

## Lorentz の局所場

誘電体や磁性体などの双極子モーメントの立方対称性を持つ結晶を考えよう。一様な電場  $\mathbf{E}$  あるいは磁場  $\mathbf{H}$  の中に置かれた誘電体、或いは磁性体中の、任意の双極子モーメントが受ける局所場がどの様に表せるかを考えてみよう。その様な局所場を、ローレンツの局所場と呼んでいる。ここでは、電場中の誘電体の例で考える。

この時に、誘電体の形状の考察を簡単にするために、注目する双極子モーメントを中心とする半径  $R$  の球を考える。そうすると、考えるべき電場  $\mathbf{F}$  は、外部電場  $\mathbf{E}_0$ 、球をくり抜いた後に発生する誘電体表面の誘導電荷が作る電場  $\mathbf{E}_1$ 、それに、くり抜いた誘電体球内の他の双極子モーメントによる電場  $\mathbf{E}_2$ 、の3つがある：

$$\mathbf{F} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$$

結果から言うと、立方対称で配列した球内の双極子モーメントの作る電場  $\mathbf{E}_2$  はゼロになり、穴の表面の誘導電荷の作る電場（ローレンツの局所場） $\mathbf{E}_1 = 4\pi P/3$  が残り、  
 $\mathbf{F} = \mathbf{E}_0 + 4\pi P/3$

となることを見ていこう。

### (1) 球の表面の誘導電荷による電場 $\mathbf{E}_1$

球の表面電荷密度  $\sigma$  は、分極  $P$  に等しい。分極方向と角  $\theta$  の方向の表面電荷密度は  $\sigma_\theta = P \cos \theta$  と表せる。角  $\theta$  の方向で  $d\theta$  の幅の面積要素は、

$$dS = 2\pi(R \sin \theta) R d\theta$$

で与えられる。その面積要素にこの電荷密度  $\sigma_\theta (= P \cos \theta)$  を掛けて表面電荷 ( $Q_\theta = P \cos \theta \cdot 2\pi(R \sin \theta) R d\theta$ ) を求め、球の中心における分極方向成分  $\Delta E_1 (> 0)$  を得る。

$$\Delta E_1 = 2\pi P R^2 \sin \theta \cos^2 \theta d\theta / R^2 = 2\pi P \sin \theta \cos^2 \theta d\theta$$

角  $\theta$  について積分して中心電場  $\mathbf{E}_1$  が得られる：

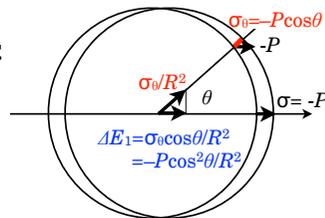
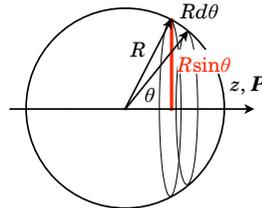
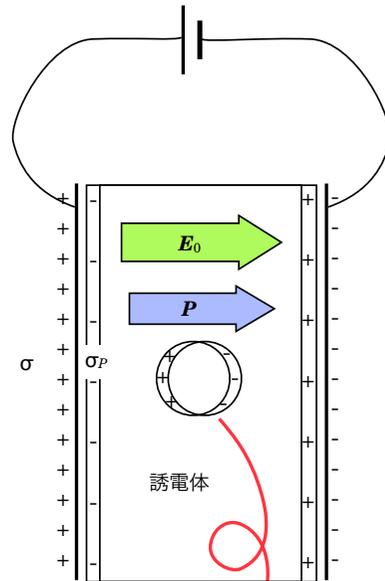
$$E_1 = 2\pi P \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta = -2\pi P \int_0^\pi d(\cos^3 \theta) / 3$$

$$= -2\pi P / 3 \cos^3 \theta \Big|_0^\pi = 4\pi P / 3.$$

### (2) 立方対称的な球内の他の双極子モーメントの作る電場 $\mathbf{E}_2$

球内の双極子モーメントの作る電場を足し合わせて

$$\mathbf{E}_2 = \sum_i \frac{3(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_i) \mathbf{r}_i - r_i^2 \mathbf{m}_i}{r_i^5}$$



を勘定する。もし、全ての双極子モーメントが  $z$ -軸に平行であり（変位分極の場合は常に成り立つ）、格子が等方的（立方対称性を持つ）であれば、 $\mathbf{E}_2 = 0$  である。

