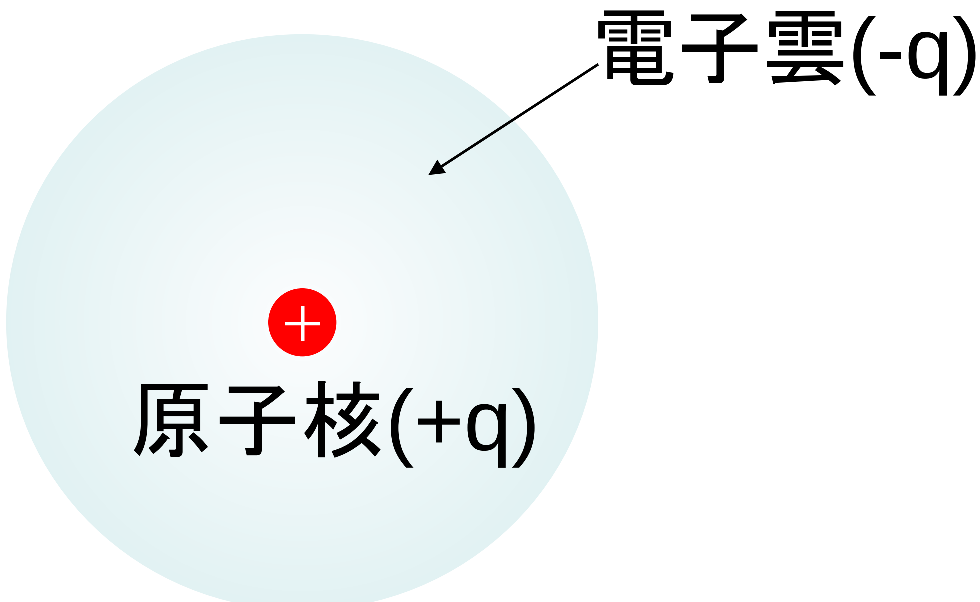
光物性基礎とデバイス応用

分極と誘電率

- 分極の発生
- 比誘電率の周波数応答

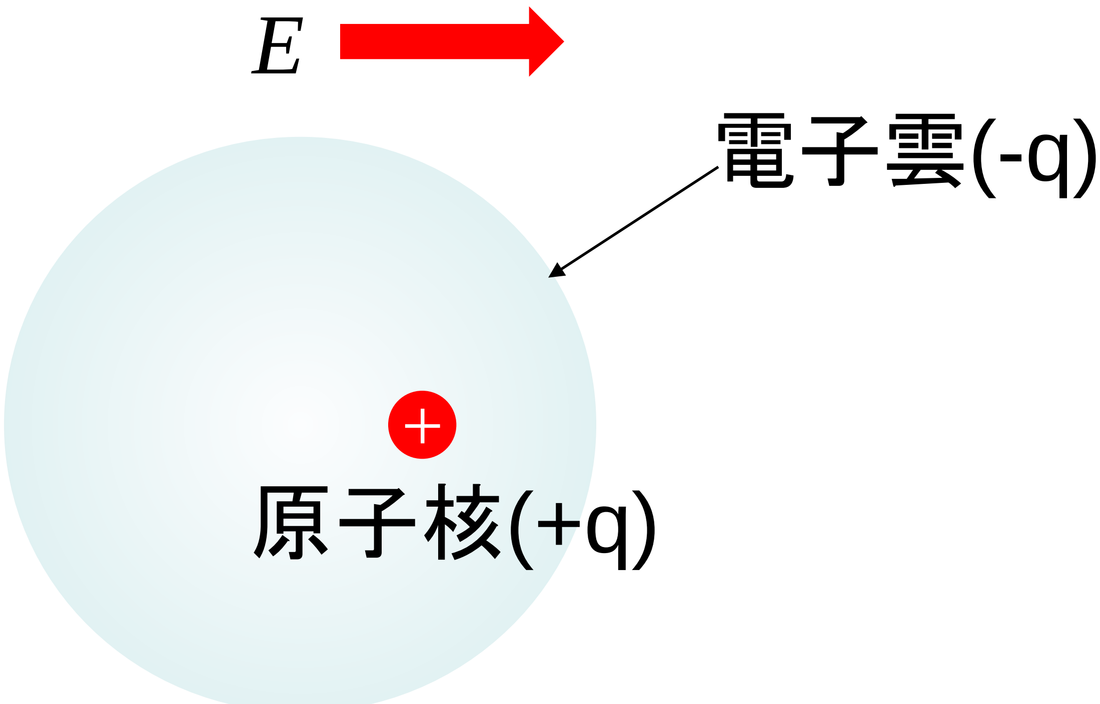
電界による分極の発生

外部から印加される電界 : $E=0$



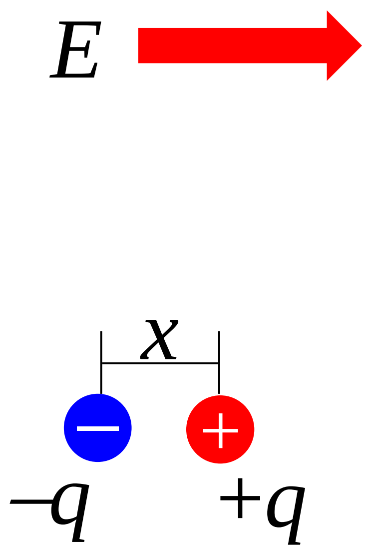
