

表面における電子ダイナミクスにおいて電子フォノン相互作用はその主要な支配要因として理解すべき重要な対象である。特に近年の高分解光電子分光法や低温での走査型トンネル分光法などの高精度かつ高分解能な表面科学実験技術が可能となったことで、電子フォノン相互作用の重要性が定量的に示されるようになってきた。こうした実験的な知見を基に我々は表面における電子フォノン相互作用に関する理論的な研究を行った。これまで超伝導などに関連し、数多くの研究が行われてきたバルクと表面での伝導電子による遮蔽効果の差異について考察するため、電子フォノン相互作用による変形ポテンシャルを第一原理的に求め、その減衰距離について検討した。その結果を図 1 に示す。変形ポテンシャルが各原子に局在していることが分かる。また、半無限結晶を近似的に扱う際の標準的な手法であるスラブモデルの電子フォノン相互作用を計算する際の妥当性についても簡単なモデル計算から検討を行った。結果を図 2 に示す。表面状態の局在の程度により必要なスラブの厚さが強く依存することを明らかにした。

波動関数は実験結果を再現するように決定された一次元ポテンシャルを用いて導出した。表面平行方向には平面波で展開した。今後は表面フォノンの分散構造について検討し特に表面モードや吸着種に局在するようなモードと表面状態がどの様に電子フォノン相互作用に寄与するのかについての知見を得ることを目的とする。

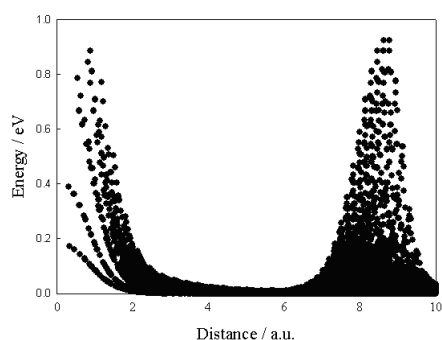


図 1 Be(2×2)表面における変形ポテンシャル

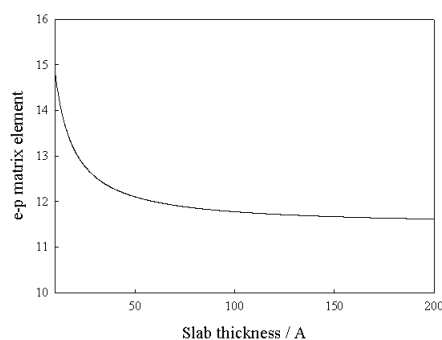


図 2 Be 表面における電子フォノン相互作用行列要素とそのスラブ厚さに対する収束