

慮する。さらに、functional integral 法の遂行には、最もかんたんな Edward の mean field theory を用いる。三次元の場合に、Si については Penn の模型を用い、近似計算を行った。最終の結果に生ずる未定のパラメータは、非晶質構造の tail state の状態密度を定める exponential tail のエネルギー巾に対応する量である。実験的には多くのカルコゲンガラス（理想的ガラスと考えられている）および非晶質石英についてこの量は、0.05 eV ~ 0.07 eV と評価されている。この値を用いると、direct gap 中の界面準位密度は、 $10^{11} \sim 10^{10} / \text{cm}^2$  となった。これにより観測されている界面準位の或る部分は、上述の機構で生ずる intrinsic なものと推論される。

## ヘリウム原子線散乱による 表面格子振動の研究

北海道大学触媒研究所 浅田 洋  
戸谷 富之

固体の表面格子振動に関する知見は、実験方法が少なく、また難かしいために、バルクに関する知見と比べると非常に乏しい。我々は銀の表面からの He 原子線の散乱の実験を行い、銀の表面格子振動に関連したいくつかの知見を得た。

実験：図 1 に実験装置の概念図を示す。原子線の空間的半値幅は、検出器の回転角で、 $3^\circ$  である。実験はノズルの温度が  $300^\circ\text{K}$  と  $150^\circ\text{K}$  の二通りで行った。それぞれの場合における入射原子線のエネルギーは 65 meV, 32 meV, 波数  $K$  は  $11.1 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $7.9 \text{ \AA}^{-1}$  である。検出器は円形のスリットをもった溜めこみ型のもので、得られる原子線強度は線束に比例する。検出器のスリットが試料表面の中心に対してなす角は  $2^\circ/2'$  である。試料の銀表面は雲母の劈開面に真空蒸着したものをを用いた。蒸着時の雲母の温度は  $570^\circ\text{K}$ , 真空度は  $1 \sim 3 \times 10^{-7}$  torr である。（この条件では表面に垂直に  $[111]$  軸が配向するとされているが本実験では未確認）蒸着後、同温度で入射面内で散乱角分布を測定した。

結果と検討：図 2 は入射角  $\theta_1$  が  $70^\circ$  の時の He 原子線の散乱角分布である。角度

# MOLECULAR BEAM APPARATUS

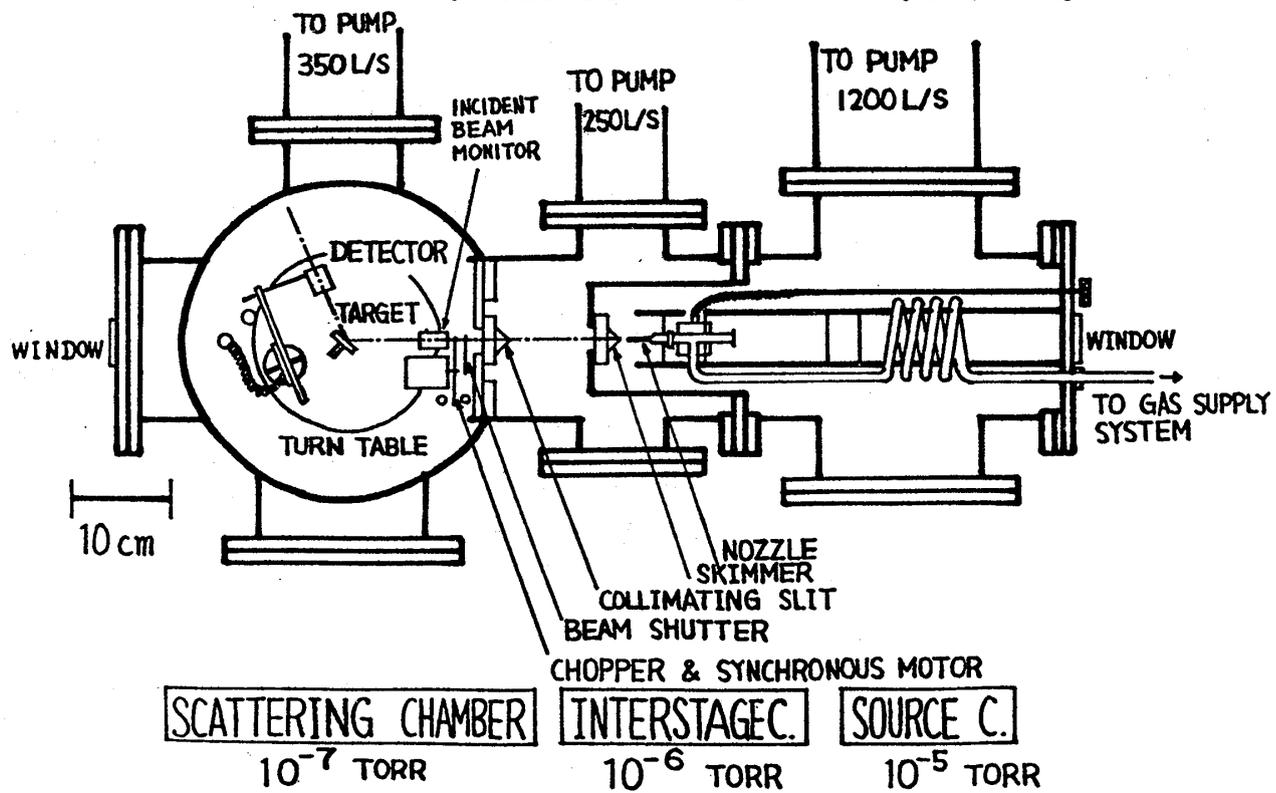


図 1.

