The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	固体表面における単原子吸着層の電子状態に関する研究
Author(s)	六田, 嘉明
Citation	大阪大学, 1977, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/31995
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【31】

氏名・(本籍)	六田嘉明（むだよしあき）
学位の種類	工学博士
学位記番号	第 4048 号
学位授与の日付	昭和52年8月25日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当
学位論文題目	**固体表面における単原子吸着層の電子状態に関する研究**
論文審査委員	(主査) 教授 塙 輝雄 (副査) 教授 中井 順吉　教授 中村 勝吾

論文内容の要旨

本論文は固体表面における原子・分子の吸着現象に関する基礎的知見を得る目的で，吸着原子層の電子状態，吸着原子間の相互作用および吸普原子の磁気的状態について理論的解析を行ったもので，七章より構成されている。

第1章では，固体表面の電子状態に関する研究の歴史的な発展を概観し本研究の目的，意義を明らかにしている。

第2章では，固体表面の電子状態解析を行うために必要な非直交関数系による第二量子化法の一般論を述べている。

第3章では，金属表面へ吸着した原子間に生じる相互作用に関する電子状態論を述べ，吸着原子間に働らく反撥的相互作用の機構として，交換相互作用による反撥力の機構を提案し，W(100)面上の水素原子に関する計算を行い，従来明らかにされていなかった金属の(100)面に出現する特徴的な吸着構造の形成機構が交換反撥相互作用によって説明可能なことを述べている。

第4章では，吸着原子間の相互作用が吸着原子の電子状態に及ぼす効果について解析し，さらに，低速電子線回折や光電子放出によって得られている実験結果に対する解釈を試み，W(100)面上の水素原子のβ_2状態とβ_1状態は，それぞれ，常磁性的吸着状態と強磁性的吸着状態に相当すると推論し，さらに，二状態間の転移は本論文で述べた吸着原子間の直接的相互作用に起因していると考えられることを述べている。

第5章では，従来研究されていなかった規則構造をもつ吸着層の電子状態を調べるために，グリーン関数による計算法について述べている。この方法は，有限モーメント法その他の方法と異なり，状

態密度のファン・ホーブ特異性を正しく与えることができる。

第6章では，第5章で述べた方法を用いて，簡単な規則吸着構造模型に対して表面電子状態密度を計算し，規則構造をもつ吸着層には特有の非結合型表面準位が存在することを明らかにしている。非結合型表面準位は，原子配列の対称性により生じ，二次元ブリルアンゾーンの境界で発生すること，および，そのエネルギーは縮退しているために吸着層のバンドにピークを形成することを示している。このピークは，一次元バンドのバンド端と同様なファン・ホーブ特異性を示す。

第7章では，本研究の結果を総括し，本研究の結論を述べている。

論文の審査結果の要旨

本論文は結晶表面における吸着原子層の電子状態に関する理論的研究をまとめたものである。

吸着原子層の構造，電子状態等を理解しようとするとき下地との相互作用以外に吸着原子間の相互作用をも考慮せねばならない。下地結晶の自由電子を介する間接的な吸着原子間の相互作用はすでに報告されているが，直接相互作用は未だ調べられていない。それは基底に用いる原子軌道関数の非直交性という厄介な問題があるためである。著者はこの問題に対処するため非直交関数系による第二量子化の方法を提案し，W (100) 面上の吸着水素系を解析した。計算の結果，この系は常磁性的な吸着状態以外に強磁性状態をとり得ることが示された。

超格子構造をとる吸着層の電子状態は興味ある問題であるが未だ殆んど研究されていない。著者はグリーン関数法をこの問題に適用し，若干の系に対して表面グリーン関数を解析的に与え得る計算方法を工夫した。いちじるしい結果は規則構造をもつ吸着層には下地との相互作用の無い非結合型の電子準位が存在することである。またいくつかのモデル計算により吸着構造は吸着層の電子状態に極めて大きな影響を及ぼすことを示している。

以上のように本論文は吸着層の電子状態に対し，これを具体的に計算する方法を示すと共に，いくつかの新らしい知見を与えている。これらは電子工学の中心課題の一つである表面，界面の電子現象の解明に重要な手がかりを与えるもので電子工学の発展に寄与するところ大である。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。