



表面物理讲座第四讲 表面电子态

陆 栋

(复旦大学现代物理研究所)

早在三十年代固体量子理论初兴之时，塔姆就曾提出，晶体表面，由于周期场终断，会在晶体电子的禁带中出现新的电子定域态，这就是塔姆表面能级。后来，肖克莱又提出共价晶体表面的未饱和悬挂键也会在禁带中产生表面能级，这就是肖克莱表面能级。这些表面能级的共同特征是，位于禁带之中在表面能级上的电子沿着表面方向可以自由运动，但在垂直表面方向，表面态电子的波函数是指数衰减的，所以它们是定域在表面的状态。最近十五年，由于超高真空技术、表面电子能谱仪、单晶制备技术的进步以及电子计算机广泛应用，表面电子态的研究得到了良好的条件，人们可以从初级的模型研究转入研究具体晶体的表面电子态了。了解固体表面电子态和电子分布的知识是分析一切固体表面的物理和化学现象的电子过程的基础。

本文主要从一维模型势来说明表面电子态的来源和特征，再介绍典型的实际晶体的表面态。

一、克罗尼克-潘纳的一维周期场模型

为了说明方便，先介绍周期场中电子能量的特征。1931年克罗尼克-潘纳^[1]采用如图1所示的由势阱和势垒交替排列组成的一维周期场模拟晶体中电子的势场，研究了在这势场中运动的电子所具有的能量状态。这个模型的特点既简单又具有广泛的适应性，能够描述许多种结合键的晶体的电子势场。例如，人们知道，金属的晶格是由它的正离子实组成的，它的价

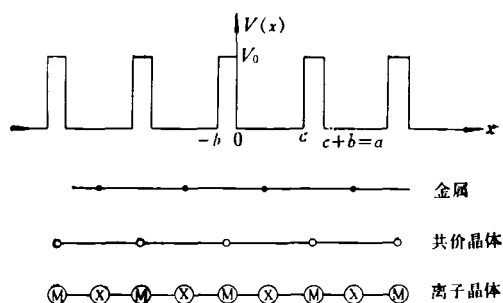


图 1

电子能够在整个晶体中运动，组成自由电子气。但离子实对自由电子仍有一定的吸引势，因此对金属而言，可认为离子实是在势阱中心位置。又如，共价晶体的主要特点是电子定域在相邻两个原子连线的中部，形成饱和的共价键。电子集聚的地方势能小，因此对于共价晶体，可认为原子位于势垒中心位置。至于二元离子晶体，由于负离子(X)对电子有较大的亲和力，价电子喜欢处于该离子位置，这位置相当于势阱中心。而正离子(M)因容易失去电子，设想它处于势垒中心比较合理。

可以证明，在周期场中电子的波函数是平面波的迭加所形成的调幅平面波，称为布洛赫波，写成

$$\begin{aligned}\psi_k(x) &= \exp(ikx)u_k(x), \\ u_k(x) &= u_k(x + na).\end{aligned}$$

这里 n 是任意整数， a 是一维晶格周期， k 是电子的波矢。平面波因子 $\exp(ikx)$ 描写电子的共有化运动，电子能在晶体中自由运动；而周期因子 $u_k(x)$ 描写电子在原胞内（即线度为 a 的范围）的运动，或电子在原子范围的运动。电子的本征能量依赖于波矢，见图2。图中曲线说

明, 周期场中电子的能量是分段连续的能带. 两个能带之间是晶体电子不许具有的能量, 称为禁带. 禁带发生在波矢 $k = n\pi/a$ ($n = \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$) 之处. 一维晶格的周期是 a , 与此相应, 人们可以确定周期为 $2\pi/a$ 的倒格子. $K_n = n \frac{2\pi}{a}$ 是倒格点的坐标或称倒格矢. 禁带就发生在倒格矢 K_n 的平分点上. 这些点是各个能带的边界, 每个能带对应一个布里渊区, 如图 2 所示.

