表面状態による表面波

九大教養　中 山 正 敏

表面近傍に局在した電磁波モード（表面ポラリトン）に対する表面量子状態の影響をしらべる。表面に沿って動く自由担体の存在により，表面波の存在ならびに分散が大きく影響されることは，すでに２次元模型により論じられている［例えば，M. Nakayama ; J. Phys. Soc. Japan, **36**（1974）393］．ここでは表面束縛電子の効果を論ずる。系の構成，配置，記号等は別掲報告［午前の部］と同じである。表面波の分散は反射係数の極で与えられる。

Ⅰ．S偏光

長波長近似における分散式は，

$$\alpha_0 + \alpha = \frac{4\pi\omega^2}{C^2}\chi_{yy}^{(2D)} \qquad (1)$$

であたえられる。ここに，

$$\alpha = \sqrt{k^2 - \varepsilon\omega^2/C^2}$$

$$\alpha_0 = \sqrt{k^2 - \varepsilon_0\,\omega^2/C^2}$$

$$\chi_{\alpha\beta}^{(2D)} = i\,\sigma_{\alpha\beta}^{(2D)}/\omega$$

である。表面状態を無視すれば(1)の右辺＝０となり，解は存在しない。しかし，表面状態を考慮すれば，２次元分極率 $\chi_{yy}^{(2D)} > 0$ の領域には表面波が存在しうる。分散の概念図をを図１に示した。

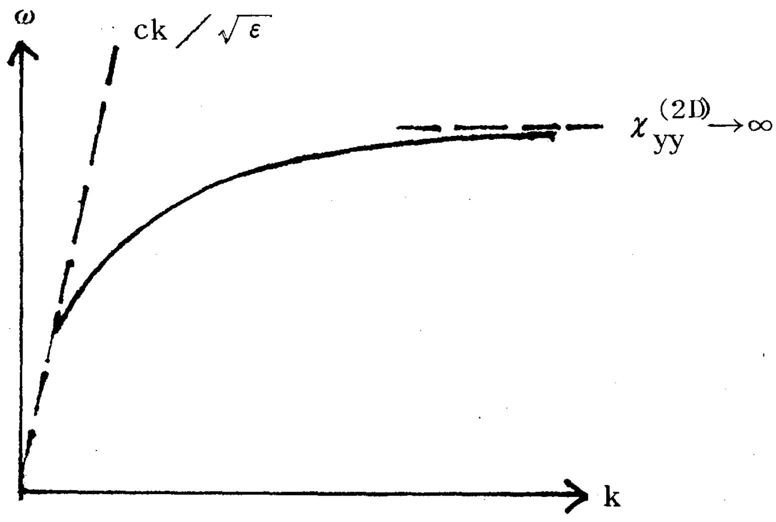

図１　S偏光表面波分散

Ⅱ. P偏光

この場合，長波長近似においても2次元模型は使えず，分散式は，

$$\frac{\varepsilon}{\alpha}\cdot\frac{1-\lambda_p}{1+\lambda_p}=-\frac{\varepsilon_0}{\alpha_0} \qquad (2)$$

となる。λ_p は表面状態の占める領域内における自己無撞着場を解いて定められる。特に表面状態が表面に平行な鏡映面を持つと仮定すると，

$$\lambda_p=-\left[\frac{2\pi\alpha\chi_{xx}^{(2D)}}{\varepsilon+2\pi\alpha\chi_{xx}^{(2D)}}+\frac{2\pi k^2\chi_{zz}^{(2D)}}{\varepsilon\alpha-2\pi k^2\chi_{zz}^{(2D)}}\right] \qquad (3)$$

となる。(3)式を(2)式に代入して求めた分散の概念図を図2に示す。この図は，z－偏光の吸収帯がx偏光吸収帯の下にあり，両者とも $\chi_{zz}^{(2D)}=0$ の周波数よりも下にある場合である。ε，ε_0 は正で分散がないとしているので，表面状態なしでは表面波はない。