求める量は  $z$ -成分： $\mathbf{E}_{2z}$  は

$$E_{2z} = \sum_i \frac{3m_z z_i^2 - m_z r_i^2}{r_i^5} = m_z \left( 3 \sum_i \frac{z_i^2}{r_i^5} - \sum_i \frac{r_i^2}{r_i^5} \right)$$

と変形できる。双極子モーメントの分布が等方的なので、 $x, y, z$  は置き換えが出来る、

$$3 \sum_i \frac{x_i^2}{r_i^5} = 3 \sum_i \frac{y_i^2}{r_i^5} = 3 \sum_i \frac{z_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{r_i^2}{r_i^5}$$

と置けるため、 $\mathbf{E}_2 = 0$  になることが示される。

結局、ローレンツの局所場  $\mathbf{F}$  として、  
 $\mathbf{F} = \mathbf{E}_0 + 4\pi P/3$

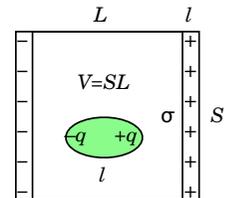
が得られる。

分極  $P$  と面電荷密度  $\sigma$

分極は、単位体積当たりの全双極子モーメント  $\mathbf{m}$  の和なので、体積を  $V$ 、面積を  $S$ 、面電荷密度を  $\sigma$  とすると、

$$\mathbf{P} = N\mathbf{m}/V = Nq\mathbf{l}/V = \rho\mathbf{l} = \sigma, \quad (\rho = Nq/V)$$

となり、面電荷密度  $\sigma$  に等しい。



双極子場

双極子モーメントが作るポテンシャルは

$$\varphi = q \left[ \frac{1}{\sqrt{(x-a)^2 + y^2 + z^2}} - \frac{1}{\sqrt{(x+a)^2 + y^2 + z^2}} \right] = \frac{q}{\sqrt{(x^2 + y^2 + z^2)}} \{ 2ax / (x^2 + y^2 + z^2) \}$$

$$= \frac{2aq}{\sqrt{(x^2 + y^2 + z^2)}} (x/r) = mx/r^3 = m \cos \theta / r^2$$

と得られる。電場は、ポテンシャルの微分として得られる：

$$E_x = -\partial \varphi / \partial x = -m \partial (x/r^3) / \partial x = m(3x^2/r - r^3) / r^6 = m(3(x/r)^2 - 1) / r^3 = m(3 \cos^2 \theta - 1) / r^3$$

$$= \frac{1}{r^3} [3(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r} - r^2 \mathbf{m}]_x$$

と求まる。

## 物質の誘電応答

物質を構成する原子核とその周りの電子、或いは金属中のイオン殻と自由電子等は、外部から加えた電場に応答して変位する。その変位が、物質中に双極子モーメントを生じさせる。それが、誘電率を与えるので、物質の誘電応答を考えよう。

### 誘電応答の種類

#### 1) 電子分極

原子核に対して電子が反対方向に変位して分極する。電子の応答なので早い。

#### 2) イオン分極

NaCl 等のイオン結晶の正負イオンが電場で分極する。重いので遅い。

#### 3) 配向分極

HCl, H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, HBr 等の永久双極子モーメントを持つ分子の配向。遅い。電場に対する双極子モーメントの方向が揃うことによる分極で、磁化と類似の振る舞いをする。高温ではキュリー則に従う。

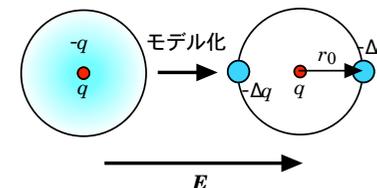
可視光などの光に対する応答は、軽い電子分極が重要になる。以下に、電子分極率の簡単なモデルによる導出、金属の外部電場に対する誘電応答を考えよう。

## 原子の分極率 $\alpha$

原子に外部電場を加えると、電子と原子核とは反対向きに力が働くので、分極が生ずる。その分極率  $\alpha$  は、

$$\mu_e = \alpha E$$

と定義される。ここでは、 $\alpha$  が電子の体積に比例することを簡単なモデルで導出してみる。原子核の周りをまわる電子は、不確定性原理のもとで、運動およびポテンシャルエネルギーの和が細小になるような軌道半径  $r_0$  を持つ。そこで、粗いモデルとして、図の様に電場と平行に、核からの距離  $r_0$  の2つの位置に電子の電荷を  $\Delta q$  づつ置くことにより、電子と核の間のクーロン力（実際には電子密度分布の積分値）を代表させて考える。



