

氏名(本籍)	相 ^{あい} 浦 ^{うら} 義 ^{よし} 弘 ^{ひろ} (福岡県)		
学位の種類	理学博士		
学位記番号	博甲第737号		
学位授与年月日	平成2年3月23日		
学位授与の要件	学位規則第5条第1項該当		
審査研究科	物理学研究科		
学位論文題目	Study of the Electronic Structure of Tungsten Surfaces by Angle Resolved Photoemission Spectroscopy (角度分解光電子分光法によるタングステン表面の電子構造)		
主査	筑波大学教授	理学博士	阿部 聖 仁
副査	筑波大学教授	理学博士	榎原 良 正
副査	筑波大学助教授	理学博士	福谷 博 仁
副査	筑波大学助教授	理学博士	舛本 泰 章

論 文 の 要 旨

金属の表面物性についての研究課題の中で、表面再構成の機構解明に特に強い関心が持たれている。タングステンの(100)表面は、室温以下で興味ある表面再構成を行うことが知られており、そのため多くの理論的、実験的研究がなされてきた。一方、(110)表面は、(100)表面より原子密度が大きく、表面再構成をしないとされてきた。しかし、1986年、(110)表面に水素を約1/2単原子層以上吸着させると、表面第1層の原子面がそれより下層の原子面に対して相対変位することが見出された。

本論文は、上述の水素吸着に伴って誘起される表面再構成についてその機構を電子論的な観点から解明することを目的としている。水素を吸着したタングステンの(110)表面には、低温で、i) 水素の吸着量 θ が0.5分子量(ML)以下の小さい値の場合には(再構成しないタングステン表面)+水素(1×2)超格子構造、ii) θ が0.5 ML以上に大きくなった場合(再構成したタングステン表面)+水素(2×2)超格子構造、及び室温以上で、iii) θ が0.5 ML以上で(再構成したタングステン表面)+水素無秩序状態になる3つの状態があることが知られている。

著者は、これら3つの状態の各々について角度分解光電子分光法を用いて電子状態を詳細に調べた。最初に清浄なタングステン(110)表面の電子状態について、まず既知の事実即ち、光電子は一次元的状態密度をもつので、その垂直放出スペクトルには顕著な分散は現れないことを確認した後、非垂直放出光電子スペクトルを観測し、このスペクトルは分散を示すことを明らかにした。更にこの分散は3次元バルク・バンドの射影としてよく説明できることを見出した。

さらに著者は上記3つの条件の下で水素吸着表面の観測を行い、水素吸着によるスペクトル変化について次に示す様な結果を得た。

- ① W 6 S 状態が主成分であり、6 ~ 9 eV の束縛エネルギーをもつ状態は、水素吸着により高い束縛エネルギー側へシフトする。シフト量は、 $\theta < 0.5\text{ML}$ の (1×2) 超格子構造の方が $\theta > 0.5\text{ML}$ の (2×2) 超格子構造より小さい。
- ② W 5 d 状態が主成分であり、約 5 eV の束縛エネルギーをもつ状態は、水素吸着により低束縛エネルギー側へシフトする。シフト量は①と同様 $\theta > 0.5\text{ML}$ の方が大きい。
- ③ 温度が室温以上で水素が無秩序に配列している場合と、低温で秩序的に配列している場合では電子状態の変化は殆どない。

等である。

著者はこれらの結果を、清浄表面のスペクトルが3次元バルク・バンドの射影で説明できることから、既に発表されている補間的 LCAO より各状態の波動関数を求め、それをを用いてタングステン-水素間の相互作用の大きさを見積もり、スペクトルの束縛エネルギーシフトを半定量的に説明することができた。更に、 (1×2) 及び (2×2) 超格子構造のシフトの相違は、両者で相互作用の大きさが異なっておりさらに表面再構成をしている (2×2) 表面では、水素原子がタングステン表面により接近していることで説明できることを示した。又、水素吸着位置が両者で異なることも明らかにした。このようにして、著者はタングステン (110) 表面の水素誘起再構成について、①再構成に伴う電子状態の変化、②水素-タングステン原子間の相互作用の役割等を実験的に明らかにした。

審 査 の 要 旨

著者は、清浄及び水素吸着タングステン (110) 表面について角度分解光電子分光法により詳細な測定を行い、水素吸着に伴って誘起される表面構成に関して、電子状態の変化を明らかにし、その機構を電子論的に解明するのに重要な貢献を行った。著者がこの間に行った一連の研究成果は、固体の表面物理学の分野に大きな寄与を与えるものとして高い評価ができる。

よって、著者は理学博士の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。