

における補正項は次式で置き換えられる。

$$(\text{補正項}) \cong i \frac{K}{k} (\epsilon - 1)^2 \frac{CK}{\omega \epsilon} \quad (16)$$

このように P 偏光に対する反射率の公式に加えられる補正項は電子気体の境界条件によって異ってくる。

以上のように電子気体の境界面における光の反射についてプラズマ励起の効果すなわち密度揺ぎの効果を検討すると P 偏光に対しては反射率の補正が必要である。しかし、(15), (16) 式に関する限り、補正項の大きさは $K/k \cong C/S$ の程度であってあまり大きくない。そしてこの効果の実験的確認を得るためには相当精密な測定が必要である。強度反射率のみでなく、偏光解折などの手段によって、反射の際の位相変化をみることが有効である。

金属結晶の光学的性質

森 田 章 (東北大理)

私に割当てられた題目は「金属結晶の光学的性質」であるが、ここでは話を金属の軟 X 線発揮スペクトルに限る。S O R に関係ある話題としては他に軟 X 線の吸収スペクトルや極紫外部に関係した問題があるが割愛する。

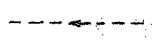
軟 X 線発揮は X 線や β 線とうの照射で内殻準位に生じた正孔に伝導帯の電子が落ち込むさいに軟 X 線を放出する現象である。この現象は伝導電子相互や、伝導電子と内殻の正孔との間のクーロン相互作用の存在によって複雑化される。発揮スペクトルの強度は正しくは内殻の正孔の self-energy のうちの電磁場との相互作用について 2 次の部分を計算し、その虚数部分 (正孔の寿命) を求める方法で与えられる。以下で、電子間のクーロン相互作用が金属の軟 X 線発揮スペクトルにどのように反映しているかを述べることにする。具体的な計算はすべて省き便宜的な図による説明でおきかえ、結果だけを述べさせてもらうことにする。

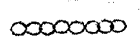
最初に図の記号の説明しておく。

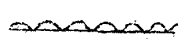
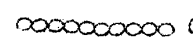
 = 内殻準位の正孔

 = 伝導帯のフェルミ準位より上にある電子

 = 伝導帯の正孔

 = フォトン (軟X線)

 = 伝導電子により dynamically にスクリーンされたクーロン相互作用

 =  の static な部分

また以下では簡単のため、内殻準位のブロッホ関数のエネルギーの波数依存性は無視し、そのエネルギーを E_0 で表す。さらに伝導帯のエネルギーは自由電子的 ($E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$) であるとする。

軟X線を放出する最も簡単なプロセス (図1) は伝導電子が直接内殻の正孔と結合して軟X線を発揮し、あとに伝導帯の正孔を残す。このプロセスは発揮スペクトルの強度として

$$I(\nu) \propto \sqrt{E}, \quad 0 < E = \hbar\nu - |E_0| < E_F$$

$$= 0 \quad E < 0 \text{ or } E > E_F$$

を与える。これは Sommerfeld 模型から期待される結果である。ところで一般に金属の軟X線発揮スペクトルは低エネルギー側に長い tail を引き、明確な低エネルギー端を持たない。

Landsberg¹⁾ は N_a の L-発揮スペクトルの低エネルギー tail の説明をするのに Auger 効果を考えた。すなわち、図2に示されるように、伝導電子が

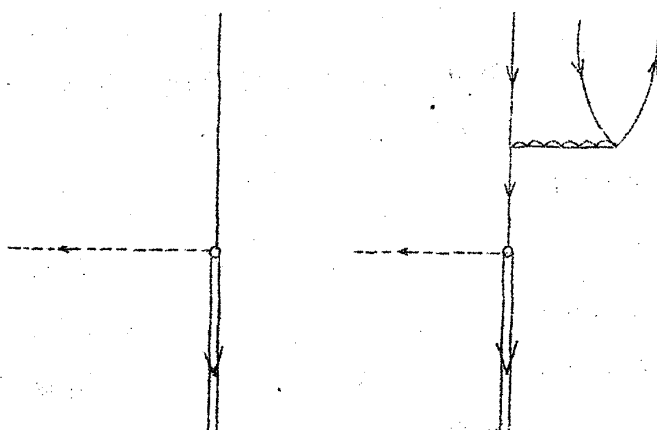


図 1

図 2

内殻の正孔と結合して生じた伝導帯の正孔が電子間相互作用で散乱され、終状態としては正孔の他に電子-正孔の一对が存在するプロセスを考慮した。彼の計算結果は、図3に示すように、実験結果を定性的には良く説明する。