まず、電場がないときに電子が核から受けるクーロン力は、

$$F = \Delta q \cdot q \left( \frac{1}{r_0^2} - \frac{1}{r_0^2} \right) = 0, \quad (\text{cgs, } \times 1/4\pi\epsilon_0 \text{ for SI})$$

とつり合っている。ここに電場を加えると、核と電子は互いに反対方向に力を受け、重なっていた正負の電荷の重心が  $\Delta r$  だけずれる。従って、核の位置を基準に考えると、電子の受けるクーロン力は、

$$\begin{aligned} F &= \Delta q \cdot q \left( \frac{1}{(r_0 + \Delta r)^2} - \frac{1}{(r_0 - \Delta r)^2} \right) \approx \frac{\Delta q \cdot q}{r_0^2} \left( \frac{1}{(1 + \Delta r/r_0)^2} - \frac{1}{(1 - \Delta r/r_0)^2} \right) \\ &= \frac{\Delta q \cdot q}{r_0^2} (1 - 2\Delta r/r_0 - (1 + 2\Delta r/r_0)) = -\frac{4\Delta q \cdot q}{r_0^3} \Delta r \end{aligned}$$

となる。電場がかかっている状態では、電子と核の間のクーロン力と、外部電場がそれぞれに及ぼす力  $(-qE, qE)$  とがつり合っているので、

$$\frac{4\Delta q \cdot q}{r_0^3} \Delta r = qE$$

より、 $\Delta r = \frac{r_0^3}{4\Delta q} E$  が得られる。これより、分極  $\mu$  は、

$$\mu = q\Delta r = \frac{r_0^3 q}{4\Delta q} E = \alpha E, \quad \therefore \alpha \propto r_0^3 = V$$

と書け、分極率は体積に比例することが分かる。

別のもう少し妥当なモデル

電子の軌道半径は、静電ポテンシャルと運動エネルギーのバランスから決定される。

$$E = U + T = -\frac{q^2}{r} + \frac{P^2}{2m}, \quad (\text{cgs})$$

この時に、量子力学の要請、不確定性関係を満たす必要がある： $P \cdot r \approx \hbar$ 。電子は安定軌道を回っているので、全エネルギー  $E$  は  $r=r_0$  で停留点をとる：

$$E = -\frac{q^2}{r} + \frac{P^2}{2m} = -\frac{q^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}, \quad \therefore \frac{\partial E}{\partial r} \Big|_{r_0} = \frac{q^2}{r_0^2} - \frac{\hbar^2}{mr_0^3} = 0,$$

$$\therefore r_0 = \frac{\hbar^2}{mq^2} \quad (=a_H, \text{ 水素のボーア半径}).$$

従って、 $r = r_0 + x(\theta) = r_0 + x \cos\theta$  なので、角  $\theta$  の電子は  $x$  方向の力  $F_x(\theta)$  として

$$\begin{aligned} F_x(\theta) &= -\frac{\partial E(\theta)}{\partial x} = -\frac{\partial E(\theta)}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} = -q^2 \left( \frac{1}{(r_0 + x \cos\theta)^2} - \frac{r_0}{(r_0 + x \cos\theta)^3} \right) \cos\theta \\ &= -\frac{q^2}{r_0^2} \left( \left(1 + \frac{x \cos\theta}{r_0}\right)^{-2} - \left(1 + \frac{x \cos\theta}{r_0}\right)^{-3} \right) \cos\theta = -\frac{q^2}{r_0^2} \left( 1 - \frac{2x \cos\theta}{r_0} - \left(1 - \frac{3x \cos\theta}{r_0}\right) \right) \cos\theta \\ &= -\frac{q^2 \cos^2 \theta}{r_0^3} x \end{aligned}$$

を受ける。ここで、角について積分し、表面積で規格化して電子全体に働く力、

$$\langle F_x \rangle = -2 \frac{q^2 x}{r_0^3} \frac{2\pi r_0^2}{4\pi r_0^2} \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = -\frac{q^2 x}{r_0^3} \left[ -\frac{\cos^3 \theta}{3} \right]_0^{\pi/2} = -\frac{q^2}{3r_0^3} x$$