電界による分極の発生

外部から印加される電界 : $E \neq 0$



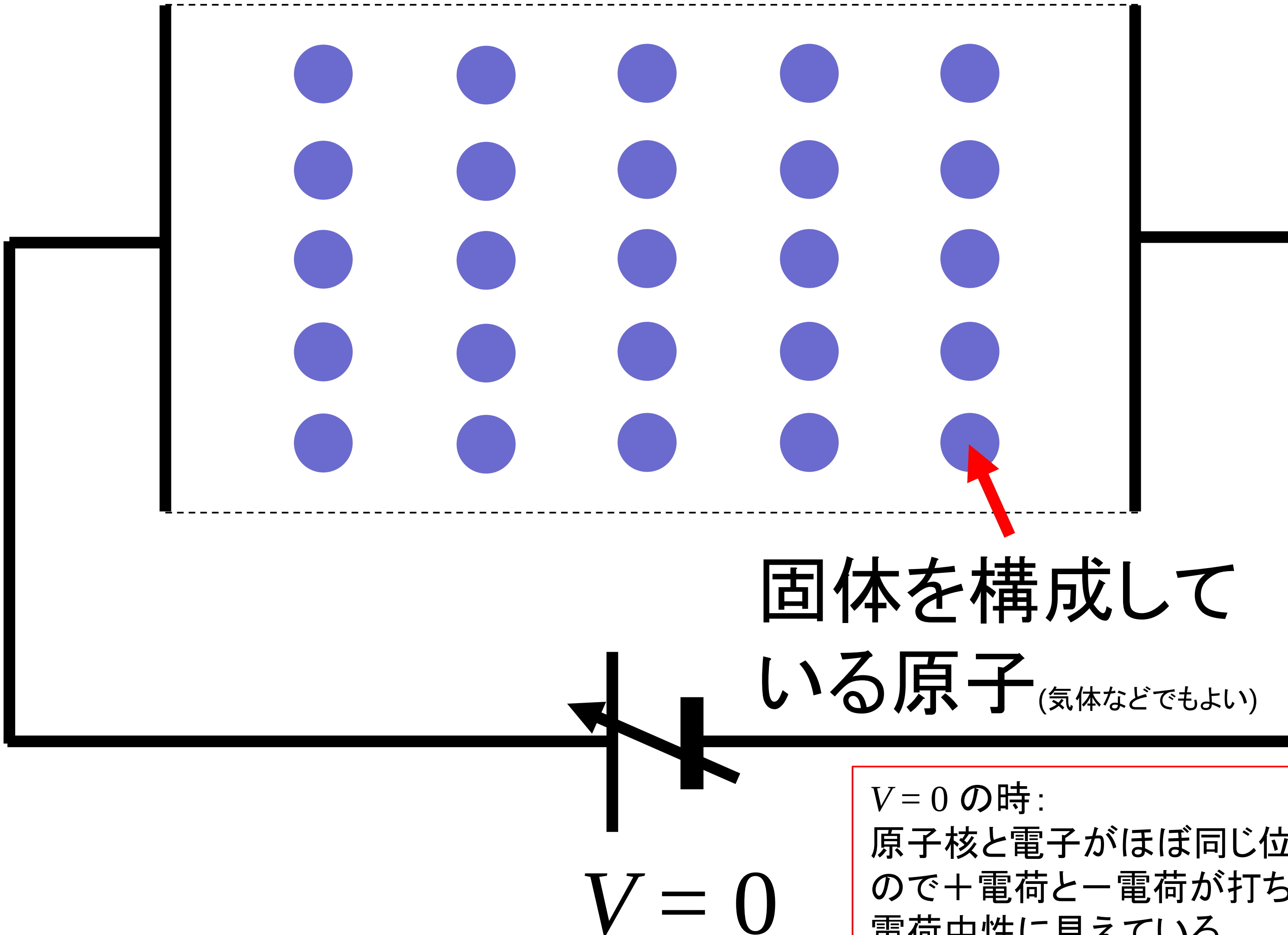
電界による分極の発生

外部から印加される電界 : $E \neq 0$



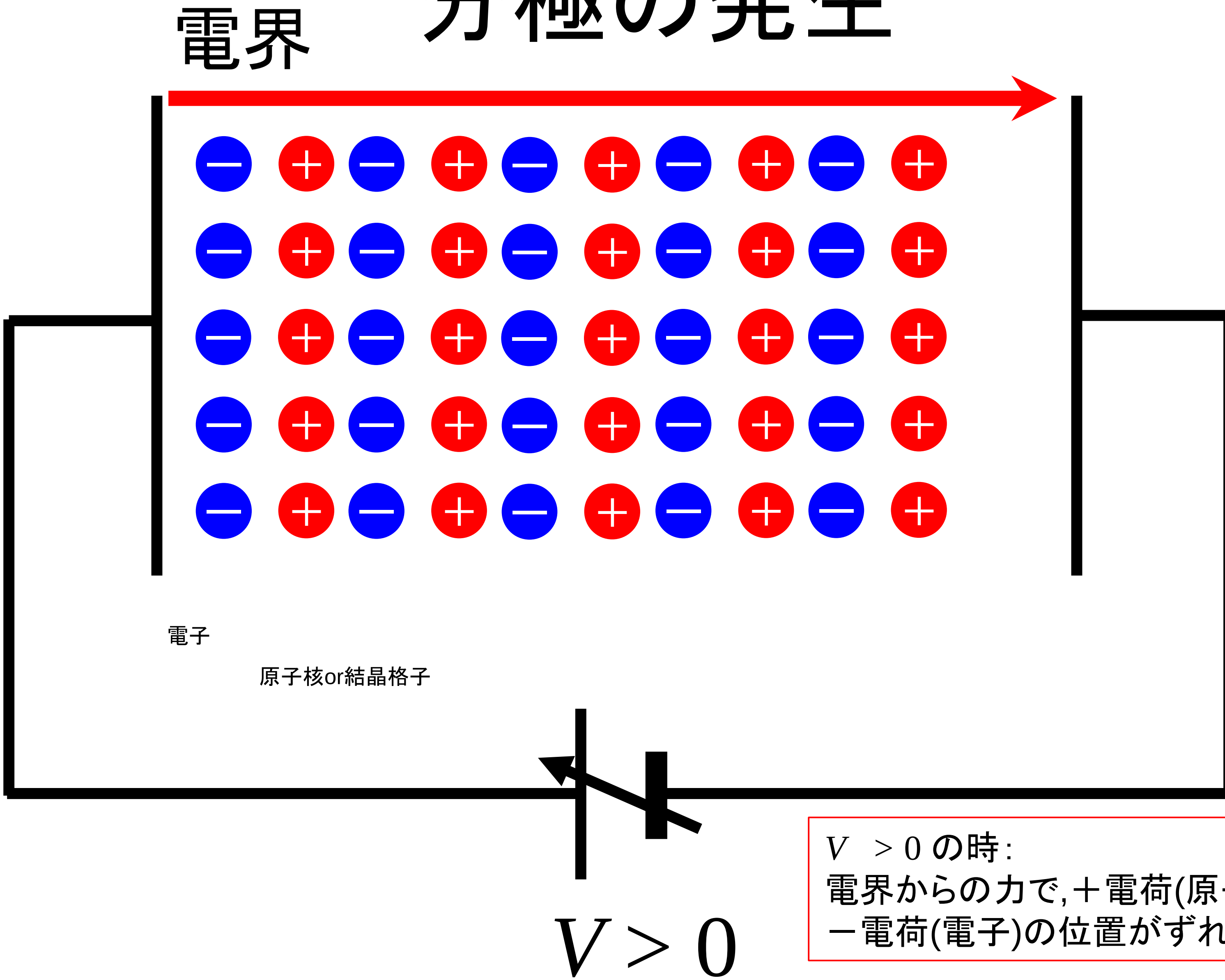