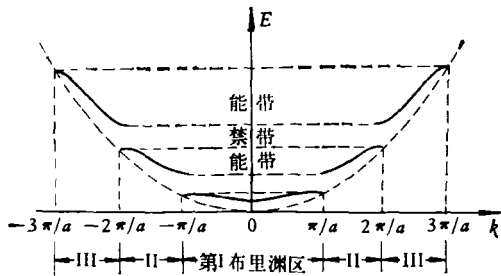


图 2

二、塔姆能级^[2]

在晶体表面周期场终止的情形, 可用图 3(a) 所示的势场模型代表. 在表面有一个高度为 ϕ 的势垒, ϕ 的数值依赖于晶体电子的脱出功. 现在考虑能量 $E < V_0$ 及 ϕ 的表面态.

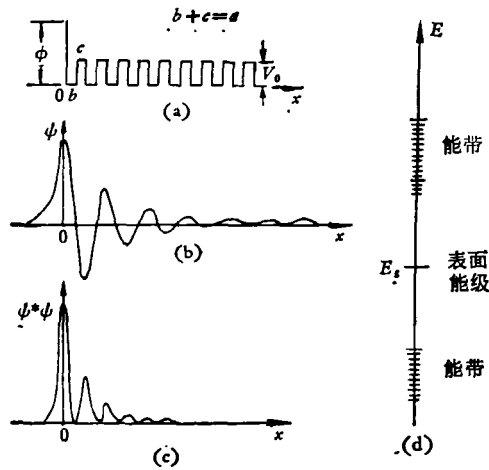


图 3

在 $x < 0$ 区域, 电子的波函数随离表面距离增加而指数衰减, 写成

物理

$$\psi_I(x) = A'e^{\gamma x},$$

式中 $\gamma^2 = 2m(\phi - E)/\hbar^2$. 这里 \hbar 是普朗克常数除以 2π . 这样的波函数保证了电子不逸出晶体. 同表面势垒相邻的是势阱区, 电子的波函数是平面波的迭加, 写成

$$\begin{aligned} \psi_{II} &= Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \\ &= e^{ikx} [Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x}], \end{aligned}$$

式中 $\alpha^2 = 2mE/\hbar^2$. 在此势阱的右邻是势垒区, 电子的波函数写成

$$\begin{aligned} \psi_{III} &= Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \\ &= e^{ikx} [Ce^{(\beta-k)x} + De^{-(\beta+k)x}], \end{aligned}$$

其中 $\beta^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. 体内区域的波函数可由布洛赫波特性 $\psi_k(x + na) = e^{ikna} \cdot \psi_k(x)$ 来决定. 在势场不连续的位置, 波函数及其导数必须连续, 特别是在表面 $x = 0$ 处满足条件:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \text{得} \quad A' = A + B;$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \quad \text{得} \quad \gamma A' = i\alpha(A - B).$$

再利用在体内势场不连续点电子的波函数及其导数都连续的条件, 可得到 A 和 B 之间的函数关系. 如果采用 $c \rightarrow 0, b \rightarrow a$ 的简化步骤, 则 A 和 B 有下列关系:

$$B = -A \frac{e^{i(\alpha-k)a} - 1}{e^{-i(\alpha+k)a} - 1}.$$

将此关系代入前面两个等式后, 得到

$$A' = A \left[1 - \frac{e^{i(\alpha-k)a} - 1}{e^{-i(\alpha+k)a} - 1} \right]$$

和

$$\gamma A' = A \left[1 + \frac{e^{i(\alpha-k)a} - 1}{e^{-i(\alpha+k)a} - 1} \right] i\alpha.$$

消去 A 和 A' , 得到了表面电子态能量所必须满足的关系式:

$$\exp(ika) = \gamma \sin(\alpha a) / \alpha + \cos(\alpha a),$$

此式的右边是能量的函数, 应是实数, 左边是复数形式. 要维持这个等式, 波矢 k 本身必须是复数, 写成

$$k = n\pi/a + iq,$$

这里 q 必须是正值, 以保证沿体内方向波函数是指数衰减的, 如图 3(b) 所示. 波矢 k 的实部为 $n\pi/a$, 正好是在布里渊区边界上. 所以, 表

面能级是在禁带之内,如图 3(d) 所示。而在表面,电子的几率分布如图 3(c) 所示。这就是定域在表面附近的塔姆能级。

在三维的实际晶体中,表面能级上的电子可以在平行表面的平面内较自由运动,可用有确定波矢的平面上的布洛赫波描述。在垂直表面的方向上,不论在体内还是在真空区,波函数都是指数衰减的,这种波称为迅衰波。晶体原子的浓度为每立方厘米有 10^{22} 个原子,如果每个原子有一个价电子,则塔姆能级的面密度是由表面原子的面密度决定,大约每平方厘米有 10^{14} 个表面能级。