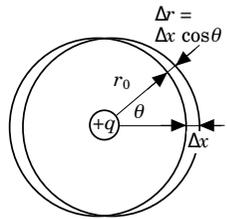
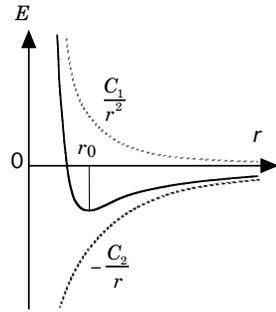
を得る。この力が電場による外力と釣り合い平衡になり、

$$\frac{q^2}{3r_0^3} x = qE, \quad \therefore x \approx \frac{3r_0^3}{q} E, \quad \therefore \mu_e \approx qx = 3r_0^3 E = \alpha E$$

と原子の分極  $\mu_e$  が得られ、分極率  $\alpha$  は

$$\alpha = 3r_0^3 = \frac{9}{4\pi} r_0^3 \approx V$$

と、ほぼ電子軌道の体積に等しいことが導かれる。



自由電子ガスの交流電場に対する応答

自由電子ガスモデルでは、原子のプラスイオンは金属内に一様に分布していると仮定し、系全体を中性に保ち、電子を金属内に閉じ込めるポテンシャルの役目をする。また、イオンの質量は電子より3桁以上重いため、外部電場のイオンへの影響は無視して考える。

外部から自由電子ガスに電場  $E$  を加えると、各電子には  $-eE$  の力が働き、運動を始める。これを、外部電場の「励起（刺激）」に対する自由電子ガスの「応答」という。上図の例では、波長  $\lambda$  (波数  $k=2\pi/\lambda$ ) の電場、 $E(k,t) = E_0 e^{-i(\omega t - kx)}$  (この波の速度  $v$  は、波の位相の一点、例えば位相ゼロの時間依存性から、 $\omega t - kx = 0$ ,  $v = x/t = \omega/k$  となる) を加えたときの電子ガスの応答を示している。この時、電子の運動方程式は、

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -eE \quad (1)$$

で与えられる。ここで、 $x$  は電子の位置、 $E$  は外部電場である。

ここで、応答  $x$  も  $e^{-i\omega t}$  の時間依存性を持つと仮定して

(1) 式に  $x(t) = x_0 e^{-i\omega t}$  を代入すると、

$$-m\omega^2 x = -eE$$

が得られる。即ち、電子の変位  $x$  は、 $x(t) = \frac{e}{m\omega^2} E(t)$  となる。

1つの電子の電気双極子モーメントは、 $-ex = -\frac{e^2 E}{m\omega^2}$  で

与えられるので、自由電子の単位体積あたりの交流分極 (単位面積あたりに電場により誘起された電荷量) は

$$P(\omega) = -nex = -\frac{ne^2}{m\omega^2} E(\omega)$$

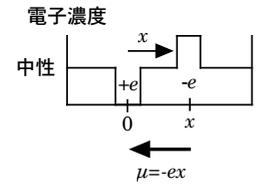
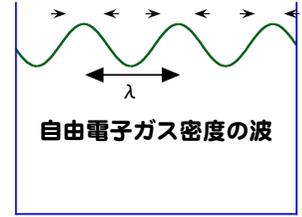
で与えられる。誘電率の表式 (cgs単位表示。長さをcm、質量をg、時間をsで表現する単位系、SI単位系は、m、Kg、s、Aで表現)

$$\varepsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{E(\omega)} = 1 + 4\pi \frac{P(\omega)}{E(\omega)} \quad (\text{cgs})$$

$$\left[ \varepsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{E(\omega)} = \varepsilon_0 + \frac{P(\omega)}{E(\omega)}, \quad (\text{SI}) \right]$$

