The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	d-金属の電子状態
Author(s)	寺倉, 郁子
Citation	大阪大学, 1982, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/33416
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

【12】

氏名・(本籍)	寺倉郁子（てらくら いくこ）
学位の種類	工学博士
学位記番号	第 5706 号
学位授与の日付	昭和57年4月22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	**d－金属の電子状態**
論文審査委員	(主査) 教授 犬石 嘉雄
	教授 木下 仁志　教授 山中千代衛　教授 藤井・克彦
	教授 鈴木 胖　教授 横山 昌弘　教授 中井 貞雄
	教授 井本 正介　教授 中村 勝吾　教授 庄司 一郎

論文内容の要旨

d－金属（遷移金属及び貴金属）は，物を作る材料としてばかりでなく触媒としても広く使われており，工業的に非常に重要な物質であって，その表面及び内部電子状態についての基礎的な知識の集積は工学的に大変重要な意味を持つものであり，ここではそれについて調べている。

まず序論では本論文の学問的位置づけを行なっている。

第一部ではbcc及びfcc遷移金属の表面のd電子の状態を薄膜を用いてタイト・バインディング近似で調べている。その結果bcc構造では，この近似がかなり良い近似であることが分かり，又表面では電子状態密度は，1）バンド幅が狭くなること，2）バンドの中央に表面状態に基づく鋭いピークが現われることがあること，3）対称性の低下から縮退が解けることを示している。fcc構造では自己無撞着な計算が必須であるとしている。

第二部では，Mo及びWの(001)表面で室温以下で表面原子が再配列する現象及び表面の緩和現象について調べている。表面原子が変位した時のバンドエネルギーの減少分を，クラスターを用い，タイトバインディング近似で，リカージョン法を適用して求めている。又斥力ポテンシャルとしてはボルン・メーヤー型を仮定し，原子変位に対する斥力ポテンシャルの変化を求めている。この2つのエネルギー変化のバランスから，デーブとキングが提唱したモデル（原子蛮位は表面内[110]方向のc(2×2）構造）が安定であることを導き，変位の大きさも実測値と良く合う結果を得ている。又表面で緩和が起きることを示し，これらの現象の電子論的起源を明らかにしている。

第三部ではd－金属(V, Fe, Ni, Cu及びAg)のK帯のX線放出スペクトルについて調べている。Cuについては，第二のピークの存在の有無が議論され，又そのスペクトルに対して種々の解釈が提唱

されていたが，ここでは第二のピークが存在し，又そのスペクトルは双極子遷移によって解釈できることを示している。又，V，Fe及びNiに対してもスペクトルの起源は双極子遷移が支配的役割を果たしていることを示している。Agについては双極子遷移のみの場合に得られるスペクトルを求めている。

結論では以上得られた結果を総括している。

論文の審査結果の要旨

遷移金属や貴金属(d－金属)は最近半導体集積回路の電極や配線に多量に使用されるようになったが，化学工業の分野では触媒として古くから用いられている。現在，半導体集積回路技術のかかえている困難な課題の一つは，これらの金属と半導体界面の電子状態の解明である。

本研究ではこのような要請を背景にしてd－金属の表面及び内部の電子状態を理論的に追究し，これまでの実験結果と比較検討したもので多くの新知見を得ている。主なものをあげると，

i）遷移金属の薄膜のd電子状態をタイト・バインデング近似のバンド理論で計算し，バルクでは2つに分かれているdバンドの中央に表面状態に基づく鋭いピークが現われることを見出し，これが表面電子物性に重要な影響を与えることを指摘している。また，この表面状態のピークは表面から数層で消失すること，bcc金属ではこの方法がよい近似を与えることを見出している。

ii）実験的に知られているMo及びWの(001)表面での原子再配列現象を表面原子の変位によるバンド・エネルギーの減少と原子間斥力ポテンシャルの増加との釣り合いとして理論的にとりあつかいデーブとキングの提唱したモデル〔C(2×2)構造〕が安定であることを導き，実測値とよく合う変位の大きさを得ている。

iii）d－金属のK帯X線放出スペクトルをバンド理論から求め実測値とよく合う結果を得ている。またCuのK放出スペクトルに観測される2つのピークはd－バンドの影響を受けた4P電子の双極子遷移で説明できることを明らかにしている。

以上述べたように本論文は半導体素子製造上，重要な遷移金属の界面電子状態に対する基礎的な新知見を与えており，電気物性工学に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。