三、肖克莱能级

肖克莱^[3]指出塔姆表面态是晶体表面周期性势场对称形式中断的直接结果。他讨论了更一般的晶体势模型的一维有界晶格,如图 4 中实线所示。此模型假定,在表面右边势场保持周期性,而在表面处势场以对称的形式过渡。为了比较,图中还画了塔姆模型的表面势,以虚线表示。利用此模型,肖克莱讨论了,当晶格常数 a 由无限大变到有限值组成晶体时表面能级是怎样源出于原子的能级的。他指出只有在某些特殊条件下才有表面能级,并且弄清楚表面能级怎样从能带中分裂出来。

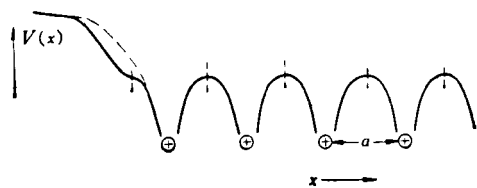


图 4

这些结果最好用电子能量 $E-a$ (晶格常数) 的曲线图来说明,图 5 定性画出这些曲线。可以看到,在 a 相当大的情形下,得到比较窄的能带,因为此时原子间的交迭较小。能带边界如图中虚线所示。随着晶格常数变小,能带变宽。当晶格常数缩小到某个特殊值时,两个能带相邻的边界线(图中虚线)相交。再缩小 a ,能量重新分裂,两条边界曲线对调位置,同时在禁带

中产生两个表面能级,它们分别从上、下两个能带中分裂出来。这两个能级的波函数都如图 3(b) 所示,离开表面都按指数衰减。这就是人们所说的肖克莱表面态。

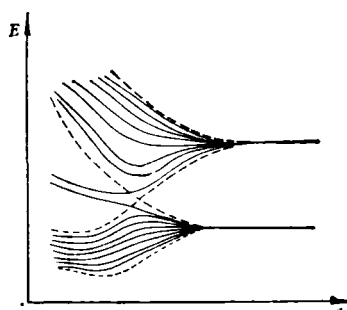


图 5

由上所述,我们知道,塔姆态出现在表面势有相当大突变的晶体,不管晶体内部原子间距是什么数值;肖克莱表面态则不同,它出现在原子间距小到一定程度,能带发生交叉的晶体,而且势场是在两个原子层的间距中部中断。肖克莱所述的条件在共价晶体的表面能够实现。例如,半导体硅(或锗)都是共价晶体。在原子间距相当于能带图中交叉点对应的原子间距时,硅(或锗)的 s 电子态和 p 电子态发生杂化,产生由成键的态扩展而成的价带和由反键的态组合成的导带。在价带和导带之间是禁带。室温时硅和锗的禁带宽度分别为 1.14 电子伏特和 0.67 电子伏特。所有的成键态是由相邻原子各贡献一个电子组合而成。在硅(或锗)晶体表面的原子,失去能提供价电子的另一个原子,因而发生价键断裂,即出现悬挂键。这种情形基本上合乎肖克莱所描述的条件。所以人们认为共价晶体表面悬挂键在禁带中所产生的表面能级就是肖克莱表面态。

在文献中一般认为,在原子层之间距中部势场中断产生的表面态是肖克莱表面态,而所有其他情况表面势场形成的表面态均属塔姆表面态。对于具体的晶体表面,区分这两类表面电子态是很困难的,甚至有人证明,如果坐标系的原点移动半个晶格常数的距离,一维的肖克莱能级理论就变成同附加上表面势的塔姆理论等效。因而在理论上细分肖克莱态和塔姆态也

不是那么必要了。现在，仅仅那些从事研究表面模型势产生的表面态的学者们仍沿用此法分类。

四、在双原子链界面的表面态^[4,5]