分極の発生 : $+q, -q$ の点電荷, 偏位 x

分極の発生



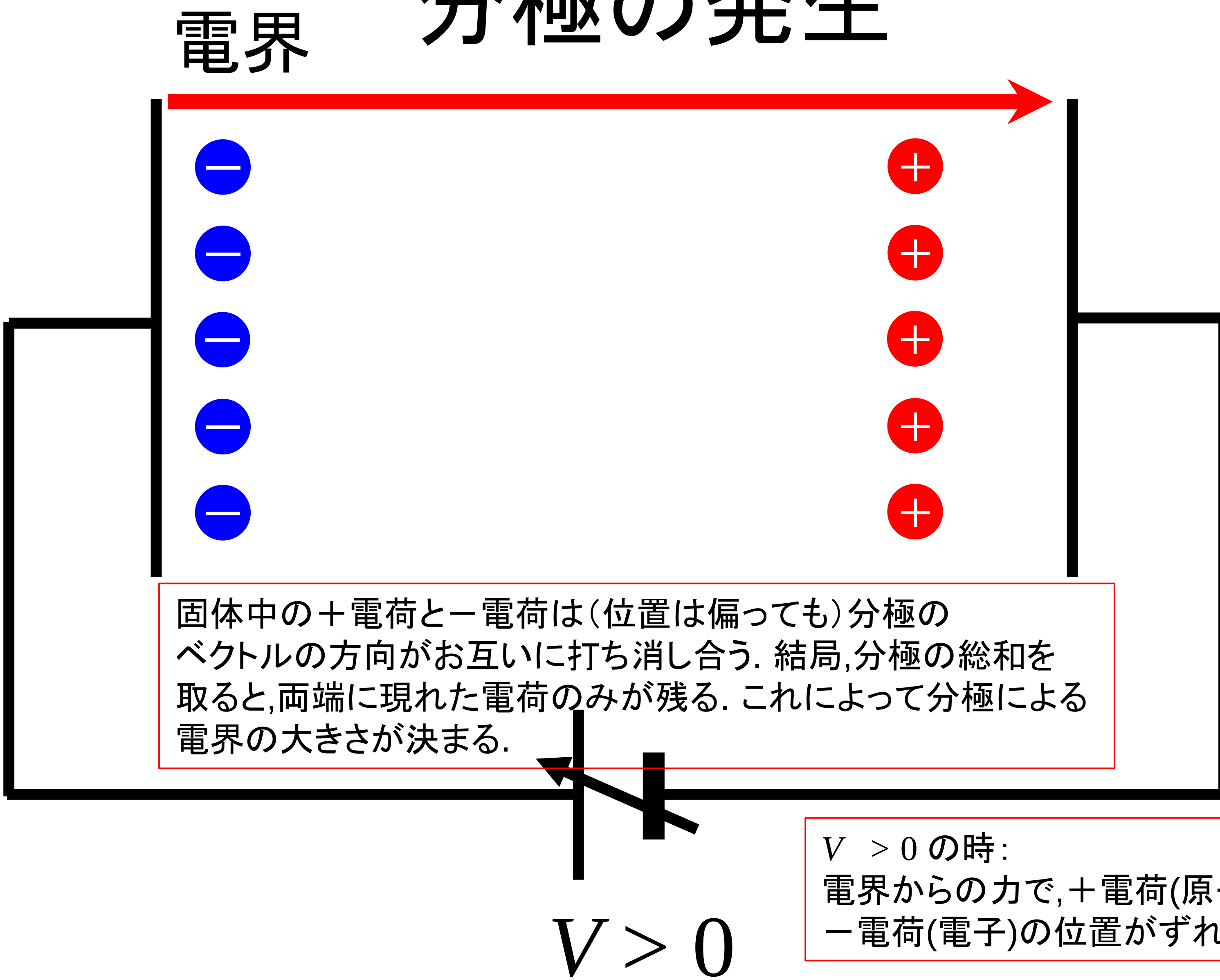
$V = 0$ の時:
原子核と電子がほぼ同じ位置にあるので＋電荷と－電荷が打ち消しあって電荷中性に見えている

分極の発生



$V > 0$ の時:
電界からの力で,＋電荷(原子核イオン)と
－電荷(電子)の位置がずれる.

