

## 目次

### 1 章 物理吸着 1

---

- 1-1 物理吸着の基本 1
  - 1-1-1 蒸気と超臨界気体 1
  - 1-1-2 分子間相互作用 2
  - 1-1-3 吸着のタイプと吸着熱 7
  - 1-1-4 吸着等温線と統計熱力学 12
- 1-2 物理吸着状態 16
  - 1-2-1 平坦表面上の物理吸着 16
  - 1-2-2 メソ孔への物理吸着 20
  - 1-2-3 ミクロ孔への物理吸着 24
- 1-3 物理吸着の電子論 26
  - 1-3-1 引力ポテンシャルと斥力ポテンシャルの分離 26
  - 1-3-2 ファンデルワールスポテンシャル 29
  - 1-3-3 交換斥力ポテンシャル 34
  - 1-3-4 吸着熱 39
- 文献 40

### 2 章 化学吸着 43

---

- 2-1 化学吸着機構 43
  - 2-1-1 ニューンズモデル 43
  - 2-1-2 ハートリー近似 44
  - 2-1-3 水素吸着系 47

2-1-4	吸着エネルギー	49
2-1-5	ハートリー近似を超えた考察	51
2-1-6	吸着子間相互作用	52
2-1-7	媒質場の効果	55
2-2	吸着エネルギーとポテンシャル面の計算	56
2-2-1	非経験的ハートリー-フォック法と電子配置混合法 (量子化学的方法)	57
2-2-2	密度汎関数による方法	61
2-2-3	経験的相互作用による結合エネルギー計算	72
2-3	解離吸着機構	72
2-3-1	電荷移動	72
2-3-2	シリコン表面への酸素吸着	75
2-3-3	シリコン酸化の初期過程	79
	文献	82

### 3 章 表面構造の相転移 85

3-1	不整合相, 整合相, それらの間の相転移	85
3-1-1	不整合相, 整合相とは	85
3-1-2	2次元不整合構造の特徴	87
3-1-3	ドメインウォール(分域壁), ディスコメンシュレーション	90
3-1-4	2次元系におけるドメインウォールの統計力学と不整合・整合相転移	93
3-2	ラフニング転移	97
3-2-1	ラフニング転移の理論	98
3-2-2	表面実験	102
3-2-3	成長速度	104
3-2-4	平衡形	105
3-3	吸着・脱離の熱・統計力学	108
3-3-1	吸着子の占有統計	109
3-3-2	吸着等温式(吸着子間に相互作用がない場合)	111
3-3-3	吸着子間の相互作用を考慮した吸着等温式	114

- 3-3-4 微分吸着熱の表面被覆率による変化 117  
 3-3-5 付着確率と先駆状態—キスリークモデル— 118  
 3-3-6 吸着子の脱離 121  
 文献 123

## 4 章 表面の動的過程 127

- 4-1 さまざまな動的過程 127  
 4-2 金属表面と相互作用している分子の振動励起 132  
   4-2-1 はじめに 132  
   4-2-2 分子状吸着系 134  
   4-2-3 解離吸着系 138  
   4-2-4 おわりに 140  
 4-3 金属表面と相互作用している分子の回転励起 141  
   4-3-1 はじめに 141  
   4-3-2 脱離分子の回転状態分布 141  
   4-3-3 散乱分子の回転状態分布 143  
   4-3-4 おわりに 146  
 4-4 Pt 表面での CO 分子の酸化反応 146  
   4-4-1 はじめに 146  
   4-4-2 振動反応のダイナミクス 148  
   4-4-3 おわりに 153  
 4-5 電子励起イオン脱離 153  
   4-5-1 はじめに 153  
   4-5-2 脱離イオンの運動方程式 154  
   4-5-3 脱離イオンに働くポテンシャル 156  
   4-5-4 荷電状態変化率とイオン脱離確率 157  
   4-5-5 おわりに 161  
 文献 162

## 5 章 トンネル過程とトンネル過程を伴う動力学 167

- 5-1 表面におけるトンネル過程 167  
 5-2 WKB 近似によるトンネル過程の理論 168

5-3	電界放射と FEM	171
5-4	走査トンネル顕微鏡におけるトンネル過程	174
5-5	電界イオン顕微鏡の理論	178
5-6	接近した 2 つの表面間で起こる原子過程	183
5-7	運動する粒子と表面間のトンネル過程	189
	文献	195

## 6 章 結晶成長理論 197

---

6-1	さまざまな結晶成長過程	197
6-1-1	駆動力	197
6-1-2	律速過程	199
6-2	気相成長	200
6-2-1	ステップの前進速度	204
6-2-2	ステップの生成機構と成長速度	208
6-2-3	2 元系結晶	214
6-2-4	極端条件下での成長様式	221
6-3	溶液成長	225
6-3-1	溶融和効果と成長速度	225
6-3-2	多面体有限結晶の取扱い	232
	文献	237

## 索引 239

---

### I——構造と電子状態 目次

1 章	序論
2 章	表面の対称性とその記述
3 章	表面の電子状態
4 章	表面構造と電子状態
5 章	表面の磁性
6 章	数値計算法の理論と実際