



# 目 次

## まえがき

<b>1 序 論</b> .....	1
1-1 はじめに.....	1
1-2 表面の対称性とその記法 .....	4
1-2-1 2次元周期格子の対称性 .....	4
1-2-2 逆格子と2次元ブリュアン域 .....	7
1-2-3 結晶表面の原子配列の記法 .....	8
<b>2 表面における電子</b> .....	11
2-1 バンド理論のあらまし .....	11
2-2 表面における電子波とその分類.....	16
2-3 表面電子状態の計算法 .....	23
2-3-1 モデルと計算法の分類 .....	23
2-3-2 局所密度汎関数法 .....	25
2-4 仕事関数.....	28
2-5 表面の電子状態——表面状態.....	33
2-5-1 タム状態 .....	33
2-5-2 ショックレー状態 .....	37
2-5-3 ダングリングボンド状態 .....	39
2-5-4 鏡映力表面状態 .....	41
2-6 表面の電子状態——数値計算から見た価電子のふるまい .....	42
<b>3 表面電子状態をさぐる</b> .....	47
3-1 光電子分光法のあらまし .....	47
3-2 その他の電子分光法 .....	53

3-2-1	オージェ電子分光法	53
3-2-2	電子線損失分光法	55
3-2-3	イオン中和分光法	56
3-2-4	不安定原子脱励起分光法	58
<b>4</b>	<b>表面構造の特徴</b>	<b>61</b>
4-1	緩和とランプリング	61
4-1-1	緩和	61
4-1-2	ランプリング	62
4-2	再構成構造とその起源	63
4-2-1	半導体表面の再構成構造	63
4-2-2	遷移金属および貴金属表面の再構成構造	71
4-2-3	極性表面の再構成構造	74
<b>5</b>	<b>表面構造をさぐる</b>	<b>77</b>
5-1	低速電子線回折	77
5-2	原子線・分子線回折	81
5-3	イオン散乱分光	85
5-4	電界イオン顕微鏡	88
5-5	走査トンネル顕微鏡	92
<b>6</b>	<b>原子・分子の吸着</b>	<b>99</b>
6-1	物理吸着	99
6-2	化学吸着——ニューズ模型	101
6-3	化学吸着——電子状態の定量計算	109
6-3-1	クラスター模型	109
6-3-2	ジェリウム表面上の吸着	111
6-3-3	有効媒質法	113
6-4	解離吸着	115
6-4-1	解離吸着とは？	115
6-4-2	重なる電子数とボンドオーダーの2乗和則	116
6-4-3	断熱ポテンシャル面	118
6-4-4	ジェリウム表面上の水素分子の吸着	120

6-4-5	軌道対称性の適合と活性障壁 .....	121
6-4-6	解離吸着における $d$ 電子の役割 .....	123
6-4-7	CO 分子の解離吸着.....	125
6-5	吸着子間相互作用と吸着層の性質.....	126
6-5-1	吸着子間相互作用 .....	127
6-5-2	アルカリ単原子吸着層 .....	129
<b>7</b>	<b>動的過程</b> .....	<b>133</b>
7-1	動的現象を支配するもの .....	133
7-2	大域的ポテンシャル面の構成法.....	134
7-3	剛体表面上の反応過程のトラジェクトリー .....	137
7-4	ストキャスティック・トラジェクトリー法 .....	140
7-5	吸着と脱離の動力学 .....	144
7-5-1	エネルギー散逸 .....	144
7-5-2	付着確率 .....	148
7-5-3	脱離速度 .....	150
7-5-4	非断熱過程によるエネルギー散逸 .....	154
7-6	電子移動と準位交差の諸問題.....	158
7-6-1	時間に依存するニューズ模型 .....	158
7-6-2	広いバンドの極限 .....	160
7-6-3	一般のバンドの場合 .....	163
7-6-4	2 準位系の交差とバンド効果 .....	166
7-6-5	衝突 He 原子のイオン化過程 .....	169
付録	調和格子による衝突粒子の散逸エネルギー分布 .....	175
問題	略解.....	177
参考	文献.....	187
索	引.....	191