

# 目 次

<b>第 1 章 表面の定義と現実の表面</b>	<b>1</b>
1.1 表面と界面	1
1.2 理想表面と現実表面	2
1.2.1 理想表面	2
1.2.2 現実表面	3
1.3 表面熱力学	5
1.3.1 1 成分系の表面熱力学	5
1.3.2 多成分系の表面熱力学	7
1.4 吸着等温式	8
1.4.1 ギブズの吸着等温式	8
1.4.2 ラングミュアの吸着等温式	9
1.5 ぬれ	11
1.6 表面拡散	12
1.7 表面の機械的性質	16
1.7.1 表面近傍の弾性率	16
1.7.2 摩擦	18
1.8 腐食	19
1.9 真空	20
引用・参考文献	23
<b>第 2 章 表面の構造</b>	<b>24</b>
2.1 結晶構造の分類	25
2.1.1 空間格子	25
2.1.2 方位の表し方	26
2.1.3 面の表し方	27
2.2 表面の原子配列の特徴	30
2.2.1 理想表面の構造	31
2.2.2 緩和	32
2.2.3 表面再構成構造	34

2.3	表面の2次元空間格子	36
2.3.1	2次元ブラベー格子と2次元空間群	36
2.3.2	表面格子の表記方法	37
2.4	回折法と逆格子	39
2.5	様々な表面構造とその起源	43
2.5.1	清浄表面	43
2.5.2	吸着表面構造	52
2.6	現実の表面構造と顕微観測	59
	引用・参考文献	60
<b>第3章</b>	<b>表面の電子状態</b>	<b>62</b>
3.1	電子状態と電子構造	62
3.2	電子状態密度	63
3.3	オージェ電子	66
3.4	原子の全エネルギーと1電子軌道エネルギー	68
3.5	数値計算	70
3.6	クラスター計算とバンド計算	74
3.7	ケミカルシフト	77
3.8	フェルミ準位とフェルミ分布	79
3.9	仕事関数	81
	引用・参考文献	84
<b>第4章</b>	<b>超高速ダイナミクス</b>	<b>85</b>
4.1	はじめに	85
4.2	電子系のダイナミクス	87
4.2.1	2光子光電子(2PPE)分光法	87
4.2.2	光電子顕微鏡法(PEEM)	90
4.2.3	光テラヘルツ(THz)分光法	92
4.3	吸着原子・分子のダイナミクス	96
4.3.1	和周波発生(SFG)分光法	96
4.3.2	第二高調波発生(SHG)分光法	98
4.4	フォノンおよびキャリアダイナミクス	101
4.5	おわりに	105

引用・参考文献	110
---------	-----

## 第 5 章 表面の分析法 112

### I X 線（紫外線）による表面分析法 112

#### 5.1 X 線光電子分光法 (XPS) 112

##### 5.1.1 原理 112

##### 5.1.2 装置（測定法） 114

##### 5.1.3 XPS の特徴 116

#### 5.2 紫外光電子分光法 (UPS) 119

##### 5.2.1 原理 119

##### 5.2.2 装置（測定法） 119

##### 5.2.3 UPS の特徴 119

#### 5.3 X 線吸収分光法 (XAS) 123

##### 5.3.1 原理 123

##### 5.3.2 装置（測定法） 124

##### 5.3.3 XAS の特徴 125

### 引用・参考文献 128

### II 電子線による表面分析法 129

#### 5.4 オージェ電子分光法 (AES) 129

##### 5.4.1 原理 129

##### 5.4.2 装置（測定法） 132

##### 5.4.3 AES の特徴 135

#### 5.5 逆光電子分光法 (IPES) 135

##### 5.5.1 原理 136

##### 5.5.2 装置（測定法） 136

##### 5.5.3 IPES の特徴 138

#### 5.6 電子エネルギー損失分光法 (EELS) 139

##### 5.6.1 原理 140

##### 5.6.2 装置（測定法） 141

##### 5.6.3 EELS の特徴 142

### 引用・参考文献 143

<b>III</b>	イオンによる表面分析法	145
5.7	2次イオン質量分析法 (SIMS)	145
5.7.1	SIMS の原理および測定上の特徴	145
5.7.2	質量分析器とイオン源	148
5.7.3	ダイナミック SIMS(DSIMS)	150
5.7.4	飛行時間型 SIMS(TOF-SIMS)	151
5.7.5	表面分析のためのデータ解析法	153
5.7.6	その他	156
5.8	イオン散乱分析法 (高速, 低速, 中速)	157
5.8.1	ラザフォード後方散乱法 (RBS)	158
5.8.2	イオン散乱分光法 (ISS)	158
5.8.3	中エネルギーイオン散乱 (MEIS)	159
	引用・参考文献	159
<b>IV</b>	その他の表面分析法	162
5.9	低速電子回折 (LEED) および反射高速電子回折 (RHEED)	162
5.9.1	はじめに	162
5.9.2	電子の波動性	162
5.9.3	装置	163
5.9.4	2次元結晶からの回折図形	165
5.9.5	おわりに	167
5.10	走査型プローブ顕微鏡 (SPM)	168
5.10.1	はじめに	168
5.10.2	基本原理	169
5.10.3	おわりに	173
	引用・参考文献	173
<b>第6章</b>	表面の計算科学	175
6.1	ハートリー-フォック近似	176
6.2	密度汎関数理論	182
6.3	具体的な計算手法	188
6.3.1	擬ポテンシャル法	188
6.4	計算の精度	190

6.4.1	分子の構造とエネルギー	190
6.4.2	表面エネルギーと仕事関数	191
6.4.3	原子・分子の吸着エネルギー	192
6.5	表面・界面の第一原理計算	194
6.5.1	物理吸着系	194
6.5.2	有機/金属界面の電子準位接続	194
6.5.3	物理吸着系の界面電気二重層	196
6.5.4	弱い化学吸着系の界面電気二重層	198
6.5.5	磁性分子の吸着	201
6.5.6	CO 分子吸着	203
6.5.7	第一原理熱力学計算による表面相と反応性	207
6.5.8	マイクロキネティック・モデリング	210
6.5.9	電極反応シミュレーション	212
6.5.10	バンドギャップと欠陥準位の問題	214
6.5.11	TiO <sub>2</sub> (110) 表面上での蟻酸分解反応	215
6.6	まとめと今後の展望	217
6.A	付録	218
	引用・参考文献	221