

Title	走査トンネル顕微鏡によって誘起される金属表面上の吸着分子のダイナミクスに関する理論的研究
Author(s)	長谷川, 和彦
Citation	大阪大学, 2002, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/43436
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	長谷川 和彦
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第 17005 号
学位授与年月日	平成14年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科応用物理学専攻
学位論文名	走査トンネル顕微鏡によって誘起される金属表面上の吸着分子のダイナミクスに関する理論的研究
論文審査委員	(主査) 教授 笠井 秀明 (副査) 教授 岩崎 裕 教授 萩行 正憲 助教授 森田 浩 講師 菅 誠一郎

論文内容の要旨

本論文は、走査トンネル顕微鏡 (STM) によって誘起される固体表面上の原子や分子のダイナミクスのメカニズムを微視的な立場から解明することを目的として、STM によって誘起される金属表面上の吸着分子のダイナミクスを理論的に研究した成果をまとめたものであり、以下の6章から構成されている。

第1章では、STM によって誘起される固体表面上の原子や分子のダイナミクスに関する研究を概観して、STM によって誘起される Cu(111) 表面上の CO のダイナミクスに関する実験を紹介した。さらに、この CO のダイナミクスを微視的な立場から説明するためには、STM 探針からトンネルする電子による電子系の状態遷移が同時に CO の運動状態の変化を伴うと捉えることが必要であることを指摘した。

第2章では、CO と Cu(111) 表面との間の振動状態を決めるためにトランケイテッド調和振動子ポテンシャルを用い、STM 探針からトンネルする電子が、CO の局在軌道を占有した後、金属へトンネルするときに誘起される Cu(111) 表面からの CO の脱離を記述するモデルを提案した。このモデルを使って、脱離確率の飽和値に達するまでの時間の CO の局在軌道の寿命幅依存性を明らかにした。

第3章では、第2章で用いたポテンシャルをモース・ポテンシャルとして、STM 探針からトンネルする電子が、CO の局在軌道を占有した後、金属へトンネルするときに誘起される Cu(111) 表面からの CO の脱離を記述するモデルを提案した。Cu(111) 表面上の CO の吸着エネルギーなどこのモデルに含まれるパラメーターに実験から推定される値を用いて、実験で測定される脱離確率ばかりでなく、同位体効果も再現した。さらに、脱離 CO の並進運動エネルギー分布を明らかにした。

第4章では、第2章、第3章で提案したモデルを拡張して、STM によって誘起される Cu(100) 表面上でのアセチレンの回転を記述するモデルを提案した。密度汎関数法に基づく計算結果から推定されるアセチレンの C-H 伸縮振動と束縛回転モードとの結合を考慮し、実験で測定される回転確率を再現した。

第5章では、第4章で提案したモデルを、STM によって誘起される Cu(100) 表面上のアセチレンの解離に適用し、実験で測定される解離確率を再現した。

第6章では、各章で得られた結果を総括し、本研究を基に STM による原子や分子の操作理論を展開させることなどの今後の研究課題を述べた。

論文審査の結果の要旨

電子系の状態遷移と固体表面上の吸着原子や分子の運動状態の変化が絡むダイナミクスを微視的な立場から解明することは、多様な固体表面上の原子や分子のダイナミクスを微視的な立場から理解する上で、大変重要な研究課題である。本論文では、このダイナミクスの中でも、STMによって誘起される金属表面上の吸着分子のダイナミクスに注目し、これを理論的に研究した成果をまとめている。本研究の主な成果を要約すると次の通りである。

- (1)STMによって誘起されるCu(111)表面上のCOのダイナミクスを微視的な立場から説明するためには、STM探針からトンネルする電子による電子系の状態遷移が同時にCOの運動状態の変化を伴うと捉えることが必要であることを指摘し、STM探針からトンネルする電子が、COの局在軌道を占有した後、金属へトンネルするときに誘起されるCu(111)表面からのCOの脱離を記述するモデルを提案している。このモデルを用いて、脱離確率が飽和値に達する時間が示すCOの局在軌道寿命幅依存性を明らかにしている。さらに、Cu(111)表面上のCOの吸着エネルギーや振動エネルギーなどこのモデルに含まれるパラメーターに実験から推定される値を用いて、実験で測定される脱離確率を再現しているばかりでなく、同位体効果も再現している。また、脱離COの並進運動エネルギー分布を明らかにしている。
- (2)STM探針からトンネルする電子が、COの局在軌道を占有した後、金属へトンネルするときに誘起されるCu(111)表面からのCOの脱離を記述するモデルを拡張して、STMによって誘起されるCu(100)表面上でのアセチレンの回転を記述するモデルを提案している。密度汎関数法に基づく計算結果から推定されるアセチレンのC-H伸縮振動と束縛回転モードとの結合を考慮して、実験で測定される回転確率を再現している。
- (3)STMによって誘起されるCu(100)表面上でのアセチレンの回転を記述するモデルを、STMによって誘起されるCu(100)表面上のアセチレンの解離に適用し、実験で測定される解離確率を再現している。

以上のように、本論文は、STMによって誘起される金属表面上の吸着分子のダイナミクスを微視的な立場から調べたもので、基礎的な面ばかりでなく、応用の面においても有益な知見を得ており、応用物理学、特に、理論物性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があるものと認める。