

Title	W (001) 表面の再構成と吸着の効果の理論
Author(s)	稲岡, 毅
Citation	大阪大学, 1985, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/34708
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、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について <a>〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

氏名・(本籍)	い 稲	おか 岡	たけし 毅
学位の種類	工	学	博 士
学位記番号	第	6 8 8 4	号
学位授与の日付	昭和 60 年 3 月 25 日		
学位授与の要件	基礎工学研究科 物理系専攻 学位規則第 5 条第 1 項該当		
学位論文題目	W(001) 表面の再構成と吸着の効果の理論		
論文審査委員	(主査) 教授	吉森 昭夫	
	(副査) 教授	中村 伝	教授 藤田 英一 助教授 張 紀久夫

論 文 内 容 の 要 旨

タングステン(001)表面は室温以下で表面原子の変位に基づく再構成を形成し、水素を吸着させる
と被覆度の変化に応じて吸着水素原子が表面原子の変位に著しい影響を与えることがわかっている。さら
に他種の吸着原子についても、吸着原子が再構成表面の構造変化を引き起こすことを示唆する実験結
果が得られており、こうした再構成に及ぼす吸着の効果は今後さまざまな系に見い出されることが予想
される。タングステン(001)表面再構成を記述する秩序パラメーターを定め、表面タングステン原子
と吸着原子間に働く相互作用(W-A相互作用)を通じて吸着原子が再構成に及ぼす機構、効果につい
て研究を行なった。この機構を研究することは広く一般的に再構成に及ぼす吸着の効果を解明してい
くうえできわめて重要であると考えられる。さらに吸着水素が再構成に及ぼす効果を如実に反映してい
ると考えられる水素の昇温脱離スペクトル、電子エネルギー損失分光による吸着水素の振動数測定の実験
結果も解析した。

タングステン(001)表面の再構成にあずかる、表面に局在した変位モードを格子力学的手法及び系
の対称性の考察により解析し、変位モードの振幅を秩序パラメーターとする再構成清浄表面のギンツ
ブルグーランダウ(GL)型自由エネルギー汎関数を構成した。清浄表面の整合再構成が吸着の効果によ
って不整合再構成に移る整合-不整合転移を平均場近似の範囲で3種類の吸着位置に対して調べた。W-
A相互作用は整合相を取ろうとする清浄表面の傾向と競合して不整合相を有利にする効果、しかも異方
的な効果を持つことが見い出された。この効果は水素や窒素などを吸着させると低エネルギー電子線回
折像の半整数スポットが特定の方向に分離したりストリーク状に変化したりする現象と関連する可能性
がある。

特に水素吸着の場合について系の自由エネルギーを揺らぎの効果を取り入れる近似を用いて計算した。自由エネルギーはタングステン-水素間相互作用の効果を取り込んだGL型の自由エネルギー汎関数の汎関数積分の形で表され、これを変分法によって計算した。この結果を昇温脱離スペクトル(TDS)と吸着水素の対称モード振動数(ω_s)の被覆度依存性の実験結果の解析に用いた。実験で得られているTDSの特徴を十分に再現することができ、また同じパラメーターの値を用いて ω_s の被覆度依存性についても実験とのかなり良い一致を得た。

論文の審査結果の要旨

タングステン結晶(W)の(100)表面は室温で表面原子の変位による再構成転移をする。この再構成は水素などの吸着により著しい影響を受けることが知られており、豊富な実験的研究がなされている。

申請者は清浄表面の再構成を記述する自由エネルギー汎関数の形を実験事実及び表面格子振動の不安定性の考察から定め、従来提唱されていた吸着原子と再構成表面との相互作用を全被覆度領域で成立するように拡張し、この表面・吸着原子系の状態和の汎関数積分表式を得た。2次元系では重要であるゆらぎの効果を取入れた近似を用いてこの積分を遂行し、結果を用いて満足すべき説明がなされていなかったW(100)表面に吸着した水素の昇温脱離スペクトルを、吸着水素の被覆度で定まる表面再構成の変化によるものとして説明し、同時に吸着水素原子の振動数の被覆度依存性も説明した。またW(100)表面再構成への吸着原子の影響の吸着位置による差異についても考察している。

以上本論文は表面・吸着原子系で重要な吸着原子誘起再構成の機構について新しい知見と指針を与えており、学位論文の価値あるものと認める。