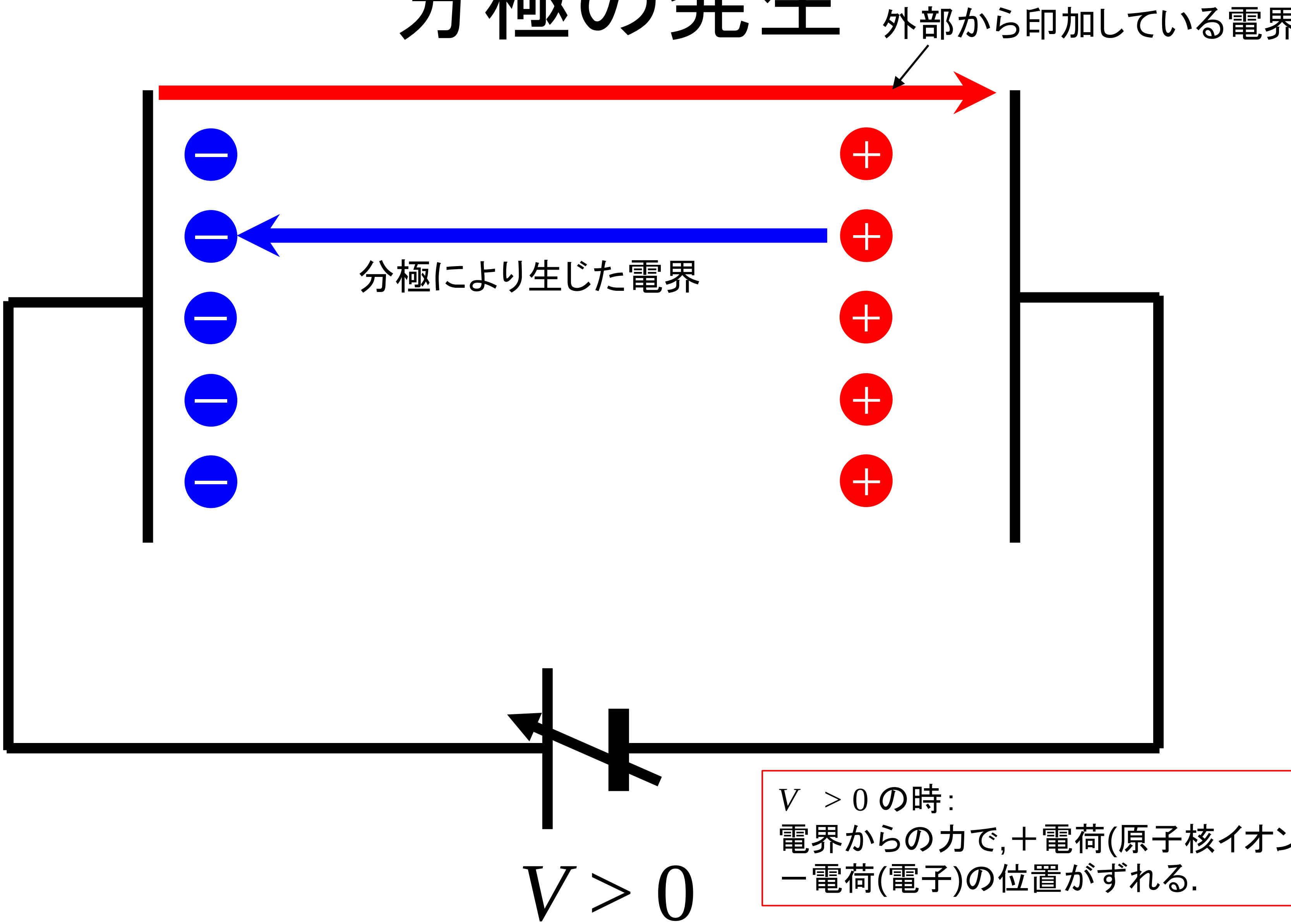
分極の発生



固体中の＋電荷と－電荷は（位置は偏っても）分極のベクトルの方向がお互いに打ち消し合う. 結局,分極の総和を取ると,両端に現れた電荷のみが残る. これによって分極による電界の大きさが決まる.

$V > 0$ の時:
電界からの力で,＋電荷(原子核イオン)と－電荷(電子)の位置がずれる.

