

「固体表面及び吸着子の理論」研究会報告

上記研究会が1979年11月28日、29日、12月1日の3日間にわたり、基研に於て開催された。参加者は68名で、最初に予定されていた2階の室では狭く3階の大きな室に移り、全体としては活気のある話と討論がくりひろげられた。開催の趣旨は固体表面及び吸着子の電子状態、振動状態を含む原子の状態について、すでに活発に研究を進めているグループに、最近関心を持ち始めているグループを加え、理論を中心とした研究会を持ち、問題点を整理し、将来の課題を検討したいとことであつた。プログラムを次に記す。

11月29日

- | | | |
|-----------------------------|------|-----------|
| 1. Mo, W(001)面の原子配列・原子間隔の緩和 | 寺倉清之 | (東大物性研) |
| 2. バネモデルによる表面原子層の再構成 | 寺岡義博 | (阪府大総合科学) |
| 3. 固体表面の格子振動 | 松原武生 | (京大理) |
| 4. 合金表面での組成変化 | 馬越健次 | (阪大基礎工) |

11月30日

- | | | |
|------------------------------------|------|---------|
| 5. 結晶清浄表面の構造解析— Si(111) 7×7 表面構造 | 井野正三 | (東北大金研) |
| 6. 半導体表面の再構成と化学吸着 | 中村勝弘 | (東大物性研) |
| 7. Si(111) 2×1 再構成表面での原子配位と電子状態密度 | 星野敏春 | (阪大理) |
| 8. 結晶の表面再構成と電子構造 | 菅野 暁 | (東大物性研) |
| 9. 再構成表面の異方的電子線エネルギー損失 | 張紀久夫 | (阪大基礎工) |
| 10. 絶縁体(半導体)・金属の界面 | 興地斐男 | (阪大工) |
| 11. OS界面の微視的構造とMOS電子状態 | 中山正敏 | (九大教) |
| 12. 半導体表面の電子状態に対する表面緩和効果 | 西田昌彦 | (金沢工大) |
| 13. DV-X α 法による固体及び表面のバンド計算 | 里子允敏 | (分子研) |

「固体表面及び吸着子の理論」研究会報告

12月1日

14. 3d 遷移金属表面の電子スピン分極及び吸着の分極への効果
神原武志 (電通大)
15. 吸着原子の光電子放出における多体効果
山田耕作 (静大工短)
16. 吸着層の IC-IC, IC-C 転移
斯波弘行 (東大物性研)
17. ReO_3 の表面電子状態とオレフィンのメタセシス
塚田捷 (分子研)
18. Ni·Cu 上への原子・分子吸着のクラスター計算
足立裕彦 (阪大工)
19. 侵入型化学吸着 — $\text{N}_2/\text{T}_i(0001)$ 系での cluster 計算 —
新上和正, 大西橋平(東大物性研), 塚田捷(分子研)
20. Newns-Anderson モデルについての comments
吉森昭夫 (阪大基礎工)
21. 化学吸着の強結合理論
沢田信一 (京大理)
22. 相転移近傍での熱脱離異常
佐々田友平 (相模工大)
23. 二次元 sine-Gordon 系の相転移及び吸着系への応用
太田隆夫 (九大理)

以下は研究会中に各自書いて頂いた、上記プログラムのそれぞれの話の短い要旨である。早く原稿を集めることが出来たものの、短か過ぎるという面もあり、少しでもそれを補う意味で世話人の方で研究会の話題について印象を記すことにする。まず最近集中的に実験がなされている W(001)面の再構成の問題がある。清浄面についての実験及び理論によれば(プログラム 1, 2) (110) 方向に表面原子が C(2×2)構造をつくるよう変位しているという Debe-King モデルでよさそうである。高エネルギーイオンビーム散乱の実験結果も大体これを支持すると考えてよさそうである。ただ表面原子の半数だけが変位しているというイオン散乱からの結論は問題を残している。この W(001)面の水素吸着による再構成の多彩な変化もまた興味のある問題である。高エネルギーイオンビーム散乱は局所的ではあるが表面構造についての情報を得る補助手段としてなかなか有効であるという気がする。固体表面の格子振動については Self-consistent Einstein Model の有効性が印象に残った(3)。固体の融解が表面から始るとい最近の Pietronero の理論の紹介は大方の興味を引いたようである。合金の表面での組成変化については最近の Field Ion Microscope による実験結果はその信頼度の高さで注目に値するよう思われる(4)。

半導体表面の再構成についてはいくつかの話があった。特に昔からよく知られているかなり安定な Si(111) 7×7 表面について、RHEED回折強度の解析から得られた新しい再構成モデルの詳しい紹介があり(5)、この研究会の雰囲気をもり上げた。このモデルの正しさを裏付けるために、正三角形状に集った3箇の空孔のまわりの原子変位を理論的に計算し、回折強度の電子エネルギー依存性の実験と比較する計画も話された(6)。(5)の話では更に、Ge(111)面ではSnの吸着によってはじめて7×7が実現されること、この事実はSiの問題の解明に役立つそうであること、が指摘された。

Si(111) 2×1 表面についても、その理論的導出(7)、及びその微視的構造を実験的に決める方法(9)について興味ある話があった。極く最近迄、再構成面の理論的導出などの仕事が我が国で行われていなかったことを考えると、かなりの進歩である。Si(100) 2×1、4×2 表面についての理論的研究の最近の進歩についても紹介があった。我が国では分子研が中心になって、固体表面の微視的原子配列とその電子構造を self-consistent に算出しようとする計画が着々と進行している(13)。

吸着系に対する理論計算もこの数年の間に目ざましい進歩を見せた(18)。その結果、固体表面での触媒機構のモデルを大型の理論計算によって検討する段階に迄到っている(17)。

多体問題的な側面を持つ問題としては、絶縁体(半導体)・金属界面で絶縁体側のバンド・ギャップが閉じて金属的になる問題(10)、吸着子の光電効果の際の多体効果特に終状態での screening の問題(15)、化学吸着の強結合理論(21)があげられる。吸着層における IC-IC、IC-C転移の、平均場の近似内での非常にすっきりした話(16)と同様な問題の揺動の効果を sine-Gordon 系で繰込み群で議論した話も(23)も興味があった。

世話人 菅野 暁、長岡洋介、松原武生、
吉森昭夫 文責 菅野、吉森