

Title	Correlation Function of Surface Systems with Dipole-Dipole Interaction
Author(s)	垣谷, 公德
Citation	
Issue Date	
Text Version	ETD
URL	<a href="https://doi.org/10.11501/3054388">https://doi.org/10.11501/3054388</a>
DOI	10.11501/3054388
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

氏名・(本籍)	かき垣 谷 公 徳
学位の種類	工 学 博 士
学位記番号	第 9773 号
学位授与の日付	平成3年3月26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	Correlation Function of Surface Systems with Dipole-Dipole Interaction (電気双極子間相互作用をもつ表面系の相関関数)
論文審査委員	(主査) 教授 吉森 昭夫 (副査) 教授 朝山 邦輔 教授 菅 滋正

### 論 文 内 容 の 要 旨

固体表面上における電気双極子間相互作用の統計力学的な取扱いは、その影響が遠方まで及ぶという性質から困難で、今まであまり理論的解析が行なわれていない。本論文では二つの双極子間相互作用が支配的であると想定される表面系に対し、その相関関数の理論的解析を行なった。

金属表面上にアルカリ金属原子が吸着した系に対しては、電気双極子間相互作用による斥力を仮定し高温展開法によって得られる自己無撞着な積分方程式を数値的に解くことにより、長距離秩序の無い高温相で低被覆率の場合、吸着原子の二体相関関数を計算した。実験によれば室温で低被覆率の領域では長距離秩序はないが、非常に強い短距離秩序状態が存在する。相関関数の計算結果はこれを再現し、その温度依存性や被覆率依存性は実験結果に対応している。

双極子間相互作用が重要であると考えられるもうひとつの例として、Si(100) 清浄表面の  $(2 \times 1)$  構造から  $c(4 \times 2)$  構造への相転移の解析を計算機実験によって行なった。この表面は最外層の Si 原子が形成する非対称二量体模型によるものと考えられ、これをイジングスピン模型で取扱う。相互作用としては双極子間相互作用と隣接スピン間相互作用の両方を仮定し、スピン間の相関関数を計算した。低速電子線回折の実験によって高温相に非常に異方的な短距離秩序があることが報告されているが、これについて実験との比較検討を行なった。双極子間相互作用はそれ自体非常に大きな異方性をもっており、計算機実験によって得られた相関関数は実験を定性的に説明することができる。

結論として双極子間相互作用が支配的であると想定される表面系の相関関数について、解析の手法として高温展開に基づく方法と計算機実験が有効であることを示し、二つの例について実験を説明する結果を得ることができた。

## 論文審査の結果の要旨

固体表面では金属表面でも遮蔽効果が完全でないため、電気双極子間相互作用が主要な相互作用である場合がある。双極子間相互作用はやや長距離に及ぶため、統計力学的な取扱いには、従来適当な近似がなかった。申請者はこの問題を取り上げ、先ず金属表面に希薄に吸着したアルカリ金属原子の系の短距離秩序についての理論を展開した。この系に対しては、双極子間相互作用が主要な相互作用であるとす、低速電子線回折による実験的な証拠がある。理論は高温展開から出発し、被覆度、二つの吸着子の位置の相関関数に対する展開級数を整理し、被覆度が低いところで成立すると思われる近似的な積分方程式を導いた。この積分方程式を導く仮定となった条件については、温度グリーン関数の方法及び液体論におけるカークウッドの方法を用いて確かめ、被覆度が低く、温度がある程度高ければよい近似になっていることを示した。次いでその条件を満たしている範囲内で数値的に積分方程式を解き、相関関数を求め、その温度変化、被覆度変化を明らかにした。この結果は電子線エネルギー損失分光の実験結果と良好な対応を示し、低速電子線回折の散漫散乱の精密な測定がなされれば、この表面系に重要な知見が得られることを示した。また通常適当でないと考えられている、このようなやや長距離に及ぶ相互作用系に対する、計算機実験も適切な工夫をして設定し、相関関数について、積分方程式の結果と一致する結果を得ている。さらにこの計算機実験の手法を、やはり電気双極子間相互作用が主要であると思われるシリコン(100)再構成表面に応用し、この表面再構成相転移の特に転移温度以上での短距離秩序について詳しい検討を行った。以上今まで未開拓であった固体表面における、双極子間相互作用が主要である系の統計力学的な解析の手法について重要な知見をもたらし、新しい応用の途を開いたものとして学位論文に値するものである。