

5. 物質中のMaxwell方程式Ⅲ

5.1 ローレンツ振動子モデルと緩和則

外部電場によって電子が応答することによる誘電関数のモデルを考える。具体的には、半導体や絶縁体の光吸収をどのように記述するかという問題である。

厳密には、量子力学が必要。束縛電子の光遷移を固有振動数の振動子として古典的にモデル化する。

$$m(\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_0^2 x) = -eE$$

$e^{-i\omega t}$ で振動するフーリエ成分に対して次の強制振動解が得られる。

$$\mathbf{P}(\omega) = -e\mathbf{x} = \frac{e^2}{m}(\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma)^{-1}\mathbf{E}(\omega)$$

ここで、Z 個の電子を持つ分子が単位体積あたり N 個あるとすると、

$$\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{Ne^2}{m} \sum_j \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j}$$

がえられる。これをローレンツ振動子モデルとよぶ。ここで、Z 個の電子すべてに同じ ω を

与えるのではなく ω_j 、 γ_j のものが f_j 個あると考えている。この f_j を振動子強度とよぶ。 f_j に

は総和則 $\sum_j f_j = Z$ が成り立つ。

高周波極限では、自由プラズマの式になる。

$$\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{Ne^2}{m} \sum_j \frac{f_j}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \sim 1 - \frac{Ne^2}{m\omega^2} \sum_j f_j \sim 1 - \frac{NZe^2}{m\omega^2}$$

($\omega \gg \omega_j, \gamma$ のとき)

<指数関数的な応答をする双極子モーメント>

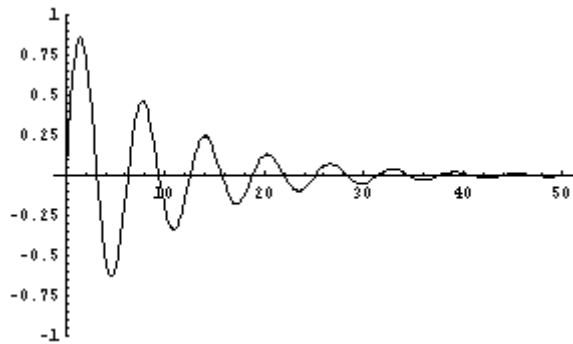
ローレンツモデルの意味を考えるため、応答関数として、図に示すような

$f(t) = A \sin(\omega_0 t) e^{-\gamma t}$ を考えよう。いわゆる減衰振動の応答である。¹ ここに A は定数である。

る。

Plot[Sin[x] Exp[-0.1 x], {x, 0, 50}, PlotRange -> {-1, 1}]

¹ 例えば、鐘を叩いた後の残響を考えればよい。



この場合、感受率はフーリエ変換することにより容易に求まる。

$$\begin{aligned}\chi(\omega) &= \int_0^{\infty} dt f(t) e^{i\omega t} = \frac{A}{2} \left\{ \frac{1}{\omega + \omega_0 + i\gamma} - \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\gamma} \right\} \\ &= A \frac{-\omega_0}{(\omega + i\gamma)^2 - \omega_0^2} \\ &= A \frac{\omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega}\end{aligned}$$

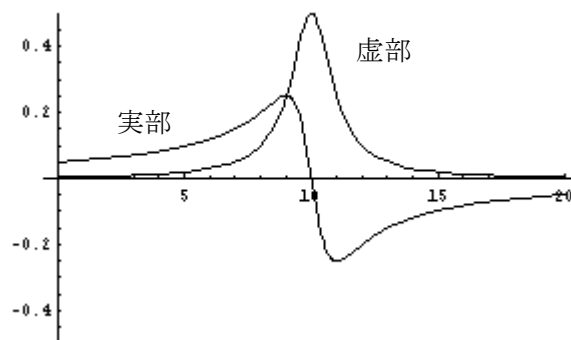
ここで、最後の变形では $\gamma \ll \omega_0$ をもちいて、分母の γ^2 の項を落としている。