人们常用原子轨道线性组合的状态描述固体中的电子态，这种方法物理意义又比较明瞭。

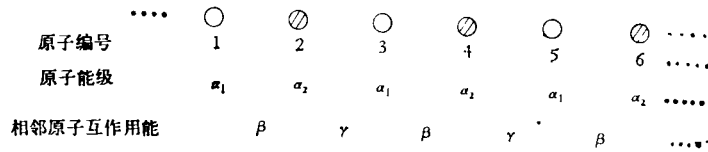


图 6

$$z_1 = (\alpha_1 - \alpha_2)/2\beta.$$

设原子轨道为 φ_n , n 为原子的编号。原子链中电子的波函数写成

$$\psi = \sum_n C_n \varphi_n.$$

利用薛定谔方程，可得到以下差分方程式：

$$(X - z_1)C_n = sC_{n-1} + C_{n+1} \quad (\text{当 } n \text{ 为奇数});$$

$$(X + z_1)C_n = C_{n-1} + sC_{n+1} \quad (\text{当 } n \text{ 为偶数}).$$

如取 $C_n = u^n$ (n 为奇数) 及 $C_n = \lambda u^n$ (n 为偶数)，为了获得振荡的解，可设 $u \sim e^{\pm i\theta/2}$ ，代入上述差分方程组，就可求得能量 X 应满足的下列方程：

$$X^2 = z_1^2 + s^2 + 2s \cos \theta + 1.$$

此关系式给出两个能带，如图 7 所示。如果 $z_1 = 0$ ，且 $s \ll 1$ ，这是两个同极分子 β 耦合的情形，这时将产生成键的态和反键的态，其间隙为 $2|\beta|$ 。又由于原胞间相邻原子为 γ 耦合，这

现在先讨论无限的双原子链的情形，假定各个原子只有一个电子态，其能量为 α_1 和 α_2 ， β 为原胞内两个原子间的相互作用， γ 是处于不同原胞内两个相邻原子的相互作用，如图 6 所示。为了方便，只计最近邻原子间的相互作用。记作 $s = \gamma/\beta < 1$ ，取能量零点为 $\bar{\alpha} = (\alpha_1 + \alpha_2)/2 = 0$ ，原子链中电子能量 E 写成 $X = (E - \bar{\alpha})/\beta$ 。同时记两个原子态的能量差为

两个能态各自扩展成两个能带。如果 $|z_1| \gg 1$ ，且 $s \ll 1$ 这相当于组成晶体的两种原子特性差

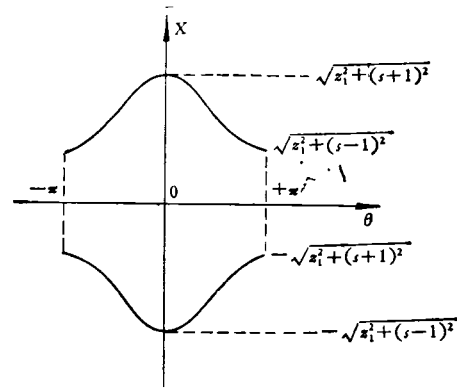


图 7

别很大的情形。在奇数位上的原子是能量为 α_1 的简并态；在偶数位上的原子是能量为 α_2 的简并态，由于相邻原子的弱耦合而形成比较窄的能带。如果取 $z_1 = 0$ ，且 $s = 1$ ，则奇、偶数位

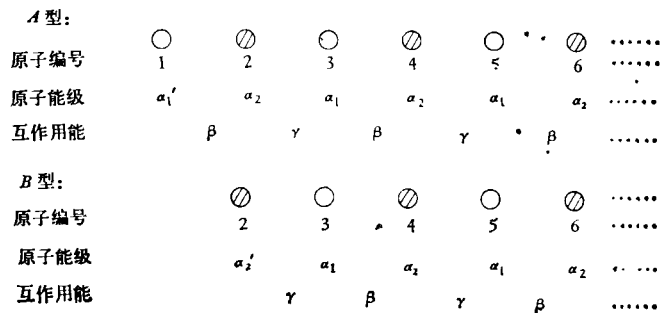


图 8

上是同一种原子,而且 $\beta = \gamma$, 相当于单原子链,此时能隙消失,两个能带连成一片,得到宽度为 $4|\beta|$ 的一个能带.

