

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 田尻 寛男

表面の原子構造について正確な情報を得ることは、その表面電子状態、表面物性を理解する上での重要な基礎的事柄である。シンクロトロン放射からの高輝度X線を利用する表面X線回折(SXD)法は、表面構造を精密に解析できる有力な手法の一つとして認識されつつある。SXDF法が威力を発揮した例として、室温におけるSi(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag(以下、 $\sqrt{3}$ -Ag)表面の構造解析が挙げられる。この表面は種々の表面構造解析手法を用いても、統一的な見解が得られず長い間論議を呼んだが、現在ではSXDF法により銀が蜂の巣状連結三角形(HCT)構造をとるものと考えられている。ところが最近、低温ではHCT構造からの微小な原子変位によって説明される、非対称三角形(IET)構造が実現しているとする、第一原理計算と走査トンネル顕微鏡による報告がなされた。本論文は、SXDF法を非常に有効に利用し、低温における $\sqrt{3}$ -Ag表面の構造解析、および室温構造から低温構造への相転移の研究を行っている。

本論文は6章からなる。以下に各章の内容を要約する。

第1章では、本研究の背景が述べられており、特に現在までに得られている $\sqrt{3}$ -Ag表面についての知見が述べられる。それをもとに、本研究の目的と本論文の構成について述べられる。

第2章では、SXDF法について、その原理と種々の測定法が説明されている。さらに、測定したX線回折強度から構造因子の絶対値を抽出するための補正因子が示され、表面構造解析を行う際の手順が述べられる。

第3章では、本研究で使用した実験装置の詳細が述べられる。まず、SXDF法による測定を行うに十分な自由度を備えた六軸表面X線回折装置について説明が行われる。次に、試料作製環境として必要な超高真空装置の性能が述べられ、試料温度を約50Kから約1400Kまで制御可能な試料マニピュレーターについて述べられる。この試料マニピュレーターは本研究の目的のために新たに製作されたものである。

第4章では、試料温度約50Kの低温および室温における $\sqrt{3}$ -Ag表面のSXDF法による構造解析について述べられている。まず、実験結果が述べられ、表面のドメイン効果を考慮に入れた構造モデルについて考察がなされる。この考察に基づき実験結果が解析され、試料温度約50Kにおける $\sqrt{3}$ -Ag表面構造はIET構造であることが示される。さらに室温における $\sqrt{3}$ -Ag表面構造は銀原子の熱振動が異方性調和振動で表されるHCT構造で説明されることを示し、従来のHCT構造が原子の熱振動に関してさらに精密化されることを示した。SXDF法において表面原子の熱振動異方性について議論を行ったという報告はほとんどなく、このことはSXDF法の解析精度が従来と比較して大きく改善されたことを表している。さらに、異なる試料を用いた試料温度300K、215K、160Kにおける同様の実験に

ついて述べられる。その解析結果から銀原子の非調和性熱振動の可能性についても議論がなされる。

第 5 章では、室温構造としての HCT 構造から、低温構造としての IET 構造への相転移についての実験と考察が述べられている。まず、SXD 法による測定結果の温度依存性について述べられる。変位型、および秩序・無秩序型転移モデルによる考察の結果、実験結果について室温から低温への相転移は、銀三量体の基準位置からの回転角を秩序変数とする変位型転移で説明されることが示される。さらに、臨界現象を記述する臨界指数による解析が試みられ、臨界指数 $\beta=0.265$ 、相転移温度 $T_c=150\text{K}$ を得た。この結果をもとに、二次元系における秩序・無秩序型転移モデルの厳密解との比較、考察が行われ、結論として秩序・無秩序型転移の可能性が改めて否定される。

第 6 章では、本論文のまとめと、 $\sqrt{3}\text{-Ag}$ 表面構造にかかわる総合的な議論が展開されている。

以上を要するに、本研究では試料温度約 50K の低温における $\sqrt{3}\text{-Ag}$ 表面について SXD 法による構造解析を行い、その構造が IET 構造であることを実験的に初めて示し、他方、室温構造は銀原子の熱振動異方性を取り入れた HCT 構造として精密化されることを示した。また、室温相から低温相への相転移は、HCT 構造から IET 構造への変位型転移であることを示し、臨界指数 β および相転移温度 T_c を実験的に決定した。このように、SXD 法により精密な表面構造解析が可能であることに加え、他の解析手法では検出が困難であると思われる微小な構造変化を伴う表面相転移についても系統的な研究を行える可能性を示した、と言う点で物理工学の進展に寄与するところが大きい。

よって、本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。