

界 面 状 態 の 理 論

北大理 小 野 正 利

以前に、堀先生、和田さん、小倉さんと私で界面状態の格子振動を考えました。ここでは、その時の私達が一緒に行った仕事¹⁾を紹介致します。

私達の仕事の発端は、Garcia-MolinerとRubio²⁾(1969)が行った、表面や界面での電子状態の計算方法が、格子系にも適用出来ないかという事でありました。

彼等の得た方法は、界面をはさんで二つの系を考え、一方のGreen fn.を G_A 、もう一方のGreen fn.を G_B とすると

$$\det(g_A + g_B) = 0 \quad (1)$$

が界面状態を与えるというものです。この結果を出すのに用いた方法は、equivalent pot. (あるいは、pseudopotential) の考え方です。

しかし、この界面状態を求める表式は、簡単に導く事が出来ます。界面 S によって区切られている二つの系があるとして、片方を R そして、もう片方を L とします。すると、次のSchrödinger方程式が得られます。

$$(H_r - E)\Psi_r(r) = 0 \quad \text{for } R \quad (2a)$$

$$(H_e - E)\Psi_e(r) = 0 \quad \text{for } L \quad (2b)$$

界面で、 Ψ に対して、非斉次のNeumann条件を課し、また、Green fn. に対しては、斉次のNeumann条件を課す事により、解を導出する事が出来ます。出て来る結果は(1)式と全く同じ形を持ちます。