在双原子链有界端时有两种类型: A型,弱耦合 γ 被切断以及 B型,强耦合 β 被切断,如图 8 所示. 界端原子因其环境不同于链中原子,该原子的能级变为 α'_1 或 α'_2 . 涉及界端原子的差分方程为

$$(X - z_A)C_1 = C_2 \quad (\text{A型}),$$

其中

$$z_A = (\alpha'_1 - \bar{\alpha})/\beta;$$

$$(X - z_B)C_2 = \gamma C_3 \quad (\text{B型}),$$

其中

$$z_B = (\alpha'_2 - \bar{\alpha})/\beta.$$

为了使能量 X 是衰减的实数性波函数,则在 $X-\theta$ 关系式中 θ 必须是复数,写成

$$\theta = iq \text{ 或 } \theta = \pi + iq,$$

这里 q 是实数. 从链中原子的差分方程求得 C_n . 将 C_2 或 C_3 代入界端原子的差分方程,最后获得

$$X = f_A(z_A, z_1, \gamma) \quad [\text{A型}(\gamma\text{-切断})];$$

$$X = f_B(z_B, z_1, \beta) \quad [\text{B型}(\beta\text{-切断})].$$

下面讨论几种特殊情形:

A型

(1) 设 z_1 是正的数值, $|z_A| \rightarrow \infty$. 此时界端原子的能级同链中原子能级差别极大. 界端原胞中两个原子的相互作用 β 又大于它同第二个

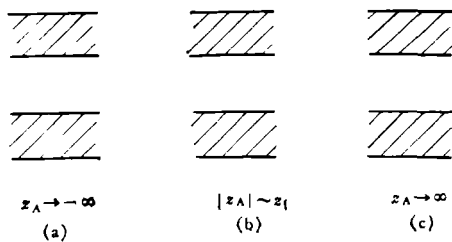


图 9

原胞邻接原子的相互作用,因而从能带中分离出两个能级,对应于界端原子的成键态和反键态. 如图 9 (a) 和 (c) 所示,一个能级在禁带中,另一个能级在能带的下方或上方.

(2) 设 z_1 是正数, $|z_A| \approx z_1$. 此时界端原

子能级同链内部的原子能级相近,没有能级产生,如图 9 (b) 所示. 这相当于分子晶体的情况,界端分子同链内分子无甚差别,所以没有表面能级.

B型

(1) 取 z_1 为正数, $|z_B| \rightarrow \infty$. 此时界端原子同链中原子保持弱的耦合,而界端原子能级变化又特别大,它的能级于是从能带中独立出来形成表面态,如图 10 (a) 和 (c) 所示. GaAs 晶体的(111)面是 Ga 离子晶面,平行此表面的第二层是 As 离子的晶面,它们交替排列. 另一端 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 面是 As 离子晶面,As 离子容易得到电子, Ga 离子容易失去电子,界端离子能级发生改变,分别相当于 (a) 和 (c) 的情况,在禁带中没有表面能级.

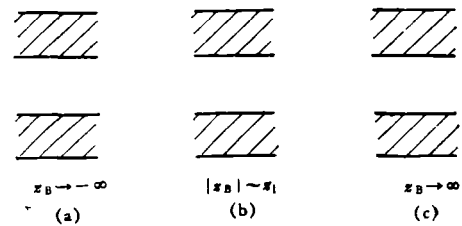


图 10

(2) z_1 为正数, $|z_B| \sim z_1$. 此时界端原子同链内部原子能级相近. 在界端因强耦合被切断,形成悬挂键. 它在禁带中产生一个定域态,如图 10 (b) 所示.

综上所述,界端原子的特性对表面态影响很大,而且并不是任何情况都会在禁带中引进定域态. 对于 A型或 B型界端,当 z_A 或 z_B 为其他数值时,情况比较复杂,读者可参考有关文献.