に代入して、自由電子ガスの誘電率が求まる：

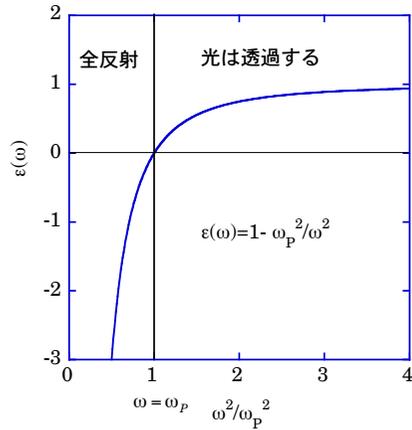
$$\varepsilon(\omega) = 1 - 4\pi \frac{ne^2}{m\omega^2} \quad (\text{cgs}) \quad \left[ \bar{\varepsilon}(\omega) = 1 - \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m \omega^2}, \quad (\text{SI}) \right] \quad (\bar{\varepsilon} \text{ は比誘電率})$$



自由電子のプラズマ周波数

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}, \text{ (cgs)} \quad \left[ \omega_p^2 = \frac{n e^2}{\epsilon_0 m}, \text{ (SI)} \right]$$

を使うと、 $\epsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2 / \omega^2$  (SIでは比誘電率)と表わすことが出来る。右図に示すように、金属の誘電率は、プラズマ周波数よりも低周波の光に対しては負の値を取り波動解は存在できず指数関数的に減衰するため、金属中には電場が生じない(常に、電束密度  $D = 0$ ) ことに対応している。アルカリ金属では、プラズマ周波数は紫外線領域に来るので、紫外線より短い波長の光に対しては透明になる。



電子が  $x$  だけ変位している時は、 $\sigma = P = -nex$  の表面電荷が現れるので、平行平板コンデンサと同じ、 $|E| = 4\pi\sigma = 4\pi nex$

( $|E| = \sigma / \epsilon = nex / \epsilon$ , SI) の電場が生じ、電子の運動方程式(1)は、

電子の変位  $x$

$$E = 4\pi nex \quad \downarrow \quad \uparrow \quad \frac{F}{m} = -\frac{eE}{m} = -\frac{4\pi n e^2}{m} x$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{F}{m} = -\frac{4\pi n e^2}{m} x = -\omega_p^2 x$$

となるので、自由電子は、プラズマ周波数で縦波の発振をすることになる。結局、プラズマ角振動数とは、密度  $n$  の電子ガスの固有振動数であることが分かる。また、固有振動数は、単位変位、単位質量あたりの復元力(今の場合、電子間のクーロン反発力)に相当していることは振子やバネの固有振動を考えると理解できることである。

固有振動数よりも早い運動は起こりえないことは、次のような例を考えれば理解しやすい。ある瞬間に外部電場が加わり、電子分布に偏りが出来、その結果として外部電場は完全に遮蔽される。そこで、急に外部電場をゼロにすることを考えよう。元の位置に戻るには、最も早くても固有振動で戻らざるを得ない。従って、プラズマ角振動数よりも高い振動数の外部電場をかけても自由電子ガスは応答しきれず、遅れが出ると予想される。

この遅れが、電子の運動による外部電場の遮蔽を不完全にしている。すなわち、金属内に有限の電場が存在でき、透過できることになる。

物質中における光の分散関係

電磁波の運動方程式は、

$$\frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 \mathbf{E} \text{ (cgs)}, \quad \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = \nabla^2 \mathbf{E} \text{ (SI)}$$

なので、電場  $\mathbf{E} = E_0 \exp(-i\omega t) \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$  と  $\mathbf{D} = \epsilon(\omega, \mathbf{K}) \mathbf{E}$  の解を求めるために上式に代入すると、分散関係

$$\epsilon(\omega, \mathbf{K}) \omega^2 = c^2 \mathbf{K}^2$$

が得られる。ここに  $\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) - \omega_p^2 / \omega^2 = \epsilon(\infty)(1 - \bar{\omega}_p^2 / \omega^2)$  ( $\epsilon_\infty$  はイオン殻の誘電率、

$$\bar{\omega}_p^2 = \omega_p^2 / \epsilon(\infty)) \text{ を代入すると、}$$

$$\epsilon(\infty)(\omega^2 - \bar{\omega}_p^2) = c^2 \mathbf{K}^2$$

となる。 $\omega^2$  で整理すると、

$$\omega = \sqrt{\bar{\omega}_p^2 + c^2 \mathbf{K}^2 / \epsilon(\infty)}$$

が得られる。

$\omega < \omega_p$  で  $\mathbf{K}^2$  は負で、波数  $K$  は純虚数になる。 $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) = \exp(-Kr \cos \theta)$  は進行波として物質中に存在できず、物質中では指数関数的に減衰する。