最終形はローレンツモデルと同型である。

共鳴に近いところ ($\omega \approx \omega_0$) では、2列目の第二項が主になり、

$$\begin{aligned}\chi'(\omega) &= -\frac{A}{2} \frac{\omega - \omega_0}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2} \\ \chi''(\omega) &= \frac{A}{2} \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2}\end{aligned}$$

が得られる。図に共鳴近傍の実部、虚部のグラフを示す。虚数部は共鳴周波数 $\omega \approx \omega_0$ にピークを持つローレンツ型とよばれる曲線になっている。それに対して、実部は微分波形で、低周波側が大きくなる。その増大分を以下で考える。



また、 $\omega \rightarrow 0$ 、 $\omega \rightarrow \infty$ の極限ではそれぞれ、

$$\chi(0) = A \frac{\omega_0}{(\omega_0)^2 + \gamma^2} \approx \frac{A}{\omega_0}$$

$$\chi(\infty) = 0$$

となり、特に振動数が0に近いときは虚数部は消失するが、実数部は残る。これは静的な誘電率にはすべての共鳴の情報が含まれていることを意味する。

5.2. デバイ振動子モデル

μ をダイポールモーメントとし、自由にその向きを回転できるものとする。外場がないときには、平均のモーメント $m = \langle \mu \rangle$ は明らかにゼロである。外場をかけると、その向きに整列するので、巨視的な分極が現れる。単位体積あたり N 個の分子を考え、 x 方向の電場 \mathbf{E} をかけたとしよう。簡単のために、問題を1次元で考えよう。電場方向の分子数を N_1 、反対方向を N_2 とすると、

$$m = \mu \frac{N_1 - N_2}{N} \quad \text{がえられる。}$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -(P_{12} + P_{21})m - (P_{12} - P_{21})\mu$$

ここに、 P_{12} 、 P_{21} は統計力学的な遷移確率であり、下式で与えられる。

$$P_{12} = \frac{\omega_0}{2\pi} e^{(\Delta + \mu E)kT} = P_0 e^{-\frac{\mu E}{kT}}$$

$$P_{21} = P_0 e^{\frac{\mu E}{kT}}$$

$$P_0 = \frac{\omega_0}{2\pi} e^{-\frac{\Delta}{kT}}$$

$\mu E \ll kT$ とすると $e^{\frac{\mu E}{kT}} \approx 1 + \frac{\mu E}{kT}$ より

$$\tau_0 \frac{\partial m}{\partial t} = -m + \frac{\mu^2 E}{kT}$$

が得られる。ただし、 $\tau_0 = \frac{1}{2P_0}$ とおいた。角振動数 ω のフーリエ成分を考え、3次元空

間での平均に換算するために x 方向への射影平均 $\langle \cos^2 \theta \rangle = \frac{1}{3}$ を考えると、最終的に

