

氏名(本籍)	関場 大 一 郎 (東 京 都)
学位の種類	博 士 (理 学)
学位記番号	博 甲 第 2568 号
学位授与年月日	平成 13 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当
審査研究科	物理学研究科
学位論文題目	The Electronic Structures of the Oxygen Adsorbed Surface by Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy : Ag (110), Cu (100) and Rh (110) (角度分解光電子分光による酸素吸着表面の電子状態:Ag (110), Cu (100) and Rh (110))
主査	筑波大学教授 理学博士 舩 本 泰 章
副査	筑波大学教授 理学博士 押 山 淳
副査	筑波大学教授 理学博士 大 塚 洋 一
副査	筑波大学助教授 理学博士 中 村 潤 児

論 文 の 内 容 の 要 旨

本論文は角度分解光電子分光により酸素吸着金属表面の電子状態を研究したものである。

第一に, Ag (110) p (2x1) -O 表面に対し, 角度分解光電子分光により電子のエネルギー分散を求め tight-binding 計算と比較を行った。Ag (110) p (2x1) -O 表面は Ni (110) p (2x1) -O, Cu (110) p (2x1) -O 表面と構造的に相似の関係にあり, 表面の格子定数は Ni (110) p (2x1) -O, Cu (110) p (2x1) -O, Ag (110) p (2x1) -O の順に大きくなる。このように構造が変わらず, 格子定数だけ大きくなっていく 3 種類の金属と酸素の相互作用の変化を調べ, 最近接, 第二最近接にある金属原子-酸素原子間の相互作用, Slater-Koster 二中心積分パラメーターが原子間距離 r の関数として統一的に, $(sP \sigma) \propto r^{-2}$, $(pP \sigma)$, $(pP \pi)$, $(Pd \sigma)$, $(Pd \pi) \propto r^{-7/2}$ で表わせることを見出した (酸素原子の 2p 軌道を p で表記し, 金属原子の 5s, 5p, 4d 軌道をそれぞれ s , p , d で表記)。これは Harrison らが共有性固体で発見した関係 $(sP \sigma)$, $(pP \sigma)$, $(pP \pi) \propto r^{-2}$, $(Pd \sigma)$, $(Pd \pi) \propto r^{-7/2}$ とは異なる。

第二に Cu (100) $(2\sqrt{2} \times \sqrt{2}) R45^\circ$ -O 表面に対して角度分解光電子分光により電子のエネルギー分散を測定し tight-binding 計算と比較した。その結果, Cu (110) p (2x1) -O 表面の Slater-Koster パラメーターは Cu (100) $(2\sqrt{2} \times \sqrt{2}) R45^\circ$ -O の電子状態をよく再現した。ただし, O2p のオンサイトエネルギーだけは -3.9eV から -2.9eV に変更する必要があった。これは酸素原子から第二最近接の位置にある Cu 原子が 2 個から 4 個に増えたことを最も粗い近似で取り入れた結果であると推測される。

第三に, Rh (110) $(2 \times 2) p1mg$ -O 表面に対して角度分解光電子分光と tight-binding 計算を行った。計算と実験を比較した結果, 矛盾はないが, 計算で得られたバンドで, 実験で観測できなかったものがいくつかあった。これは実験において酸素に由来するピークが非常に弱く, かつ幅広かったためバンド分散を正確に決めることができなかったことによると考えられる。

以上のことから, 酸素吸着金属表面上での酸素原子と金属原子間の Slater-Koster パラメーターはほぼ原子間距離のみに依存することが明らかにされた。

審査の結果の要旨

本論文は Ag (110), Cu (100), Rh (110) の酸素吸着系を角度分解光電子分光法により実験的に電子のエネルギー分散を研究し, これと tight-binding 計算と比較検討することにより酸素吸着金属表面上での酸素と金属間の Slater-Koster 二中心積分パラメーターが原子間距離のみで表されることを明らかにしたものである。Ag, Cu, Rh 金属の酸素吸着系の電子状態を統一的に捉える視点を確立した点は高く評価できる。

よって, 著者は博士 (理学) の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。