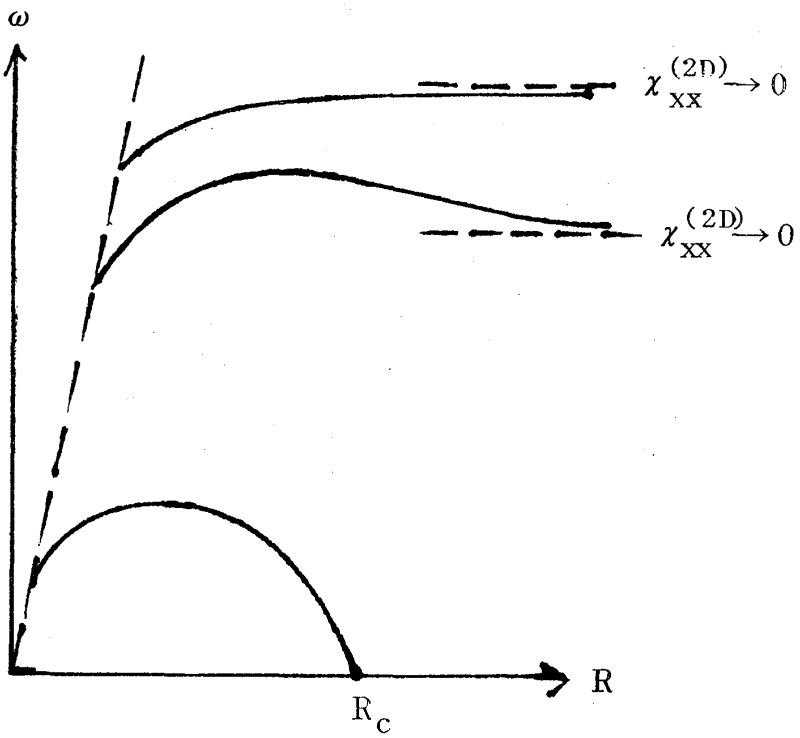

図2. P偏光表面波分散

分散の著しい特徴は有限の波数 k_cでω=0となることである。すなわち分極波がソフト化し，自発分極波発生の不安定性が生ずる。

$\omega\to 0$ ではα，$\alpha_0\to k$ であるから，(2)式は

$$\frac{4\pi^2\chi_{xx}^{(2D)}\chi_{zz}^{(2D)}}{\varepsilon^2}k^2-\frac{4\pi}{\varepsilon(\varepsilon+\varepsilon_0)}\left[\varepsilon\chi_{xx}^{(2D)}-\varepsilon_0\chi_{zz}^{(2D)}\right]k-1=0$$

となり，$\chi_{xx}^{(2D)}\chi_{zz}^{(2D)}>0$ だからk＞0 の根がある。自由担体があれば $\chi_{xx}^{(2D)}\to$

$-\infty$だが，この場合もk_c $\left[\varepsilon^2/\varepsilon\pi\chi_{zz}^{(2D)}\right]$が解となる。一般に

$$k_c > \varepsilon/2\pi\chi_{zz}^{(2D)}$$

である。$\chi_{zz}^{(2D)} \sim b$（表面状態のz方向の広がり）だから，bの程度よりも短かい波長の分極波発生が考えられる。これは，表面長周期構造の引金になるかもしれない。

付記　研究会発表後数人の人と論じているうちに考えたことを付加しておく。

z方向のみに分極できる原子が正方格子点上にあるとする。反強誘電的に±pに分極したとすると1原子あたりのエネルギーは

$$E = \frac{p^2}{2\chi} - C\frac{p^2}{d^3}$$

となる。χは原子分極率，dは格子定数。$d^3 < 2C\chi$なら$E<0$である。$\chi/d^2 = \chi^{(2D)}$（単位面積あたりの分極率）であるから，この条件は

$$d < 2C\chi^{(2D)}$$

である。$\chi \fallingdotseq a^2b$（aは面内の波動関数の広がり）であるから，$d \ll b$の時にのみこの条件は充たされうる。（したがって3次元ではこのようなことは起らない。1次元では？）。

12月3日　午前　　　　座長　中 山 正 敏

小野氏の報告については，これらの方法の応用について活発な討論がなされた。離散的な表面系という点からは，格子力学のみならず，LCAO模型，Spin系も容易に扱かうことができる。各種表面状態（Tamm準位，Shockley準位，dangling bond等）の分別も出来る。また，この方法は不規則構造があっても，有限の範囲におさまっていれば，正確に扱かうことができる。例えば，格子が表面に近付くにつれて徐々に乱される様子を研究するのは，かっこうの演習問題であろう。もちろん，吸着等表面に沿って