五、实际晶体的理想表面^[6-8]

实际晶体是三维的,情形比一维模型复杂. 晶体表面有二维的周期性,表面层内电子在二维周期性势场中运动. 电子的波函数是平面布洛赫波,以平面波矢 $k_{||}$ 表征. 设 oz 方向垂直表面向体内的方向,在此方向上周期场在表面

终断，因而在无限晶体的禁带中将出现表面能级 $E(\mathbf{k}_{\parallel})$ ，相应的波函数是迅衰波，写成

$$\psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}) \cdot u_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}_{\parallel}) \exp(-qz)$$

式中 $u_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}_{\parallel})$ 是平面周期函数。在 \mathbf{k}_{\parallel} 一定时，在禁带中究竟有没有表面态，有几个表面态，对此不能作一般的预言，因为这取决于表面区电子的具体势场。如果知道某个 \mathbf{k}_{\parallel} 值在禁带中存在一个表面态，人们可以跟踪 \mathbf{k}_{\parallel} 的变化，得到表面能态的色散关系 $E(\mathbf{k}_{\parallel})$ 。当然还要考虑在表面态电荷的分布，在表面区有多少电荷，在迅衰波的体内尾巴中有多少电荷。一般说，宽的禁带中央附近的表面能级，其波函数是高度集中于表面区；而窄禁带中的表面能级或靠近禁带边的表面能级，其波函数衰减很慢。当一个表面态的能量进入禁带边时，其波函数在表面的幅度慢慢减小，但不突然消失。

七十年代以来，人们开始对具体晶体的表面态进行详细计算，研究的对象有简单金属 (Na, Li 和 Al 等)，有半导体 (Ge, Si 和 GaAs 等)，还有过渡金属 (Cu, Ni, Fe, W, Mo 和 Nb 等)。例如图 11 是 Al(111) 表面在能量为 $E_s = E_F - 0.07R_y$ 的表面能级中的电荷分布。

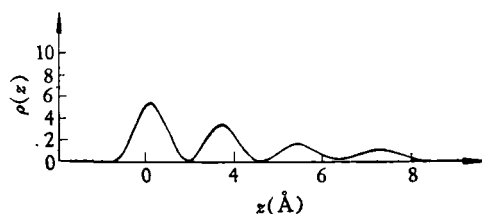


图 11

这个电荷分布是对平行表面的平面作平均后得到，这分布曲线显然具有迅衰波的特性。半导体硅由于它在技术上具有极大的重要性，对它的表面电子态的研究比较详细。根据表面态中电荷分布的情况，表面态又可细分成三种：

1. 表面悬键能级。电荷主要定域在表面原子的真空区一侧，相当于垂直表面方向的悬挂键。

2. 表面桥键能级。电荷主要定域在表面相邻两个原子之间，形成桥状的联结。

物理

3. 背向键表面能级。电荷主要定域在表面第一层和第二层原子之间，所以称为背向键。一般说这种表面能级比前两种能量低得多。

关于过渡金属表面态，由于存在 d 电子而增添了复杂性。但其基本特征同上述情况类似。例如，体心立方结构的 Nb 其 (001) 表面有五个表面态，在费密能级以下有两个定域表面态，能量最低的一个表面态，电荷定域在第二层原子；另一个能量略高的表面态，电荷分布延伸到第二层，像背向键。在费密能级之上有三个表面态，能量最高的是悬挂键的表面能级。另外两个能级相近，是不同形式的桥键态。

如果涉及散射问题，还可能存在着另一种情形，即所谓表面共振态。这种态也有固定的波矢，而能量则处在许可的能带之内。这是一种散射态，它的波函数在表面上有较大的幅度，但在体内不呈指数衰减，而显示振荡的行为。这种状态的物理意义是，具有适当能量的布洛赫波的电子射入表面区，在表面势场的作用下，被表面“俘获”处于表面共振态，等待一段时间之后，它又可回到另一个体内布洛赫状态。所以这是共振散射的过程，在表面共振态的电子不能永远处于这个状态，它具有一定的寿命。故共振态是具有一定宽度的能态。

当然，在超高真空条件下解理的晶体也不一定保持原来晶面上原子的排列，在表面的原子位置有弛豫或发生重构。因此，深入研究表面电子态必须考虑不同对象的实际情形。

六、表面空间电荷区^[9]

以上介绍的都是表面原子尺度上势场产生的定域的电子态。对于金属表面，历来还有另一种描述，金属的价电子组成自由电子气。对于有界金属晶体，不论在体内的还是在表面的原子，如果它们的原子势场都同无限晶体中原子势场一模一样，如图 12(a) 所示。电子气充填到费密能级 E_F 。在晶体外无限远是真空