は表面の法線から測る。強度は direct beam の強度を 1 とする。得られた角分布は、鏡面反射ピークとその裾部にフォノンによる非弾性散乱の部分とをもつ。波数が小さくなると、非弾性散乱の部分が低散乱角の方へ移動するのがわかる。また鏡面反射ピークが大きくなるのは、デバイ・ワラー因子による効果である。図 2 の分布は Saltsburg ら<sup>1)</sup> 及び Subbarao ら<sup>2)</sup> のものと定性的な傾向において一致する。Sau ら<sup>3)</sup> は単結晶を用いて (111) 面からの He 原子線の散乱角分布を得ている。それと比較すると、鏡面反射角における強度は彼らの値の数分の 1 位である。このちがいは主として表面の構造的な原因によると考えられる。即ち、表面の凹凸が原子線を散漫散乱させたり、鏡面反射ピーク

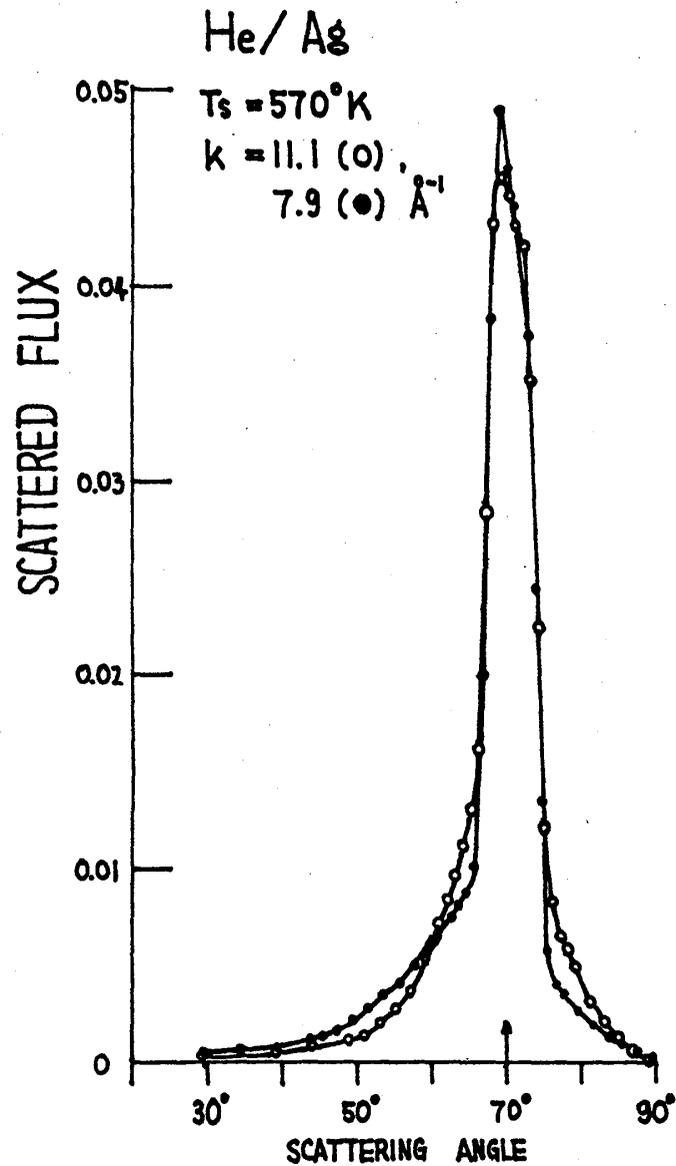


図 2.