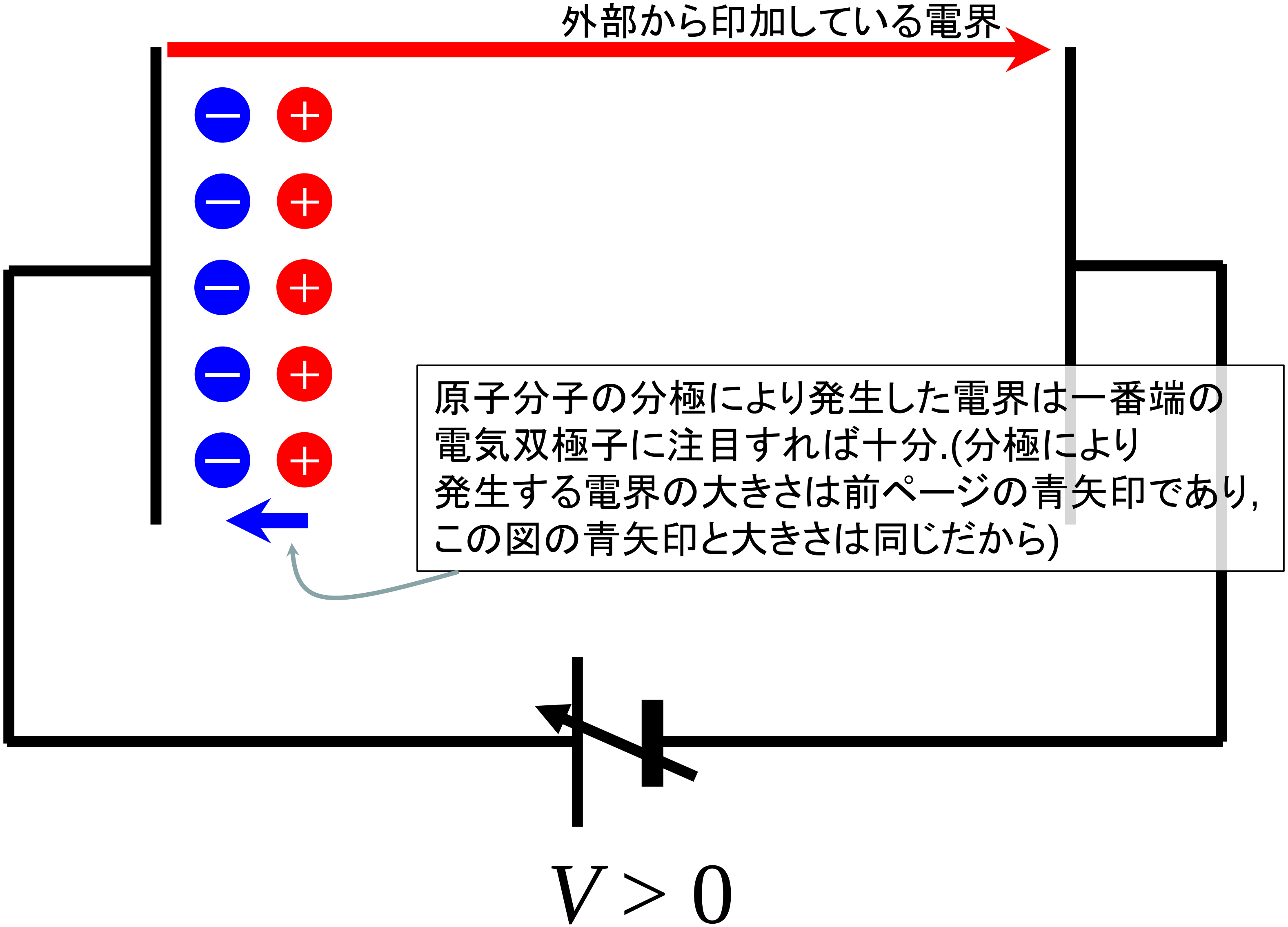
分極の発生



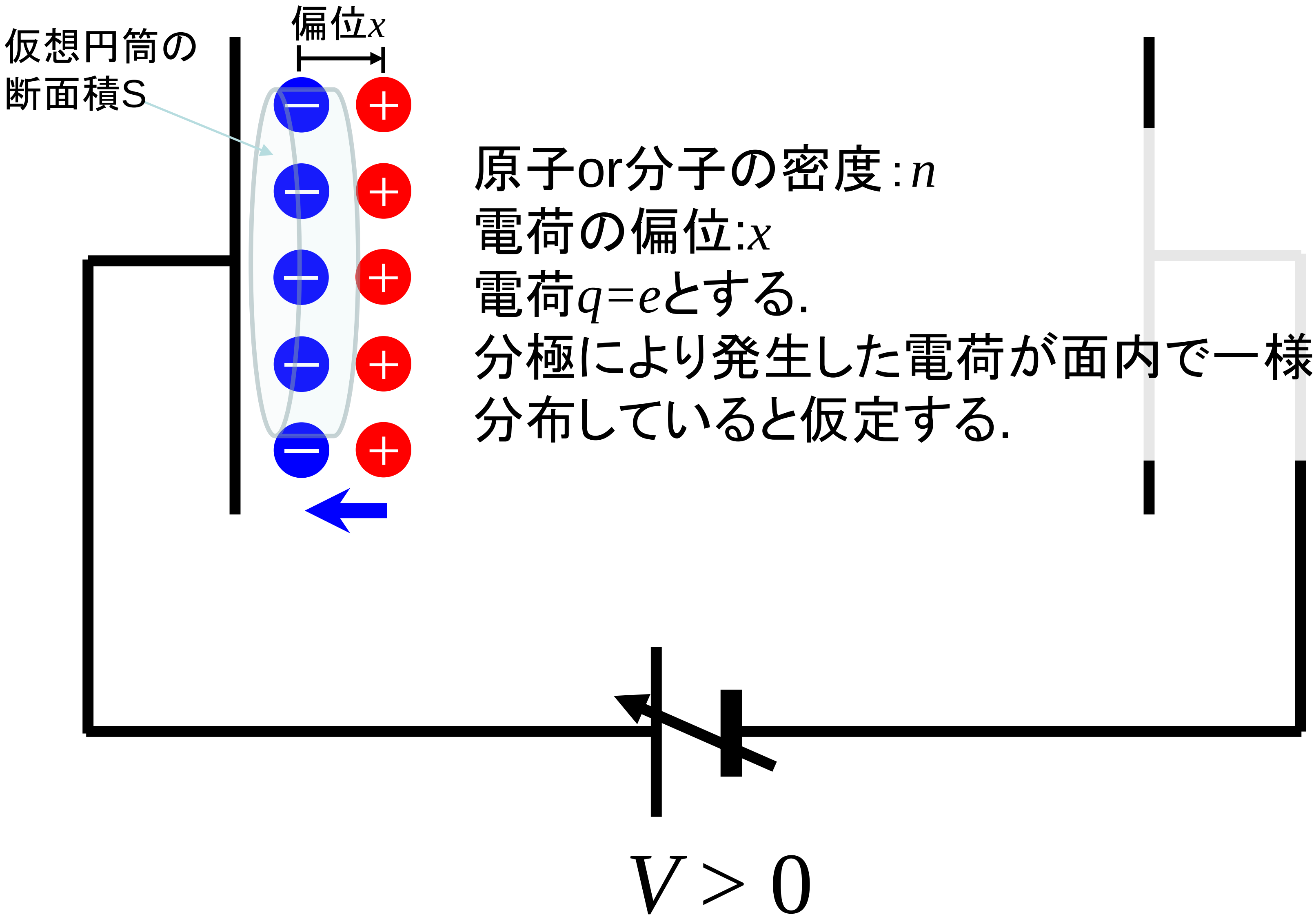
$V > 0$ の時：
電界からの力で，＋電荷(原子核イオン)と
－電荷(電子)の位置がずれる．