$$\det|G_r + G_e| = 0 \quad (3)$$

さて、このような関係は、最近接相互作用のみを考えた格子系にも、界面状態を求める式として、導く事が出来ます。今次のような系を考えます。

R-latticeの運動方程式は、次のoperator formで書けます。

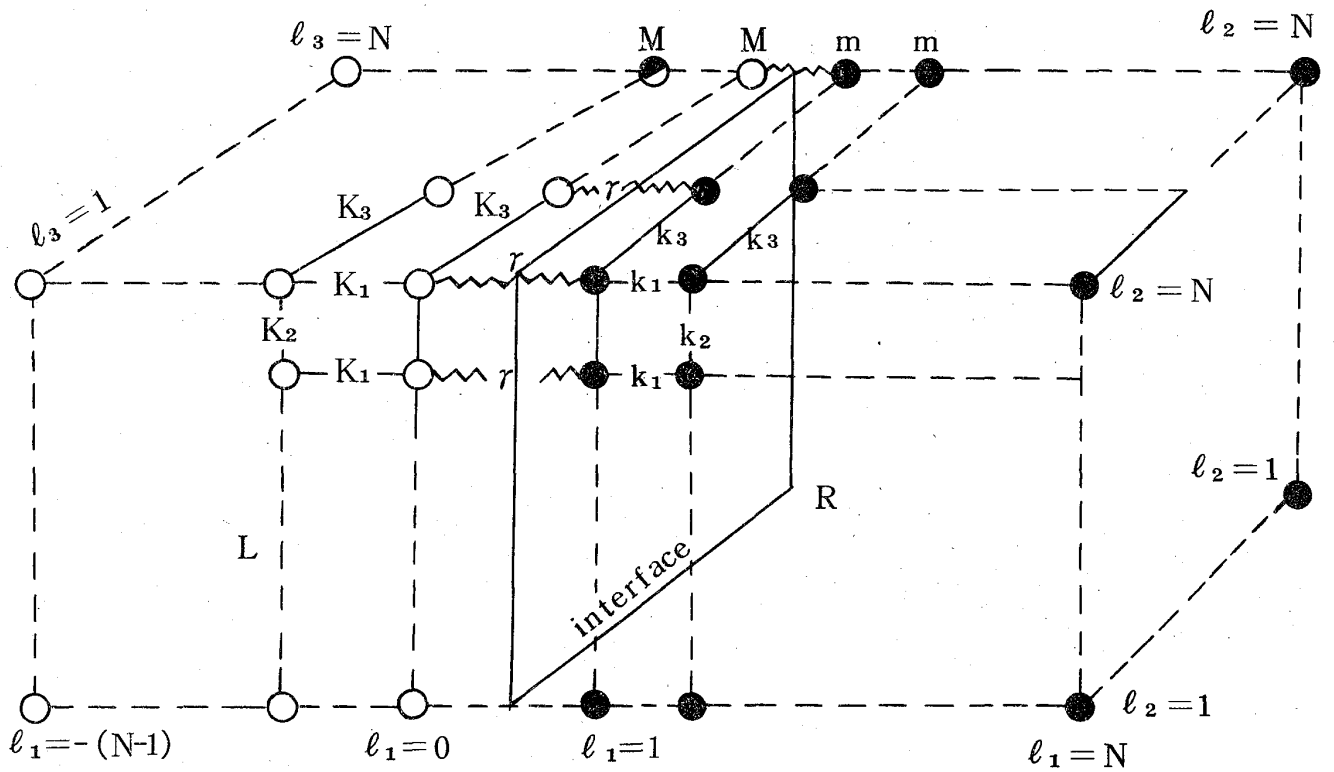


図 1

$$(m\omega^2 - L_r) |u\rangle = \Delta L |u\rangle \quad (4)$$

(4)の形式解は,

$$|u\rangle = |u_r^{(0)}\rangle + G_r(\omega^2) \Delta L |u\rangle \quad (5)$$

さて, 今

$$C(\ell_1 : \mu\nu) = \sum_{\ell_2, \ell_3} u(\ell_1, \ell_2, \ell_3) Z_{\ell_2}^{(\mu)} Z_{\ell_3}^{(\nu)} \quad (6)$$

$$Z_{\ell}^{(\mu)} \equiv \left(\frac{2 - \delta_{\mu,0}}{N} \right)^{1/2} \cos \left\{ \left(\ell - \frac{1}{2} \right) \frac{\mu\pi}{N} \right\} \quad (7)$$

を用いますと,

$$\begin{aligned} C(\ell_1 : \mu\nu) &= C_r^{(0)}(\ell_1 : \mu\nu) \\ &+ G_r^{\ell_1,1}(\omega^2 : \mu\nu) r \{ C(1 : \mu\nu) - C(0 : \mu\nu) \} \end{aligned} \quad (8)$$

$$G_r^{\ell_1, 1} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\lambda=0}^{N-1} \frac{(2 - \delta_{\lambda 0}) \cos \{ (\ell_1 - \frac{1}{2}) \frac{\lambda \pi}{N} \} \cos \frac{\lambda \pi}{2N}}{m\omega^2 - 2k_1(1 - \cos \frac{\lambda \pi}{N}) - 2k_2(1 - \cos \frac{\mu \pi}{N}) - 2k_3(1 - \cos \frac{\nu \pi}{N})} \quad (9)$$

同様に、 L -latticeについても

$$C(\ell_1 : \mu\nu) = C_\ell^{(0)}(\ell_1 : \mu\nu) + G_\ell^{\ell_1, 0}(\omega^2 : \mu\nu) r \{ C(0 : \mu\nu) - C(1 : \mu\nu) \} \quad (10)$$

$$G_\ell^{\ell_1, 0} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\lambda=0}^{N-1} \frac{(2 - \delta_{\lambda 0}) \cos \{ (\ell_1 - \frac{1}{2}) \frac{\lambda \pi}{N} \} \cos \frac{\lambda \pi}{2N}}{M\omega^2 - 2K_1(1 - \cos \frac{\lambda \pi}{N}) - 2K_2(1 - \cos \frac{\mu \pi}{N}) - 2K_3(1 - \cos \frac{\nu \pi}{N})} \quad (11)$$

