

4. イオン吸着子系の相関関数

小 林 弘 明

アルカリ金属原子を Ni や Cu などの表面に吸着させると、アルカリ金属原子はイオン化し、それに伴う鏡像電荷とで、電気双極子を形成する。表面での電気双極子場は被覆度によって変化し、仕事関数や励起エネルギーの低下をもたらす。

アルカリ金属が吸着した Ni (100), Cu (100), Cu (111) 表面の仕事関数の測定と、電子エネルギー損失分光 (EELS) と紫外線光電子分光 (UPS) の解析から、アルカリ金属原子の ns 準位及び内殻準位の被覆度依存性を知ることができる。

この被覆度 θ 依存性は $\theta^{3/2}$ に比例することが知られている。こうしたイオン吸着子系の統計力学を考える。大正準集団で取り扱い、格子ガスモデルのハミルトニアンを用い、大分配関数と相関関数の高温展開を diagram の手法により行なう。

相関関数は被覆度が十分小さいとき、うまく部分和をとることができ、相関関数の展開式は近似的ではあるが、連立積分方程式の形にまとめることができた。これから、この系の秩序状態への転移温度を推測した。

実現すると思われる秩序状態は絶対零度で厳密に得られているものに近く、我々の近似的積分方程式および、その近似解法が悪くないことを示している。また、平均の双極子場の被覆度依存性あるいは温度依存性を議論し、実験との比較を試みる。