固体内の電界は，外部から印加している電界と分極により生じた電界のベクトル和

分極の発生

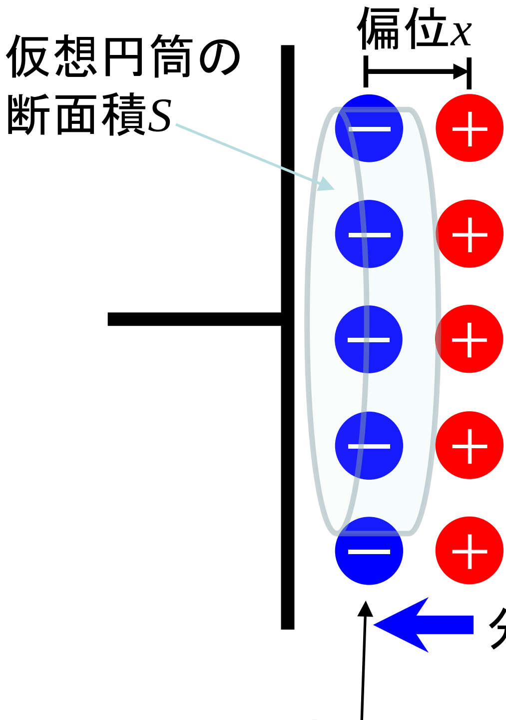

外部から印加している電界
原子分子の分極により発生した電界は一番端の
電気双極子に注目すれば十分.(分極により
発生する電界の大きさは前ページの青矢印であり,
この図の青矢印と大きさは同じだから)
$V > 0$

分極の発生



原子or分子の密度 : n
電荷の偏位:x
電荷$q=e$とする.
分極により発生した電荷が面内で一様に
分布していると仮定する.

分極の発生



原子or分子の密度 : n
電荷の偏位:x
電荷$q=e$とする.
分極により発生した電荷が面内で一様に
分布していると仮定する.

分極により発生した電界$E_{分極}$. 電束密度は $\varepsilon_0 E_{分極}$.

その面電荷密度をσとおく. また,分極に関与する原子分子の密度をnとすると,分極による電荷密度 $\rho = en$.
仮想的な円筒の体積xS内にある原子orイオン等が分極に関与するから,この体積内の総電荷が面電荷として現れるので

$\sigma S = en\, xS \Leftrightarrow \sigma = enx$

分極による電界を$E_{分極}$,電束密度を$D_{分極}$とすると,ガウスの法則から
$D_{分極}=\varepsilon_0 E_{分極}=\sigma = enx \;\Rightarrow\;$ この$D_{分極}$を,あらためて分極Pと定義する.

ガウスの法則と分極の定義

真空中：　$div\ \varepsilon_0 \boldsymbol{E} = \rho$

分極が発生すると, 分極による電荷が現れる

$$div\ \varepsilon_0 \boldsymbol{E} = \rho - \underline{\rho_{分極}}$$

前のページのenに相当

しかし,分極は無かったことにしたい,
真空のままで考えたい.そこで

$$div\ \boldsymbol{P} \equiv \rho_{分極}$$

となるようなベクトル$\boldsymbol{P}$を新たに定義する.すると,

ガウスの法則と分極の定義

$$div\ \varepsilon_0 \boldsymbol{E} = \rho - \boxed{\rho_{分極}}$$

$$\Leftrightarrow \quad div\ \varepsilon_0 \boldsymbol{E} + \boxed{\rho_{分極}} = \rho$$

$$\Leftrightarrow \quad div\ \varepsilon_0 \boldsymbol{E} + \boxed{div \boldsymbol{P}} = \rho$$

$$\Leftrightarrow \quad div\ (\underline{\varepsilon_0 \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P}}) = \rho$$

固体中の電束密度$\boldsymbol{D}$

$\boldsymbol{D} \equiv \varepsilon_r \varepsilon_0 \boldsymbol{E}$ と定義する.これによって,分極により生じた電荷は考えずに,真空の誘電率がε_0から$\varepsilon_r\varepsilon_0$に置換したものとみなすことができる.

分極の定義

分極により生じる固体中の電束密度を$\boldsymbol{P}$と定義すると,固体中の電束密度$\boldsymbol{D}$は,次のように表される.

