

な二原子分子が吸着する際の電子状態や結合性などを調べた。

原子が表面に近づくとき、原子と金属表面の軌道との混成が起り、原子の s 軌道から金属への電子移行が起る。それと同時に、金属から部分的に空の p 軌道へ逆方向の移行が起る。合計の電荷移行の向きと大きさは原子のレベルと金属表面のエネルギーバンドの相対的な位置と空の p 軌道の状態の数によって決まる。また一般に d バンドの下に結合性軌道、 d バンドの上部から高いところに反結合性の軌道が分布する。元々の原子軌道のレベルが表面のバンドに比べて相対的に高くなると反結合性軌道に入る電子数が小さくなり、共有結合性が強くなる。

分子吸着の場合も同じような考え方で吸着機構を議論できる。この場合分子の軌道が変形するので少し複雑になるが、やはり分子軌道のレベルと金属表面のバンドとの相対的な位置と、空の π^* 軌道の状態の数によって吸着機構が決まる。

19. 侵入型化学吸着— N_2 / Ti(0001)系での cluster 計算—

東大物性研 新上和正, 大西橋平
分子研 塚田 健

通常化学吸着では、原子又は分子の平衡位置が金属の外側にある overlayer type に対して、金属の内側にもぐり込む underlayer type のものについて、2つの型の化学吸着の違いを解明するため、ここでは、DV-X α 法にもとづく cluster 計算を行なった。

N_2 /Ti(0001)系では、金属(Ti)の中に Nitrogen がもぐり込むことが見いだされている。もぐり込むことにどのようなことが生じるのかを調べるため、Ti に対して、Nの位置をいろいろかえ、その距離依存性に注目した。

計算の結果、Ti と N についての overlap population, orbital の energy level, Mulliken population total orbital の energy level ... etc. の諸量を得た。