を幅広にしたりするために、ピークの高さが減じると考えられる。

二つの異なる試料表面について、鏡面反射角における強度を入射角に対してプロットしたのが図 3 である。鏡面反射強度の入射角に対する依存性は、デバイ・ワラー因子、

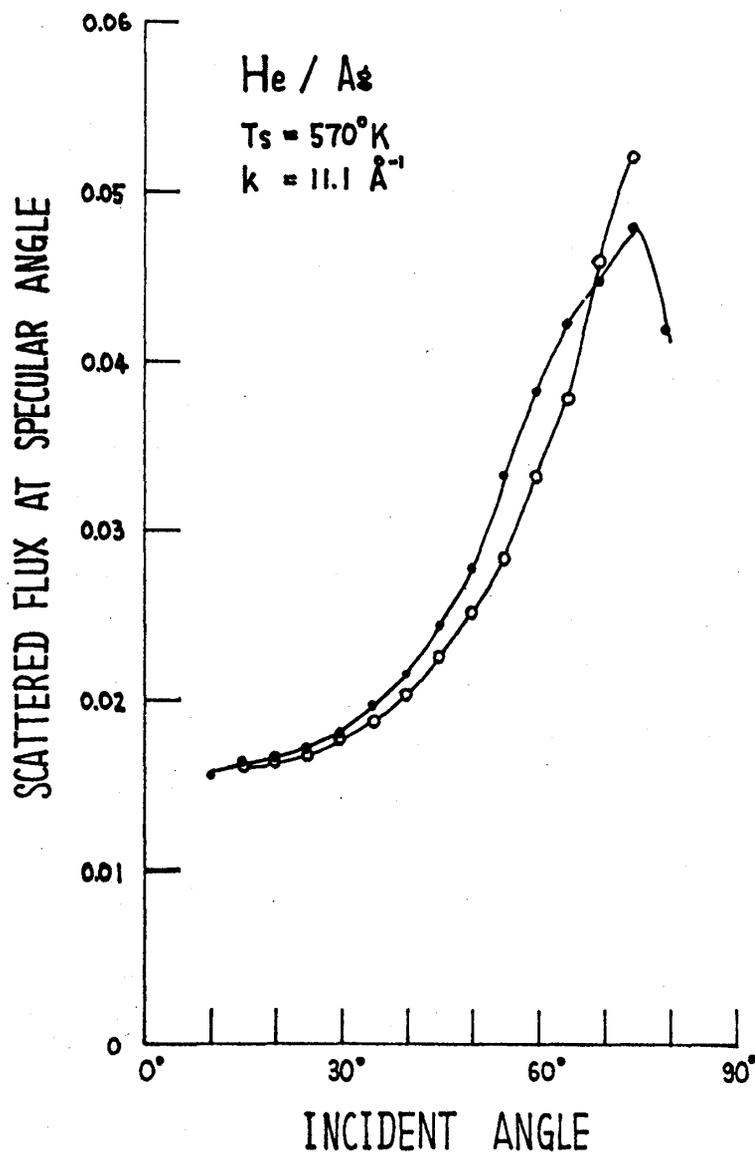


図 3

$\exp(-4K^2 \cos^2 \theta_i \cdot \bar{u}^2)$ , で与えられる。ここで  $\bar{u}^2$  は表面銀原子の表面に垂直な振動の振幅の自乗平均である。図3の鏡面反射角における強度は非弾性散乱の部分も含んでいるため、正しい振幅の値を出すことはできないが、 $0.1 \text{ \AA}$  の程度であることは結論できる。この値はバルク内の原子の振幅、 $0.12 \text{ \AA}$  と同程度の妥当な値である。一般に表面原子の表面に垂直な振動の振幅は、バルク内の原子の振幅よりも大きい。換言すると、表面のデバイ温度はバルクのそれよりも低い。Ag(111)面の表面に垂直な格

子振動に関するデバイ温度は、低速電子回折 (LEED) の方法で、バルクの値、 $226^\circ$  よりも小さい、 $155^\circ$  の値が報告されている<sup>4)</sup>。

He 原子線散乱の方法は、LEED とちがって、入射粒子線がバルク内へ貫入しないため、表面第一原子層のみに関する情報が得られる。従って表面近傍の格子力学 研究する上で、He 原子線散乱は LEED と共に有効な方法であると考えられる。

### 参 考 文 献

- (1) H. Saltsburg et al., Rarefied Gas Dynamics, 5th Symp., 223 (1966).
- (2) R. B. Sabbrarao et al., J. Chem. Phys., 51, 4679 (1969).
- (3) R. Sau et al., Surface Sci., 34, 268 (1973).
- (4) E. R. Jones et al., Phys. Rev., 151, 476 (1966).

## 表 面 の 格 子 振 動

京大理・物理 松 原 武 生

LEED その他の実験で金属表面の原子の振動は内部原子の振動と相当ちがっていることが知られている。例えば有効 Debye 温度に換算して、表面原子の Debye 温度は内部原子の値の約 2 倍にもなる。このような表面近くの原子の振動の簡単な一つの扱い方として、self-consistent Einstein モデルを提案する。各原子の独立な振動の振動数を位置の関数として全系の自由エネルギーが極小になる条件からきめるのである。原子の質量を  $m$ 、原子間のポテンシャルを  $v(\mathbf{r})$  とすると

$$m \omega^2(\mathbf{R}) \equiv \phi(\mathbf{R}) = \left\langle \sum_{\mathbf{R}'} v_{xx}(\mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{R}' - \mathbf{u}(\mathbf{R}')) \right\rangle$$

が  $\omega^2(\mathbf{R})$  あるいは  $\phi(\mathbf{R})$  をきめる方程式で、この右辺は変位  $\mathbf{u}(\mathbf{R})$  の平均値を通して  $\phi(\mathbf{R})$  の関数である。この非線型方程式を逐次近似で解くことで、LEED 実験から得られる種々の金属の表面 Debye 温度の値を定性的に説明できることが示される。