

話題

真空レベル —物理の立場から—

白石 賢二

NTT基礎研究所

〒243-01 厚木市森の里若宮3-1

本誌で連載された「電子分光における仕事関数」における議論で展開されているように仕事関数を議論する際に用いられている「真空レベル」の意味が各専門分野で異なっていることが指摘されています。本稿では物理の世界で用いられている「真空レベル」を中心に私なりの考えを簡単に述べさせていただきます。

仕事関数 ϕ_{work} は電子分光の世界では「真空レベル」 ϕ_{vacuum} とフェルミレベル E_F の差

$$\phi_{\text{work}} = \phi_{\text{vacuum}} - E_F \quad (1)$$

で与えられることが知られています。

一方、物理の教科書で普通に用いられている「真空レベル」は電子を試料から無限に遠ざけ、相互作用しなくなったときの電子のポテンシャルを意味します。従って物理の世界では「真空レベル」とは普遍的なもので場所的な差は絶対にあってはならないものです。この定義に従うと、2種類の金属を接触させてフェルミレベルを一致させたときに真空レベル ϕ_{vacuum} もフェルミ準位 E_F も一意的に定まってしまうこととなります。このため式(1)の定義を用いる限り、2種類の金属の仕事関数が接触したとたんに同一になってしまうというパラドックスが生じます。

このパラドックスが生じる理由を簡単な具体例を用いて説明してみましよう。簡単のため仕事関数 ϕ_{work} を物質固有の寄与 $\phi_{\text{intrinsic}}$ と表面での電荷再配列によって誘起される電荷二重層の寄与 ϕ_{dipole} の2つに分けることができます(式2)。図1に模式図を示します。

$$\phi_{\text{work}} = \phi_{\text{intrinsic}} + \phi_{\text{dipole}} \quad (2)$$

有限の大きさの表面を有する試料があったとします。電子分光の「真空レベル」は $\phi_{\text{work}} + E_F = \phi_{\text{intrinsic}} + \phi_{\text{dipole}} + E_F$ で与えられます。乃ち、電子分光の「真空レベル」は ϕ_{dipole} の寄与をあらわに含んだ形式になっており、表面近傍での ϕ_{dipole} の値を用いて定義されています。このため、たとえ2種類の金属が接触して E_F が系全体で同一のものになっても「真空レベル」は各々の金属によって異なることとなります。

一方、物理の「真空レベル」の定義に従うと状況は異なってきます。すなわち電荷二重層がつくり出すポテンシャルの寄与 ϕ_{dipole} が電子が無限遠に離れると0になってしまい、物質固有の寄与 $\phi_{\text{intrinsic}} + E_F$ だけが残るからです。このように物理の定義の「真空レベル」は $\phi_{\text{intrinsic}}$ にだけ依存することになり、 ϕ_{dipole} の効果を全く含まないのです。この定義の「真空レベル」を用いて仕事関数を求めると、2種類の金属が接触して E_F が2種類の金属で同一になったとたんに仕事関数が場所に依存しない定数になってしまうパラドックスが生じるのです。

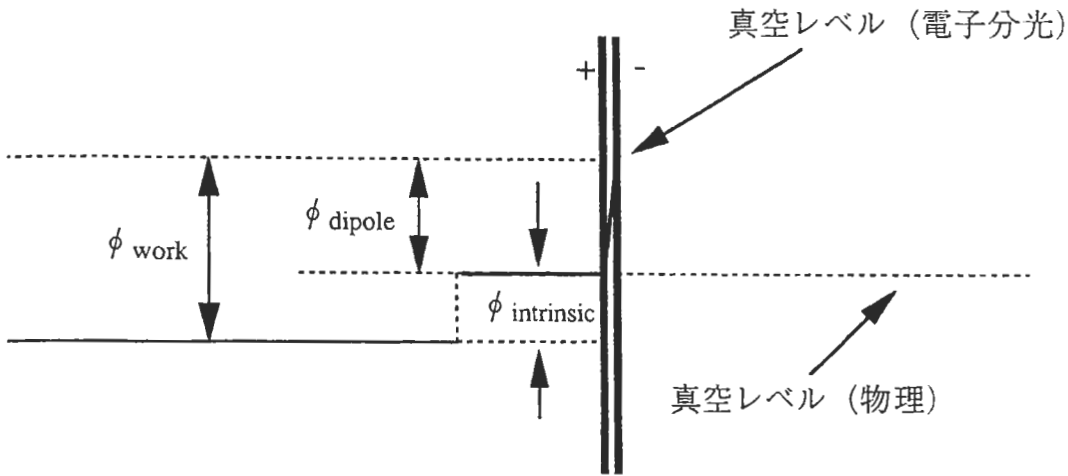


図1：有限の大きさの表面に対するエネルギー準位のダイアグラム

ちなみに、無限に大きな均一な表面を考える場合に限り、物理と電子分光の世界の「真空レベル」は同等になります。

図2に模式図を示します。表面が無限に大きいときには電子が表面から無限に離れても電子のポテンシャルは一定で全く変化しません。無限に大きい平板が作る電場は平板からの距離によらず一定であるという電磁気学からの帰結があるからです。乃ち、無限に大きい表面に対しては、 ϕ_{dipole} が表面近傍においても無限遠においても同じ定数になるのです。この場合には物理と電子分光の双方の定義において「真空レベル」が同等になります。

多くの表面物理の教科書にはこの「無限に大きな表面」を例にとって仕事関数と「真空レベル」の説明がなされています。この例が出されていることによって各専門分野によって「真空レベル」の定義が異なる難しさを読者が認識しないで済んでしまっていることが、かえって本誌で行われた一連の議論のような混乱を招く一因となっているのかもしれませんが。

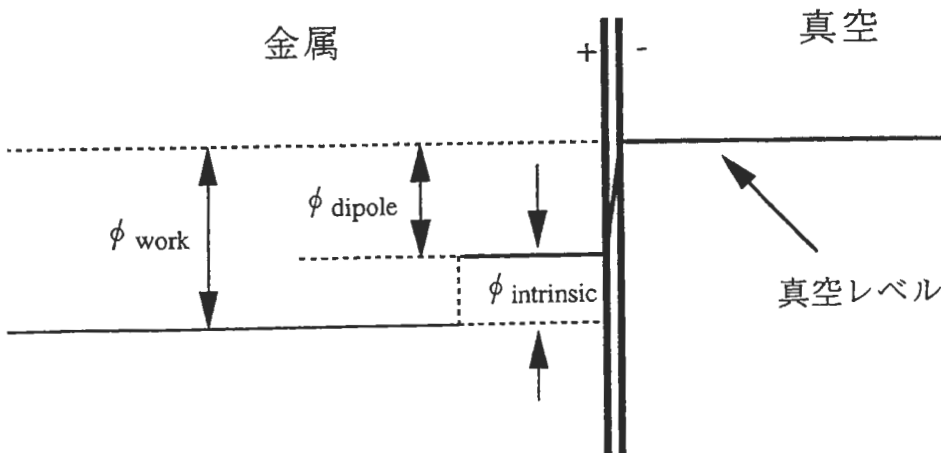


図2：無限に大きな表面に対するエネルギー準位のダイアグラム