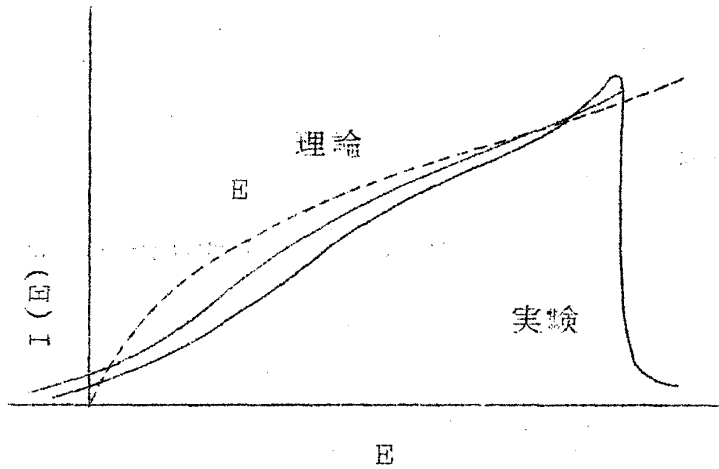


図 3

彼の取扱いをもう少し一般化するには図1において、伝導帯の自由な正孔 $\uparrow$ の代りに、図4に示すような電子間クーロン相互作用による自己エネルギーを繰込んだ正孔 $\uparrow$ でおきかえれば良い。この自己エネルギーの計算は相当めんどうである。しかし自己エネルギーの一般的性質についての考察と Hedin²⁾ や Bose et al.³⁾ の数値計算の結果とを利用して $|E| < \hbar\omega_p$ に対しては近似的に自己エネルギーを E と波数の関数として求めることができる。自己エネルギーが求まると正孔のエネルギー・スペクトルが求まり、従って発揮スペクトルの強度が計算できる。計算結果は Landsberg の結果と大変よく似ている。(図5) $|E| > \hbar\omega_p$ に対しては自己エネルギーに寄与するのはクーロン相互

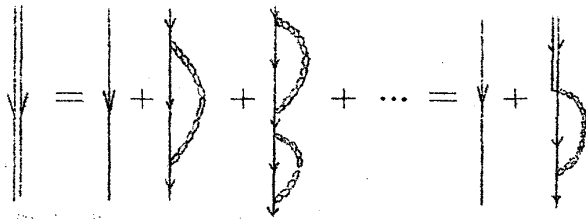


図 4

作用のうちでプラズマ振動が関与する部分が主になる。この場合には Hedin⁴⁾ 等によれば伝導帯の底からさらに $1.5 \hbar\omega_p$ 程度低いエネルギーのところに新しい素励起状態が出現する。これは正孔が plasmon を virtual に放出・吸収することによってできる状態である。Hedin は polaron との類似性からこの素励起状態を plasmaron と名付けた。この plasmaron の存在は軟X線発揮スペクトルの main band よりも $1.5 \hbar\omega_p$ 程度低エネルギー

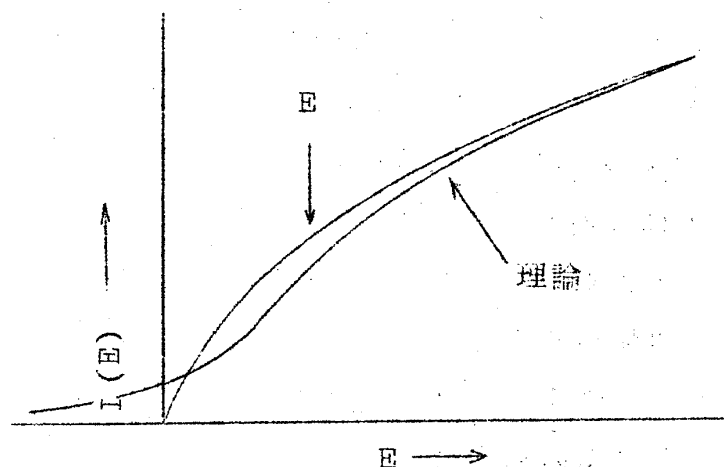


図 5

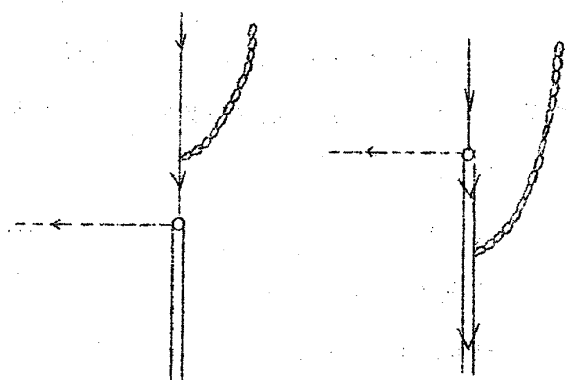


図 6

一側に新しい satellite band の存在する可能性を示す。勿論この他に直接プラズモンを放出するプロセス (図 6) に対応する satellite band の存在が Ferrell⁵⁾ 等により指摘され、実験的にも観測されている。⁶⁾ このような plasmaron は内殻の正孔に対しても存在しうる。この core-plasmaron に対応して、main band よりも $1.5 \hbar \omega_p$ 程度高エネルギー側に強度は弱い形は main band と同じ satellite band が存在しうることになる。実際いくつかの金属について、表 I に示したように、高エネルギー側に satellite band が

