

表面の分極波構造

九大教養 中山正敏

1. 表面電子系の面に垂直な分極波構造を論じたい。まず、線形理論のおさらい。¹⁾
面に局在した分極波

$$P_z = P_S \delta(z) \exp[i(kx - \omega t)] \quad (1)$$

があるとき、電場の境界接続条件は、

$$E_x(+0) - E_x(-0) = -4\pi i k P_S \quad (2)$$

となる(共通位相因子は省く)。 P_S は、連続量 $D_z(0)$ により

$$P_S = \chi_{zz}^{(2D)} D_z(0) \quad (3)$$

と表わされるとすれば、P-偏光波の分散式は、

$$\frac{\alpha_1}{\epsilon_1} + \frac{\alpha_2}{\epsilon_2} = 4\pi k^2 \chi_{zz}^{(2D)}(k, \omega) \quad (4)$$

となる。 $\omega \rightarrow 0$ で $\alpha_i \rightarrow k$ だから、(a) $\omega \propto k$ の解の外に、(b)

$$\frac{1}{\epsilon_1} + \frac{1}{\epsilon_2} = 4\pi k_c \chi_{zz}^{(2D)}(k_c, 0) \quad (5)$$

を満足する k_c があれば、その点で分極波は soft 化し、平らな系は不安定となる。

2. He 液面上電子。この場合、液面が波打つ不安定性は、多くの人によりしらべられている。²⁾ ここでは、エネルギー的に考察する。液面の変形を $\zeta = u \cos kx$ とすると、静電エネルギー、重力エネルギー、表面張力エネルギーをこの順に加えて、全エネルギーは、

$$U = -\frac{\pi \sigma_0^2}{k} \xi^2 \left(1 - \frac{1}{4} \xi^2\right) + \frac{\rho g}{4k^2} \xi^2 + \frac{\alpha}{4} \xi^2 \left(1 - \frac{3}{16} \xi^2\right) \quad (6)$$

となる。 $\xi = ku$, σ_0 = 電荷密度, α = 表面張力係数。 $\sigma_0 > \sigma_c = (\rho g \alpha / 4\pi^2)^{1/4}$ で不

中山正敏

安定となり、その時の波数は $k_c = \sqrt{\rho g / a}$ である。 σ_c をわずかに越えても、巨視的な尺度の変形が起る。因みに、結晶表面の場合、歪み変形エネルギーに打ち克つ σ_c の値は、ちょうど 1 電子 / 表面原子の程度となる。これは、reconstruction の機構とみることでもある。

3. 重なりのない原子系（表面 Frenkel 励起子）。分極は、各原子の基底状態 a に、励起状態 b を混ぜて起す。すなわち、変分状態

$$\Psi = H[u a_m^+ + v e^{i \vec{Q} \cdot \vec{R}_m} b_m^+] |0\rangle \quad (7)$$

により、エネルギーを最小にする。このとき、

$$\frac{E}{N} = \epsilon |v|^2 + t |v|^2 (1 - |v|^2) \quad (8)$$

ϵ は、原子励起エネルギー。 t は、

$$t = p_z^2 \operatorname{Re} \sum'_{m \neq n} \frac{1}{R_{mn}^3} e^{i \vec{Q} \cdot (\vec{R}_m - \vec{R}_n)} \quad (9)$$

で与えられる。簡単な計算により、

$$|v|_0^2 = (\epsilon + t) / 2t \quad (10)$$

$$(E/N)_0 = (\epsilon + t)^2 / 4t \quad (11)$$

となる。実際にエネルギーが下がるには、

$$t < 0, \quad \epsilon < -t \quad (12)$$

でなくてはならぬ。2次元双極子波格子和は、反強磁性配置近くで負となるが、第2の条件を満たすには（ z 方向の波動関数の広がり） $>$ （2次元格子定数）でなくてはならない。アリカリハライド結晶の表面近くでは、イオンの配列と分極が乱れ、例えば表面イオンの全分極は正イオンと負イオンで逆向きであるという計算結果がある。³⁾ これは、

この考えで説明されるかも知れない。

4. サブバンド間分極。基底サブバンド a に励起サブバンド b の状態を混ぜ、

$$\Psi = \sum_{\vec{k}} (u_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ + v_{\vec{k}} b_{\vec{k}+\vec{Q}}) |0\rangle \quad (13)$$

形の変分状態を取る。計算は、excitonic phase の時と全く同じで、⁴⁾ gap 方程式に出てくる相互作用は、

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(\vec{k}, \vec{k}'; Q) = & \frac{2\pi e^2}{Q\bar{\epsilon}} \int dz \int dz' \zeta_a^*(z) \zeta_b(z) \zeta_b^*(z') \zeta_a(z') e^{-Q|z-z'|} \\ & - \frac{2\pi e^2}{|\vec{k}-\vec{k}'|\bar{\epsilon}} \int dz \int dz' \zeta_a^*(z) \zeta_a(z) \zeta_b^*(z') \zeta_b(z') e^{-|\vec{k}-\vec{k}'||z-z'|} \end{aligned} \quad (14)$$

となる。 $Q \sim k_F$ として、 z -方向の波動関数 $\zeta_{a,b}$ の直交性を考慮し、 $\bar{\epsilon}$ に F. Stern による表式⁵⁾を取り長波長近似をすると、

$$V_{\text{eff}} \sim -\tilde{V} = -\frac{2\pi e^2 a_B^*}{\bar{\epsilon} r} \quad (15)$$

と近似される。 r は spin や valley による縮退因子である。(15) を用いて gap 方程式の解をしらべると、 a, b 両バンドの有効質量が等しい場合には trivial な解しかない。Si-MOS の N-チャネルで、 a が (001), b が (100) 型 valley である場合には解がありうる。解は、下のバンドのフェルミエネルギーがエネルギー間隔の 90% 近くから現われ、フェルミエネルギーが間隔に一致した場合の gap パラメータの値は間隔の 2 割に達する。

参 考 文 献

- 1) 中山正敏, 基研研究会報告, 物性研究 23 (1975) D46 (3月号)
- 2) 例えば, L. P. Gor'kov and D. M. Chernikova JETP-Letters 18 ('73) 68.

ランダウ = リフシッツ「電磁気学」 §5. Ex. 5.

中山正敏

- 3) G. C. Benson and T. A. Claxton, J. Chem. Phys, **48** ('68) 1356.
- 4) B. I. Halperin and T. M. Rice, Solid State Phys., vol. 21 ('68) 116.
- 5) F. Stern, Phys. Rev. Letters, **18** ('67) 546.