω、横軸に ϵ'_ω をとってグラフを書くとどうなるか?(**コール・コールプロット**) 少し計算すると、(宿題 17 参照)

$$\left|\epsilon_\omega - \epsilon_0 - \frac{\Delta\epsilon}{2}\right|^2 = \frac{\Delta\epsilon^2}{4} \tag{7}$$

これは、

$$\left(\epsilon'_\omega - \epsilon_0 - \frac{\Delta\epsilon}{2}\right)^2 + \epsilon''^2 = \frac{\Delta\epsilon^2}{4} : \omega\text{によらない} \tag{8}$$

を意味する。つまり、デバイモデルのコール・コールプロットは、

$$\boxed{\left(\epsilon_0 + \frac{\Delta\epsilon}{2}, 0\right)\text{を中心とした半径}\frac{\Delta\epsilon}{2}\text{の半円}} \tag{9}$$

I-5. 電気伝導への応用

目標　電気伝導に時間遅れがあると、伝導率が複素数になることを理解する。

- 電気伝導も緩和現象として考えられる。
- 線形応答は、時間遅れになるので、伝導率は複素数になる。
- 久保公式を使うと、伝導率と電流密度の相関関数に関係がつく。

目次　(1) 電気伝導

(2) 線形応答と複素伝導率

(3) 久保公式の応用

問題　水中にある電荷を持ったコロイド粒子の速度 $V(t)$ の相関関数が

$$\langle V(t)V(0)\rangle = \langle V^2\rangle e^{-\gamma t} \tag{10}$$

で表される時、このコロイド粒子系の電気伝導度を求めよ。

宿題:

14 **(5 点)** 等方的な分子液体で分極ベクトル $\mathbf{P}(t)$ と電場 $\mathbf{E}(t)$ について、線形応答

$$\mathbf{P}(t) = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-\tau)\mathbf{E}(\tau)d\tau \tag{11}$$

が成り立つ時、フーリエ変換したものが

$$\mathbf{P}_\omega = \alpha_\omega \mathbf{E}_\omega \tag{12}$$

となることを示せ。ただし、

$$\alpha_\omega = \int_0^\infty \alpha(t)e^{i\omega t}dt \qquad \mathbf{P}_\omega = \int_{-\infty}^\infty \mathbf{P}(t)e^{i\omega t}dt \tag{13}$$

$\mathbf{E}_\omega$ も同様に定義する。

15 **(45 点)** 密度が大きい時の誘電率と分極ベクトルの相関関数の関係を次のように求めなさい。

(a) 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、

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{T}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\boldsymbol{\mu} \tag{14}$$

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、

$$T_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{3r_\mu r_\nu}{r^5} - \frac{\delta_{\mu\nu}}{r^3}\right) \tag{15}$$

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

(b) $\mathrm{M}(\mathbf{r}) \equiv \sum_i \boldsymbol{\mu}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ なる量を考える。$\boldsymbol{\mu}_i$ と $\mathbf{r}_i$ は、今考えている液体における i 番目の分子の双極子モーメントと位置ベクトルを表す。$\mathbf{E}_\mu(\mathbf{r})$ を全ての分子が作り出す電場の和だとすると、

$$\mathbf{E}_\mu(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \mathbf{T}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mathrm{M}(\mathbf{r}') \tag{16}$$

となることを示せ。

(c) 系にかかる電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ は、外場 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ を使って、$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_\mu(\mathbf{r})$ と書ける。ただし、一般的に外場 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ も $\mathbf{r}$ によるとした。$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \langle \mathrm{M}(\mathbf{r}) \rangle$ を説明して、

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \rangle = \mathbf{F}(\mathbf{r}, \omega) + \int d\mathbf{r}' \mathbf{T}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mathbf{P}(\mathbf{r}', \omega) \tag{17}$$

を示せ。ただし、時間変化を考慮して、さらに時間変化については、フーリエ変換をしている。

(d) (17) 式を空間についてフーリエ変換すると、

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) \rangle = \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) + \mathbf{T}(\mathbf{k})\mathbf{P}(\mathbf{k}, \omega) \tag{18}$$

となることを示しなさい。ここで、空間についてのフーリエ変換は、

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = \int \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \tag{19}$$

とし、$\mathbf{T}(\mathbf{k})$ はテンソルで、その $\mu\nu$ 成分は、

$$T_{\mu\nu}(\mathbf{k}) = -\frac{k_\mu k_\nu}{\epsilon_0 k^2} \tag{20}$$

で与えられる。

(e) 座標の z 軸を $\mathbf{k}$ 方向に取ると、

$$\langle E_z(\mathbf{k}, \omega) \rangle = F_z(\mathbf{k}, \omega) - \epsilon_0^{-1} P_z(\mathbf{k}, \omega) \tag{21}$$

となることを計算しなさい。

(f) これまで一般的に外場を $\mathbf{r}$ によるとしてきたが、今の目的には $\mathbf{r}$ によらない外場で良い。$F_z(\mathbf{r},\omega)$ を $\mathbf{r}$ によらない定数 F^z_ω にした時、$P_z(\mathbf{r},\omega)$ も定数 P^z_ω になることを使い、$\langle E_z(\mathbf{k},\omega)\rangle$ も定数 $\langle E^z_\omega\rangle$ となることを示しなさい。さらに、

$$\langle E^z_\omega\rangle = F^z_\omega - \epsilon_0^{-1} P^z_\omega \tag{22}$$

を導きなさい。

(g) 誘電率の定義から導ける

$$P^z_\omega = (\epsilon_\omega - \epsilon_0)\langle E^z_\omega\rangle \tag{23}$$

を使って、

$$\langle E^z_\omega\rangle = \frac{F^z_\omega}{1+\epsilon_0^{-1}(\epsilon_\omega - \epsilon_0)} \tag{24}$$

を示しなさい。

(h) (24) 式を (23) に代入して、

$$P^z_\omega = (\epsilon_\omega - \epsilon_0)\frac{F^z_\omega}{1+\epsilon_0^{-1}(\epsilon_\omega - \epsilon_0)} \tag{25}$$

を導きなさい。

(i) 久保公式を使って、

$$-\beta\tilde{\phi}^{zz}(-i\omega) = \epsilon_0 \frac{\epsilon_\omega - \epsilon_0}{\epsilon_\omega} \tag{26}$$

を示しなさい。

16 (25 点) (26) 式は、$\tilde{\phi}^{zz}(-i\omega)$ と ϵ_ω の関係を示している。同様にして、波数に垂直な成分 $\tilde{\phi}^{xx}(-i\omega)$ と ϵ_ω の関係を求めなさい。

17 (5 点) (7) を示しなさい。