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon_0 \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P}$$

分極が原因で電束密度$\boldsymbol{D}$が変化したが, 分極は忘れて,誘電率の置き換えのみでこの変化を表そうとすると,次のようになる.

$$\boldsymbol{D} \equiv \varepsilon_r \varepsilon_0 \boldsymbol{E}$$

分極$\boldsymbol{P}$は電界$\boldsymbol{E}$によって発生するから,$\boldsymbol{P}$は$\boldsymbol{E}$の関数である.これが比例関係にあるとみなせる場合には,次のように表すことができる.

分極の定義

$$\boldsymbol{P} = \varepsilon_0 \chi \boldsymbol{E}$$

（一般には電界Eの1次式とは限らず、2次,3次の項が必要になる場合もある.材料の種類や電界Eの大きさに依存する）

χ:電気感受率

上のように書ける場合に限り,

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon_0 \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P} = \varepsilon_0 \boldsymbol{E} + \varepsilon_0 \chi \boldsymbol{E}$$

$$= \varepsilon_0 \underbrace{(1+\chi)}_{} \boldsymbol{E}$$

比誘電率：ε_r

$$\boxed{\varepsilon_r = 1 + \chi}$$

（複素数化もこの関係式を基に考える.
複素比誘電率⇔複素電気感受率）

分極の表現

分極により発生する電荷密度 $\rho_{分極} = en$ (→リンク)

また,分極$\boldsymbol{P}$とρの関係　$div\,\boldsymbol{P} \equiv \rho_{分極}$ (→リンク)

より,　$div\,\boldsymbol{P} = en$

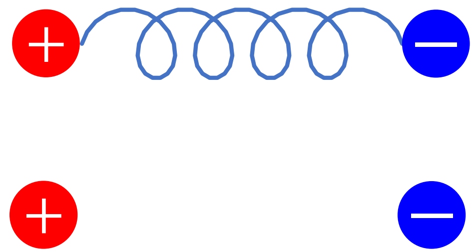
1次元で考えると,$div=d/dx$,かつ$\boldsymbol{P}$はx成分のみ考えてそれをあらためてPとおくと,

$$\frac{dP}{dx} = en \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{P = enx}$$

(ただし,x=0のときP=0とした.)

以上より,分極Pは電荷の偏位xに比例する.
偏位xを電界Eの関数として表す.→力学モデルを解く
(たとえばバネのモデルなど.)

ローレンツの振動子(バネ)モデル



ニュートンの運動方程式

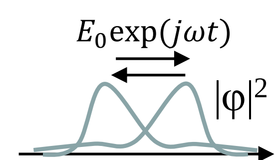
$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\underline{\beta} x - \underline{m\gamma\frac{dx}{dt}} + q\underline{E_0\exp(j\omega t)}$$

バネ定数

速度に比例
した摩擦力

外部からの振動電界(光,電磁波)

たとえば, 原子核に束縛された電子の場合であれば, $m = m_0$, $q = -e$. β,γは元素,結晶構造等に依存し,正確な値を計算することは困難な量.



2準位間の遷移をモデル化したものではなく、一つの準位に存在する電子(またはイオン等)が振動電界によって$|\varphi|^2$の重心位置が偏位する状況をモデル化したもの．また,自由電子の吸収のモデルはβが無いモデルだった.

ローレンツの振動子(バネ)モデル

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + m\gamma\frac{dx}{dt} + \beta x = qE_0\exp(j\omega t)$$

振動電界: $E = E_0\exp(j\omega t)$

偏位を $x = x_0\exp(j\omega t)$ とおいて方程式に代入すると

$$x = \frac{q/m}{\omega_0^2 - \omega^2 + j\gamma\omega}\underbrace{E_0\exp(j\omega t)}_{E}$$

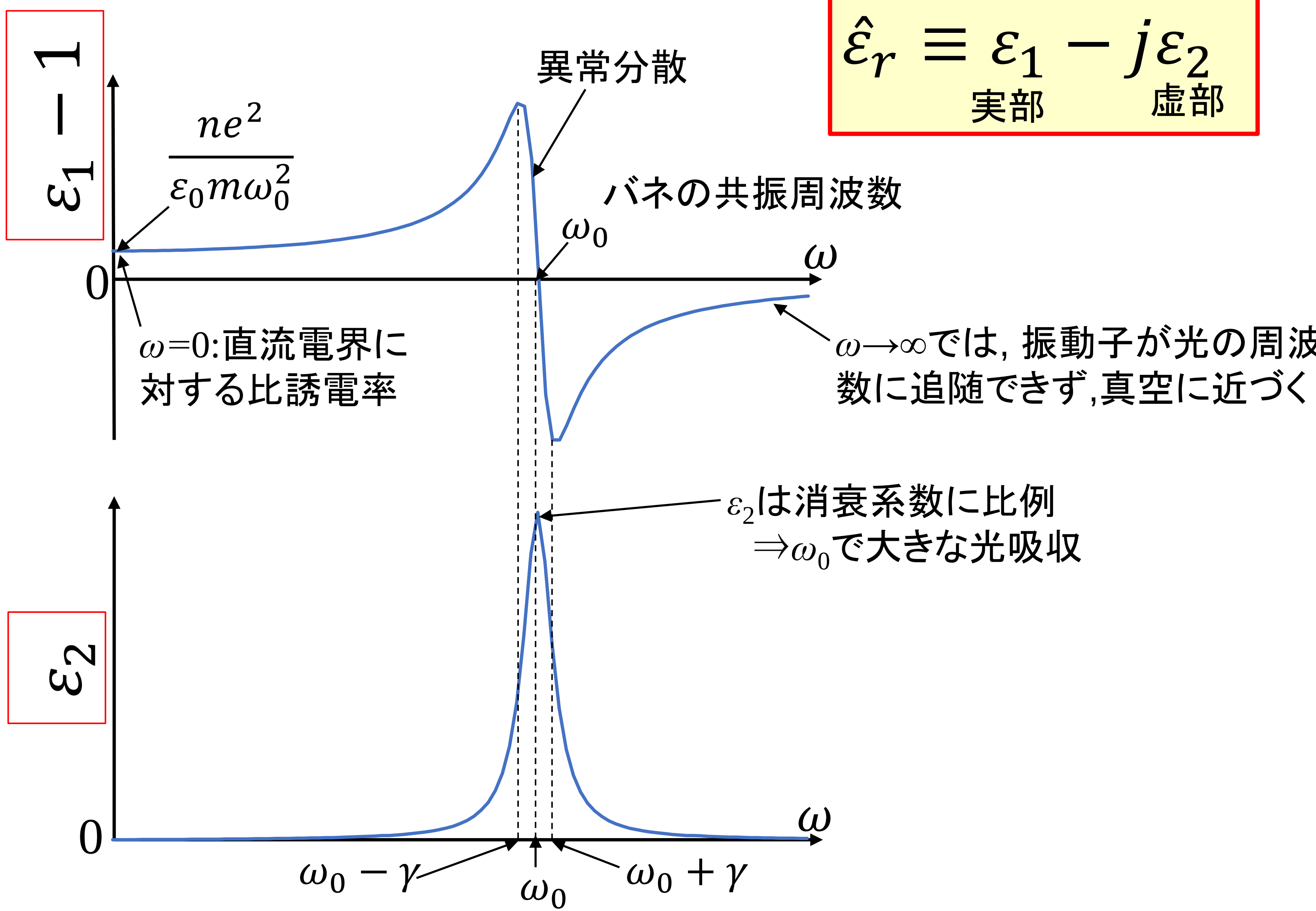
ただし, $\omega_0 \equiv \sqrt{\frac{\beta}{m}}$