が成り立ちます。(8)式と(10)式の引き算を行いますと、((8)式で $\ell_1 = 1$ 、(10)式で $\ell_1 = 0$ と置く)。

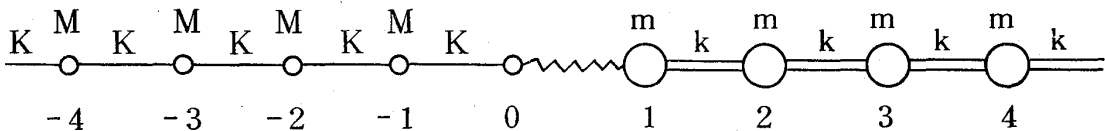
$$C(1 : \mu\nu) - C(0 : \mu\nu) = C_r^{(0)}(1 : \mu\nu) - C_\ell^{(0)}(0 : \mu\nu) + [G_r^{1, 1}(\omega^2 : \mu\nu) + G_\ell^{0, 0}(\omega^2 : \mu\nu)] r \{ C(1 : \mu\nu) - C(0 : \mu\nu) \} \quad (12)$$

が得られます。ここで界面振動を求めているのであるという事を考慮しますと、

$$[G_r^{1, 1}(\omega^2 : \mu\nu) + G_\ell^{0, 0}(\omega^2 : \mu\nu)] = r^{-1} \quad (13)$$

が得られ、この式は(3)式と良く似ています。

簡単な場合にこの(13)式を適用してみます。



上図のような一次元系では、 $G_r^{1, 1}$ 、 $G_\ell^{0, 0}$ は次のように求まります。

$$G_r^{1, 1}(\omega^2) = \frac{1}{2k} \frac{X_r - \sqrt{X_r(X_r - 1)}}{X_r} \quad (14)$$

$$G_\ell^{0, 0}(\omega^2) = \frac{1}{2K} \frac{X_\ell - \sqrt{X_\ell(X_\ell - 1)}}{X_\ell} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} X_r &= \omega^2 / (4k/m) \\ X_\ell &= \omega^2 / (4K/M) \end{aligned} \quad (16)$$

(14) 式と (15) 式とを (13) 式に用いると

$$1 = \frac{r}{2K} \left(\frac{X_\ell - \sqrt{X_\ell(X_\ell - 1)}}{X_\ell} \right) + \frac{r}{2K} \left(\frac{X_r - \sqrt{X_r(X_r - 1)}}{X_r} \right), \quad (17)$$