$$m = \frac{\mu^2}{3kT} \frac{1}{1 - i\omega\tau_0} E$$

となる。誘電関数は下記のように与えられる。

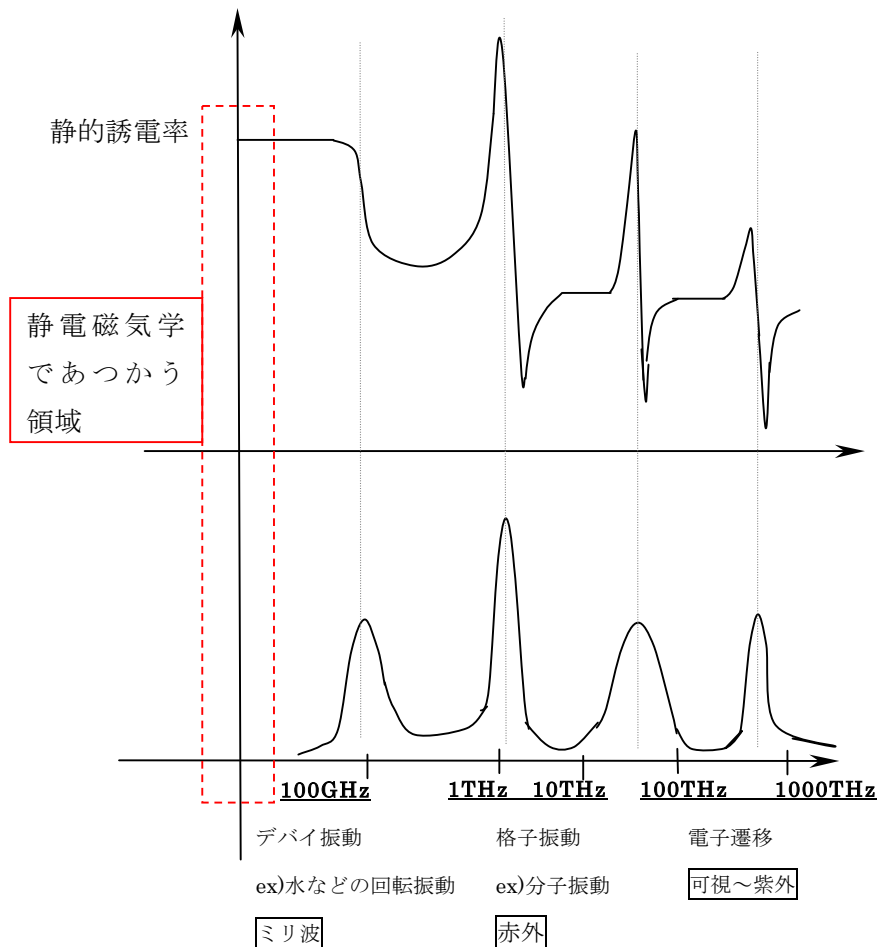
$$\varepsilon - \varepsilon_0 = \frac{\varepsilon_0 N \mu^2}{3kT} \frac{1}{1 - i\omega\tau_0}$$

これは、応答関数として $f(t) \propto \frac{e^{-t/\tau_0}}{\tau_0}$ とおいた場合の誘電関数となっている。この応答関数は振動をせずに指数関数的に減衰することから、デバイモデルで記述されるモードはしばしば緩和モードと呼ばれ、水や2次相転移を示す強誘電体で観測される。この誘電率の周波数分散を以下に示す。

$$\begin{cases} \varepsilon' - \varepsilon(\omega) = \frac{\varepsilon(0) - \varepsilon(\omega)}{1 + \omega^2\tau^2} \\ \varepsilon''(\omega) = \frac{\varepsilon(0) - \varepsilon(\omega)}{1 + \omega^2\tau^2} \omega\tau \end{cases}$$

5.3 広い周波数領域の分散

広い周波数領域での分散を概観する。(上が実部、下が虚部)



5.4 群速度と波束伝播

物質中の位相速度は $v_p = \frac{\omega}{|\mathbf{k}|} = \frac{c}{n}$ であたえられる。

ここでは波束の伝播を考える。

群速度

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}x - i\omega t} d^3k$$

$$|\mathbf{u}(x,0)|^2, |\mathbf{A}(\mathbf{k})|^2 \text{ のそれぞれの幅 } \Delta x, \Delta \mathbf{k}, \Delta x \Delta \mathbf{k} \geq 1/2$$

$\mathbf{A}(\mathbf{k})$ が \mathbf{k}_0 のまわりで鋭いピークを持つとすると、

$$\omega = \omega_0 + \left. \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}_0} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \quad \text{ただし、} \omega_0 = v_p |\mathbf{k}_0| = \frac{c}{n} |\mathbf{k}_0|$$

$$\mathbf{u}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \left(x - \left. \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}_0} t \right)} \times e^{+i \left. \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}_0} \mathbf{k}_0 t - i\omega_0 t}$$

$$x' = x - \left. \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}_0} t \text{ とおくと、}$$

$$\mathbf{u}(x,t) = \mathbf{u}(x',0) e^{i \left[\left. \mathbf{k}_0 \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}_0} - \omega_0 \right] t}$$

$$\therefore \quad \left| \mathbf{u}(x,t) \right| = \left| \mathbf{u} \left(x - \left. \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}_0} t, 0 \right) \right| = \left| \mathbf{u}(x - v_g t, 0) \right|$$

↑ \mathbf{v}_g 群速度