表 1

	Li	Na	K	Al	Be	Mg
ΔE (eV)	2.9	1.2	—	1.63	2.5	1.4
$\hbar \omega_p$ (eV)	8	5.6	3.67	1.5	1.9	1.0
(ΔE = high energy satellite の高エネルギー端と main band の高エネルギー端とのエネルギー差)						

観測されている。これらの high energy satellite band の起源については内殻の二重励起という説があったが、未だに定説がなかった。我々はこれらの大部分は内殻の正孔の plasmaron によって説明さるべきものと考ええる。いづれにせよ plasmaron 効果による低エネルギー側、及び高エネルギー側の satellite bands を色々の金属やエネルギー間隙の小さな絶縁体 (S_i , G_e) 等で調べてみることは興味がある。

N_a の L-発輝スペクトルの実験結果 (図1) を見ると高エネルギー端のところに異常なこぶが認められる。このこぶの起源についての理論的な説明がなく、これがはたして intrinsic なものか否か不確しかなままに放置されてきた。我々はこのこぶが intrinsic なものと考え、いかにその理論的な根拠を示す。内殻の正孔に軟線を放出しながら落ち込む伝導電子は落ち込むまでは内殻の正孔の正電荷によって散乱をうける。この散乱のプロセスの最も簡単なものが図7の

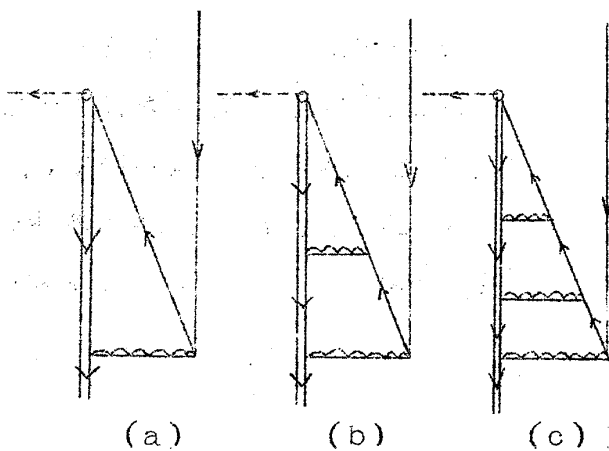


図 7

の最も簡単なものが図7の

(a) であり, (b), (c), ...

はその高次のプロセスを示す。

計算の結果によると, 図7の

(a) の寄与は main band の

高エネルギー端のところで対数的

発散を示し, 低エネルギー側

でも直接プロセス (図1) より

も大きな寄与を示す。このこと

は図7に示すプロセスを摂動展

開で最初の数項だけを計算する

方法は breakdown することを意味する。このプロセスを無限次までたしあつめる必要がある。このプロセスを無限次までたしあつめたものは, 最初の相互作用と最後のフォトンの放出を除いて考えると, 図8に示すように, 内殻の正孔とフェルミ準位の上の伝導電子との間の励起子的状態と同じである。このような状態の計算は Mahan⁷⁾の方法を用いて行うことができる。この励起子的状態の存在は, 丁度実験で認められるように, 高エネルギー端のところにこぶを与えてくれる。 N_a 以外の金属でこのようなこぶが認められる

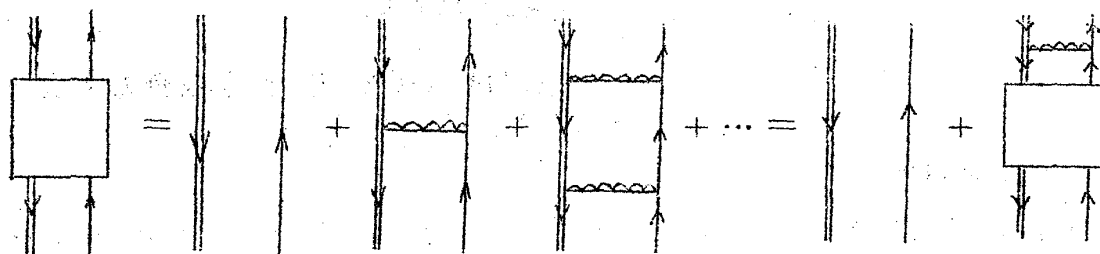


図 8

可能性の最も大きいのはKであろう。low energy 及び high energy satellite の間とも合せて、K についての軟X線発輝スペクトルの詳しい実験が望まれるゆえんである。

Reference

1. P.T. Lanelberg: Proc. Phys. Soc. London A62 806 (1949)
2. L.Hedin: Phys. Rev. 139 A796 (1965)
3. S.M. Bose, et al, Phys. Rev. 155 379 (1967)
4. L.Hedin, B.I. Lundqvist and S.Lundqvist; Solid State Comm. 5 237 (1967); L.Hedin, Solid State Comm. 5 451 (1967)
5. R.A. Ferrell, Phys. Rev. 28 184 (1956)
6. G.A. Rooke, Phys. Letters. 3 234 (1963)
7. G.D. Mahan, Phys. Rev. 153 882 (1967)