

Dielectric Dispersion in Solids

黒 沢 達 美 (中央大学 理工学部)

表題はいささか漠然としているが、話しは大体 Sum rule を中心にしたことで、Sum rule の導出と、その応用というか、いくつかの現象をとり上げてそれを Sum rule の立場から見るといようなものとからなっている。内容は別に新しいものではない。

話しはまず電場に対する応答関数の導入から始まり、誘電率や伝導度がフーリエ変換で与えられる。最初は Spatial Dispersion も含んだ一般的な式だが、直ぐにいわゆる局所近似をもちこんでそれを落して了う。次に粒子系にパルス電場が加えられた場合のふるまいを古典力学的に扱って、応答関数の $t \rightarrow +0$ での性質を求める。それから直ちに Sum rule が出て来る。すなわち

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \sigma_r(\omega) d\omega = \sum_\mu \frac{N_\mu e_\mu^2}{M_\mu} \quad (1)$$

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \left[\frac{\sigma(\omega)}{\epsilon(\omega)} \right]_r d\omega = \sum_\mu \frac{N_\mu e_\mu^2}{M_\mu} \quad (2)$$

$$\frac{1}{2\pi^2} \int_{+0}^\infty \{ \epsilon_r(\omega) - 1 \} d\omega = -\sigma_r(0) \quad (3)$$

ここで N_μ , e_μ , M_μ は系の中の μ 種の粒子の密度、電荷、質量であり、添字 r は実数部分を意味する。最後の式で積分が $+0$ から始まっているのは、 $\sigma_r(0) \neq 0$ すなわち伝導体の場合には系が無定位になり、 $\omega=0$ の所で誘電率に δ 関数型の特異性が出るためそれを避けたものである。Spatial dispersion や磁場の効果が無視できない時には、これらの式は成立たなくなる。例えば超伝導体の場合磁場の効果は大きい。

Sum rule の応用としては、まずイオン分極の 誘電分散をとり上げた。この場合には、(1), (2) 式の e_μ に対応するものとして適当な有効電荷を考える必要があり、またそうすれば誘電分散の形式論は (damping や anharmonicity

Dielectric Dispersion in Solids

を別にすれば) 一応片附くが、それをどのように定義するべきかを話した。そしてこれと、通常引用される Szigetti らによつて導入された有効電荷との関係についても説明したが、この辺りは日本語でも仲々話しにくい所で、分りよく話せたとは思えない。実際この点について講演後質問を受けたが、Bursteinが代つて答えてくれた。

次は配向分極についての簡単な注意で、Debye 型の分散の場合には、そのままでは、 $t \rightarrow 0$ での応答関数の形が悪いため Sun rule とは矛盾する結果が出てくる。 t の小さい所での応答関数の形は普通の分散周波数よりも高い周波数での分散の形を支配し、逆にこの辺の分散を調べれば前者の性質が或る程度分る場合もある場合もあるはずで、そうすれば固体内での双極子の回転などについて今迄よりもミクロスコピックな知見が得られる可能性もあるというように話をしたが、少し漠然とし過ぎていたように思う。

電子分極の場合については、まず通常の f-sum rule との関係について触れ、次に(1)および(2)式をグラフアイトの価電子について具体的に検証した Taft と Philipp の実験を紹介した。

最後に、固体の話しから外れるが、原子核でのいわゆる Giant resonance に Sum rule の立場から触れた。すなわち原子番号 Z , 質量数 A の原子核をまとめて考えた時と、陽子と中性子とにバラして考えた時とでは(1)式の右辺に対する寄与が $(Ze^2/M_0)(1 - Z/A)$, (M_0 は核子の質量) , だけに違つて来るが、その差は原子核の内部運動の励起に伴う r 線の吸収となつて現われる。実際には上の差の殆んど大部分が Giant resonance と呼ばれる強い吸収のピークによつて占められている。