となり、今 $r = K$ の場合を考えることにしますと、

$$\omega^2 = \frac{1}{mM} \frac{(KM - mk)}{(m - M)(k - K)} \quad (18)$$

が得られます。(18) 式を導くに際して、式の両辺を、何度も二乗する必要があります。従って、 m, M, k, K についての吟味が必要です。今

$$S \equiv \frac{M}{m}, \quad t \equiv \frac{K}{k} \quad (19)$$

を導入しますと、下図の III の範囲で、界面に局在した振動状態が可能です。

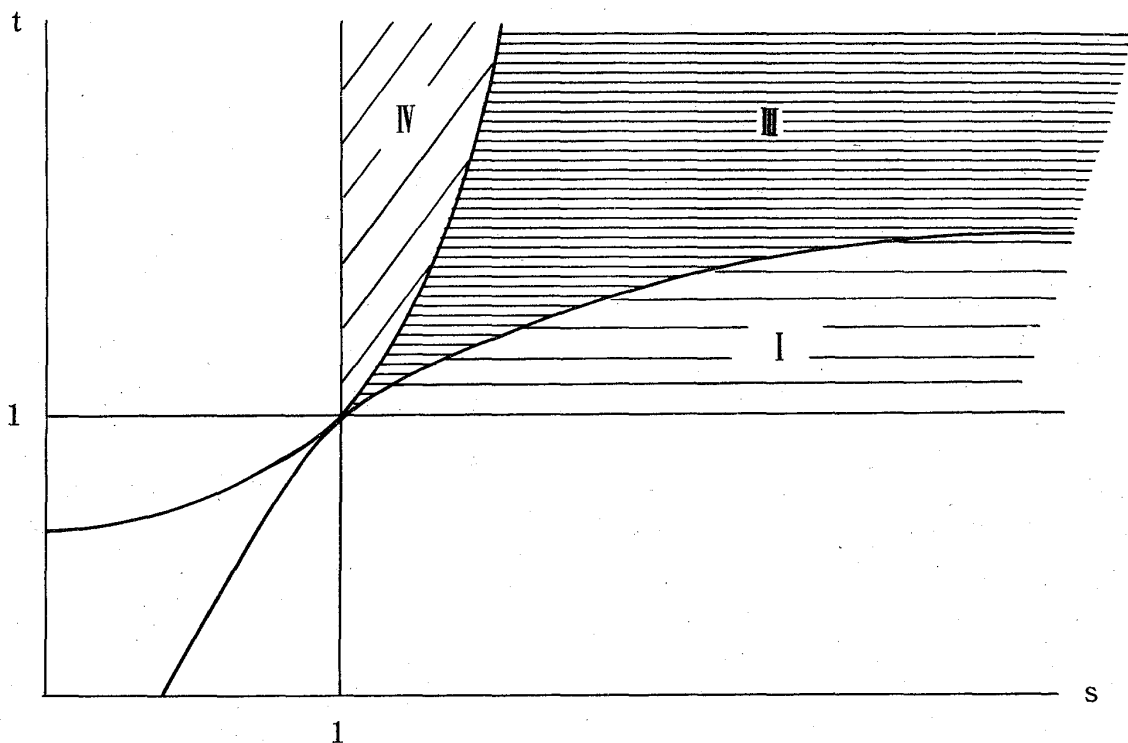
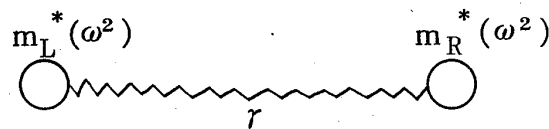


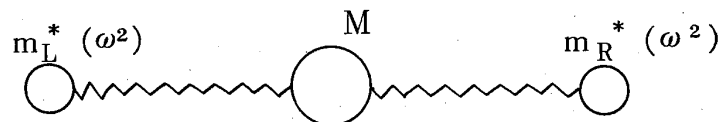
図 2

この振動状態は、(18)式から、 $m=M$ あるいは、 $k=K$ の場合には存在しません。両方の系を構成する原子が違う時には、ある条件下で必ず存在すると言えます。もっとも、ここで考えているのは、最近接相互作用の場合ですから、forceが long rangeの場合には、様子が異なると思われます。ここで得た Green fn.を用いての公式自体の変更が必要となります。

次に、最近接相互作用に話を限りますと、 L 及び R の系は、それぞれ仮想的な質量 $m_L^*(\omega^2)$ と $m_R^*(\omega^2)$ を持った atom と見做すことが可能で、 m_L^* と m_R^* とがバネ定数 r で結ばれていると考えることが出来ます。(局在した振動状態についての話です。)従って、界面を持った系の界面状態は、下図のように、二つの atom の固有振動を計算する事と等価となります。



この場合、界面に不純物原子 M が入った場合にも、三原子系として取り扱い可能です。



以上で、Garcia-Moliner と Rubis が用いた方法は、簡単に、equivalent pot. の方法を用いずとも得る事が可能であり、そして、同じ形が最近接相互作用を持つ格子系に対して、等しく成り立つ事を見ました。一次元の格子系に用いると、実際、ある条件下で、界面に局在振動が存在する事を知りました。

- 1) J.Hori, M.Ono, M.Ogura and K.Wada: Proceedings of the International Conference, Rennes, France, 1971, p. 400
- 2) F.Garcia-Moliner and J.Rubio: J. Phys. C. 2(1969) p. 1789