

- 4) Edwards J. T. and Thouless D. C., J. Phys. C. Solid State Phys. 5, 807 (1972).
- 5) Hoshino K. and Watabe M., Solid State Commun. to be published.
- 6) Tsui D. C. and Allen S. J., Phys. Rev. Lett. 34, 1293 (1975).

MOSにおけるWigner-2D格子の安定性と鏡像 ポテンシャルによるスクリーニングの影響^{*})

東大教養 生井沢 寛

MOS 反転層に集まった電子系が、2次元Wigner 格子を形成したとして、格子の静的安定性、動的安定性及び、電子格子の格子振動の分散関係に対する、鏡像電荷のもたらすスクリーニングの影響を調べる。

今、電子は、簡単のため量子力学的な拡がり反転層に垂直な方向には無視して、 $z = 0$ 面に分布しているとする。この時、単一電子の作る電場は、絶縁体の厚さを D 、半導体と絶縁体の誘電率を夫々 ϵ_1, ϵ_2 とすると、金属中に並んだ、 $z_\nu = -2\nu D$ に位置すると、荷電 $Q_\nu = -\frac{\epsilon_2}{\epsilon} e \left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right)^{\nu-1}$ ($\bar{\epsilon} = \frac{1}{2}(\epsilon_1 + \epsilon_2)$) また $\nu = 1, 2, \dots, \infty$) の鏡像電荷の列で作られる場に等しい。2電子間の相互作用は、これら鏡像電荷列からもたらされる作用も入れれば、 $\vec{\rho}_l, \vec{\rho}_{l'}$ を夫々電子の $z = 0$ 面内の位置ベクトルとすると、

$$W(\vec{\rho}_l - \vec{\rho}_{l'}) = \frac{e^2}{\bar{\epsilon}} \left[\frac{1}{\rho_{ll'}} + \sum_{\nu=1}^{\infty} Q_\nu \frac{1}{\sqrt{\rho_{ll'}^2 + z_\nu^2}} \right], \quad \rho_{ll'} = |\vec{\rho}_l - \vec{\rho}_{l'}| \quad (1)$$

簡単の為、正電荷バックグラウンドは一様に $z = 0$ 面内に分布するとすれば、全系の相互作用は、(1) の W を使って、

$$V = V_{ee} + V_{eI} + V_{II} \quad (2)$$

$$V_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{l, l'} W(\vec{\rho}_l - \vec{\rho}_{l'}) \quad (2a)$$

$$V_{eI} = -n \sum_l \int d^2 \vec{\rho} W(\vec{\rho}_l - \vec{\rho}) \quad (2b)$$

$$V_{II} = \frac{1}{2} n^2 \int d^2 \rho \int d^2 \rho' W(\vec{\rho} - \vec{\rho}') \quad (2c)$$

ここに n は電子数面密度。

電子密度が充分小さい時は調和近似が使える。この時、静的エネルギーは

$$\langle V \rangle / N = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}_e} W(\vec{R}_e) - \frac{1}{2} n \int d^2 \rho W(\vec{\rho}), \quad N: \text{全電子数} \quad (3)$$

これを正方格子と三角格子について計算した所、 $D \rightarrow \infty$, $\bar{\epsilon} = 1$ の極限 (クーロン格子の極限) で、前者については $(-2.20/r_s^*) \text{ ry}$, 後者については $(-2.21/r_s^*) \text{ ry}$ を得、また有限の D に対しても、後者の静的エネルギーの方が低い事が判った^{**)} (r_s^* は電子平均距離をボーア半径で割ったもの)。

調和近似で電子格子の分散を調べる事は簡単である。まず、格子振動に対する安定性について述べると、三角格子は安定だが、正方格子は、 $[10]$ 方向の周りの波動ベクトルについて、横波の振動数が虚数となる。¹⁾ これは、正方格子が、この方向に対応す

*) G. Meissner 及び M. Voss (Universität des Saarlandes) と共著。具体的計算は Si-SiO₂-Metal でやった。

***) 予備的結果だが、honey-comb 格子の静的エネルギーは正方格子より高く、またこの格子は動的にも安定でなさそうである。

(1) この結果は、R. S. Crandall, Phys. Rev. A8, 2136 ('73) と合わない。Crandall の計算違いである。

(2) クーロン格子について、三角格子の分散は P. M. Platzman & H. Fukuyama, Phys. Rev. B10, 3150 ('74) が調べた。残念な事に、彼等は、三角格子の逆格子空間を正しく取っていないので、我々の結果との比較が出来ない。

(3) 中山正敏, 福山秀敏, 本研究会報告

るずれの応力に対して不安定である事を示す。

次に、電子間相互作用中の、鏡像電荷の項が、分散に及ぼす効果を調べよう。すぐに (1) から判る通り、 $D \rightarrow \infty$ では $W \rightarrow 1/\rho_{ll'}$ となってクーロン格子に移るが、 $D < \infty$ なら、遠距離 $\rho_{ll'} \gg D$ で、 $W \sim D^2/\rho_{ll'}^3$ となって、相互作用は 2 重極型になる。これは、鏡像電荷の列がクーロン項をスクリーンして消し去る為である。この事から、有限な厚さの絶縁体をはさんだ MOS 系では、小さな波数の格子振動の分散が、クーロン格子の分散と異ったものとなろう。実際、(1) と (2) を調和近似で調べると、縦波の分散がスクリーニングの効果を強く受けて、

$$\omega_L(k) \rightarrow \sqrt{D} k, \quad k D \ll 1$$

となり、 k について線型となる。 k の余り小さくない範囲では、

$$\omega_L(k) \rightarrow k^{1/2}, \quad D^{-1} \ll k \ll a^{-1}$$

となって、2次元プラズモンの分散を示す。

我々は、三角格子について²⁾ 前述により、正方格子は不安定—、種々の (D/a) に対する分散関係を数値的に求めた。この際 Ewald の方法が有効である。特にブリルアンゾーンの中心付近の分散関係をよく調べると、小さな D から、 $D \rightarrow \infty$ の極限に移るにつれ、縦波の分散が k から $k^{1/2}$ に移る様子がはっきりする。横波の D/a 依存は余り大きくないが、(これは小さい k に対して $\propto k$)、 $D \rightarrow \infty$ で $[10]$ 方向の分散にあらわれた異常²⁾ — A 線沿いの中程で ω_T が少し上向きの曲りを持つ — は、 D/a を小さくすると、小さくなって行く。

上に求めた電子格子の振動数を用いて、零点エネルギーを計算する事が出来る。クーロン格子の極限で、これは $(4.27/r_s^{*3/2})$ ry となり D をへらすと $(1/r_s^{3/2})$ の係数はへる。

最後に、中山氏の報告³⁾ に依ると、適当な境界条件を付したマックスウェル方程式を解く事により、MOS の場合の電子格子の振動を取扱う事がたやすくやれそうである。格子の型も、境界条件として入れて、ここで報告した結果が、たやすく再現される事を、出来るだけ早い機会に望んでいる。