

- 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広がりを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樣に $z=0$ 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、

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

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

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

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

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。