1) R_y 为能量单位， $R_y = 13.6$ 电子伏特。

七、表面等离子体振荡^[9,10]

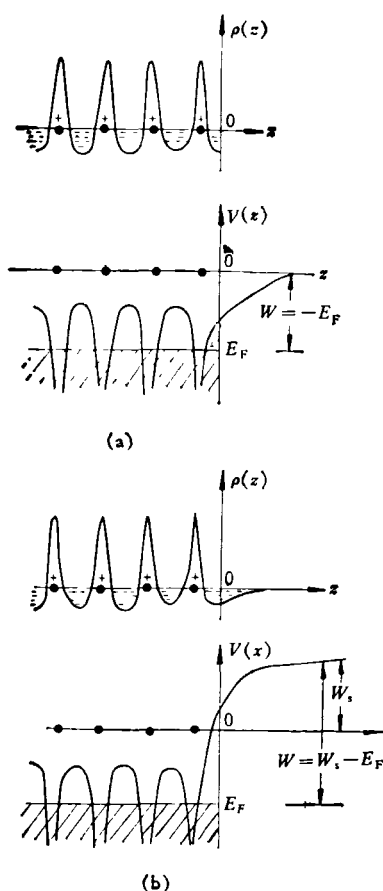


图 12

中电子的最低能量，取为能量零点。因此晶体
内电子离开金属必须做功

$$W = -E_F.$$

然而，实际上表面原子的势场发生改变，在那
里聚集较多的电子，电子的分布延伸到真空区。
聚集于表面的电子产生可观的电场，当电子穿
过表面层离开金属时必须克服此电场做功 W_s 。
 W_s 的数值由表面层的电子密度分布决定，而此
分布又取决于电势。通常表面电荷分布同无限
晶体中电荷分布之差即电荷的畸变分布可用宏
观的表面偶极子密度代表。这个电荷畸变分布
的表面层称为“双层” (double layer)，如图 12
(b) 所示。电子从体内离开金属的脱出功 W 必
须加上克服表面电子密度分布的电场做的功
 W_s ，即

$$W = -E_F + W_s.$$

前面讨论的电子态是单电子的状态，而电
子之间有库仑相互作用，这种作用又是长程的。
这意味着一个电子不仅同邻近的电子有互作
用，还对离它相当远的电子也有作用。因而电
子的运动不是各自独立的，会存在某种形式的
集体运动。如晶体中电子的分布有涨落，不能
到处保持电中性条件，显然就有宏观电场存在。
设某处电子密度增多，宏观电场必使该处电
子电荷密度减小，恢复电中性条件。可是在电
场作用下电子获得速度，势必冲出该位置在相
反的方向发生电荷密度增多。这样，电场的作
用很象弹簧的弹性力，在空间电子电荷密度增
减消长形成纵向振荡。这就是有相互作用的电
子气的等离子体振荡。

现在求振荡的频率。电子平均密度为 $\rho_0 =$
 $-ne$ ， n 是单位体积中的电子数。设想金属正
离子是均匀分布的正电荷胶体，其密度为 $|\rho_0|$ ，
在空间固定不动。电子的实际密度分布为 ρ ，
它应满足电荷守恒定律。在单位体积内电荷
密度增量 $\partial\rho/\partial t$ ，必须等于流进这体积内的电荷
 $-\text{div}(\rho\mathbf{v})$ ，这里 \mathbf{v} 是电子电荷的速度，即

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \text{div}(\rho\mathbf{v}) = 0.$$

如果 ρ 偏离平均值 ρ_0 不太大，上式可近似写成

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho_0 \text{div}\mathbf{v} = 0,$$

再对时间 t 求导数，得

$$\frac{\partial^2\rho}{\partial t^2} + \rho_0 \text{div}\left(\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t}\right) = 0.$$

利用运动方程

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E}$$

以及高斯方程

$$\text{div}\mathbf{E} = -4\pi(\rho - \rho_0),$$

最后得到

$$\frac{\partial^2(\rho - \rho_0)}{\partial t^2} + \frac{4\pi n e^2}{m}(\rho - \rho_0) = 0.$$