複素数であることから, xは振動電界と位相差があることがわかる.

この関係式とP,xの関係, P,χの関係を介して
比誘電率ε_r ,さらに屈折率の複素表示が導かれる

比誘電率の角周波数応答

$$\hat{\varepsilon}_r \equiv \underbrace{\varepsilon_1}_{\text{実部}} - j\underbrace{\varepsilon_2}_{\text{虚部}}$$

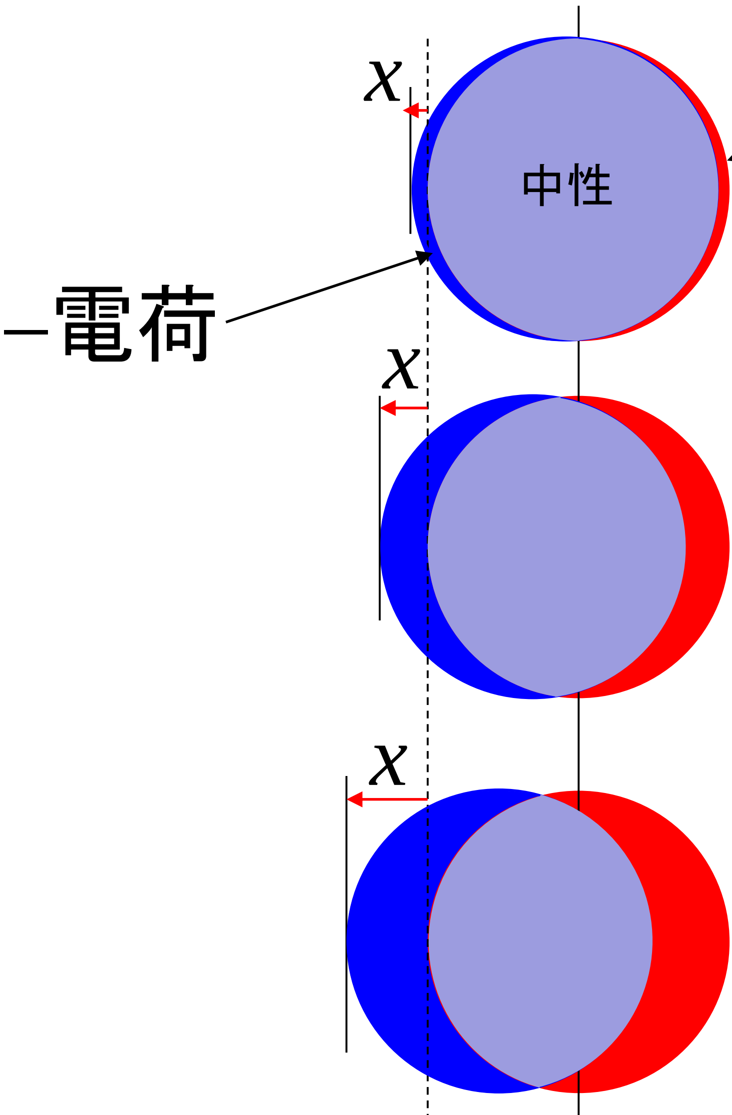


まとめ

- 電子と光（電磁波）との相互作用
- 分極の定義
- 分極による電荷,電束密度,
  比誘電率,電気感受率
- ローレンツの振動子モデル
- 誘電率の周波数応答

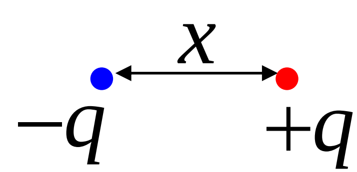
分極の発生のイメージ

電子の位置が少し「ずれる」と
端の「はみ出た」部分に電荷が現れる



+電荷

電荷の偏位量xが微小であるとき:
現れる電荷量 $\propto x$



電子分極を電気双極子モーメントexで表す.
双極子モーメントの数を乗ずれば分極になる