这说明电子电荷密度的涨落表现为简谐振荡，

其频率为 $\omega_p = (4\pi n e^2/m)^{1/2}$ 。必须注意, 这种振荡不是单电子的行为, 而是有相互作用的电子气的集体振荡。这种振荡就是频率为 ω_p 的电荷密度波。

在金属表面, 二维的电子气也可能在沿平面某一方向发生密度涨落, 产生宏观的表面电场。这电场阻止涨落扩大, 却又导致在相反方向复制新的涨落, 电场也随之倒向。于是电荷密度涨落往复循环, 形成表面等离子体振荡。它可写成

$$\rho - \rho_0 = A \delta(z) \cos(kx - \omega t),$$

式中 A 是振荡的幅度, δ 函数表示电荷是在 $z = 0$ 表面发生振荡。同此, 与电荷分布相适应的电势为

$$\varphi_s = B \cos(kx - \omega t) \cdot \exp(-kz) \quad (\text{当 } z > 0),$$

$$\varphi_0 = B \cos(kx - \omega t) \cdot \exp(kz) \quad (\text{当 } z < 0).$$

在表面 $z = 0$ 处, 电场的切向分量必须连续, 即

$$E_{xi}(z=0) = E_{x0}(z=0)$$

同时, 电位移矢量的法向分量也必须连续, 即

$$\epsilon(\omega) E_{zi}(z=0) = E_{z0}(z=0).$$

根据这些边界条件, 得到金属在该频率 ω 的介电常数

$$\epsilon(\omega) = -1.$$

而金属电子气产生的介电常数(依赖于 ω) 为

$$\epsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2,$$

因此表面等离子体振荡频率是

$$\omega_s = \omega_p / \sqrt{2}.$$

如果考虑到金属离子对介电常数的贡献 ϵ_L , 表面等离子体振荡频率 ω_s 写成

$$\omega_s = \omega_p [\epsilon_L / (\epsilon_L + 1)]^{-1/2}.$$

如果在金属表面有吸附物时, ϵ_L 将发生变化,

因而关于表面等离子体振荡的研究已成为了解金属表面吸附层的方法。应当说, 不但在金属, 而且在半导体表面也存在表面等离子体振荡。表面等离子体振荡也依赖于波矢, 图 13 是实验上测量获得的 InSb 的表面等离子体振荡的色散关系, 实线是理论曲线。

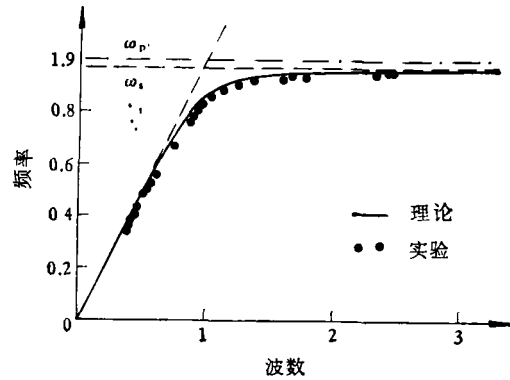


图 13

谢希德教授审读了文稿, 并提了建议, 笔者对此表示感谢。

参 考 文 献

- [1] R. de L. Kronig, W. G. Penney, *Proc. Roy. Soc. A*, **130** (1931), 499.
- [2] I. Tamm, *Z. Phys.*, **76** (1932), 849.
- [3] W. Shockley, *Phys. Rev.*, **56** (1939), 317.
- [4] S. G. Davison, J. D. Levine, *Solid State Phys.*, Vol. 25, Ed. by H. Ehrenreich, New York, Academic Pr., (1970), 29.
- [5] 植村泰忠, *固体物理*, **7-5**(1972), 270; **7-6**(1972), 326.
- [6] J. A. Appelbaum, *Surface Physics of Materials*, Vol. 1, Ed. by J. M. Blakely, Academic, New York, (1975), 79.
- [7] J. A. Appelbaum, D. R. Hamann, *Rev. Mod. Phys.*, **48-3** (1976), 479.
- [8] Steven G. Louie et al., *Phys. Rev. B*, **15-12** (1977), 5627.
- [9] H. E. Hall, *Solid State Physics*, (1977), 219.
- [10] N. Marschall, B. Fischer, H. J. Queisser, *Phys. Rev. Lett.*, **27-2** (1971), 95.