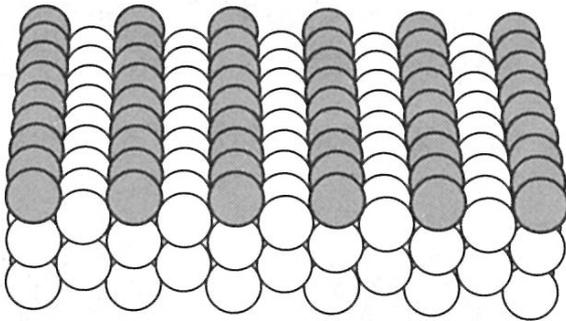
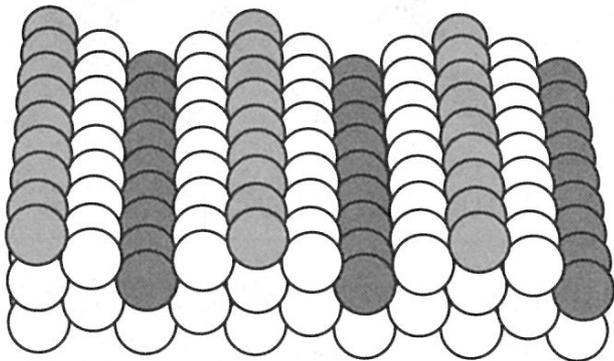


表面再構成

(a) 1×1



(b) 1×2

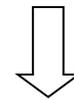


Pt, Pd, Ir, Auの(110)
面におけるmissing
row 1×2構造

表面再構成・・・表面の対称性が理想
表面のそれと異なるような構造変化。
表面でのエネルギーを減少させる。

金属表面

fcc金属の低指数面の中で面の原子
密度が最も小さい(110)面から原子列
1列ごとに取り去る



斜面は最も原子密度の大きな(111)面

共有結合性の高い物質の表面 e.g. Si

不飽和結合を減らすように構造変化

仕事関数(Work function): 表面項

表面項(電気二重層)

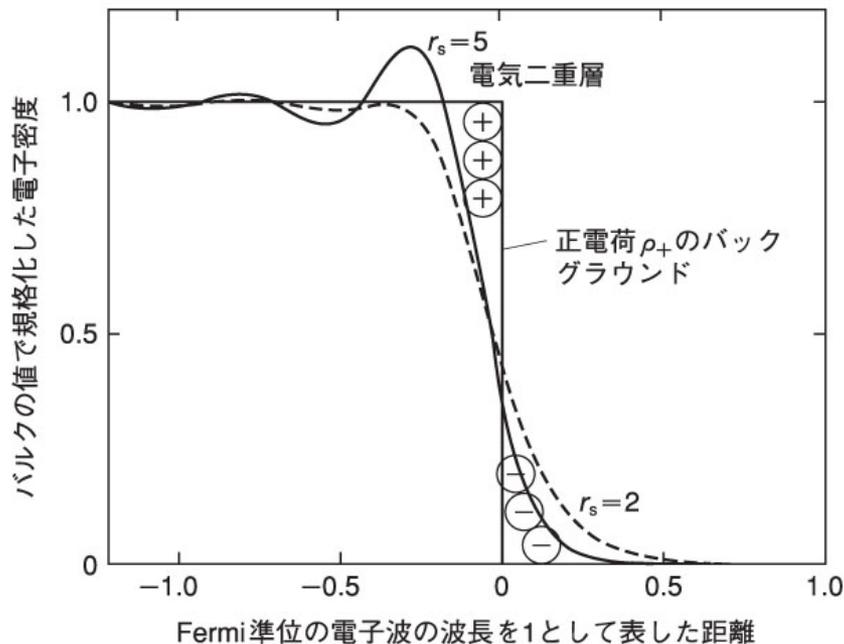


図 4.13 ジェリウム表面における電子密度
表面近傍で電気二重層が形成される。

ジェリウムモデル

(結晶中で配列している金属のイオン殻による正電荷を，正の電荷数の和を保ったまま(物質は中性であることを保ったまま)物質全体に一様に分布していることにし，その中を価電子が運動すると仮定)

電子は(波動方程式から分かるように)急激なポテンシャル変化を嫌う



電子は物質の外側に波長程度しみ出しつつ，なだらかな変化をもってバルクの値に収束。

物質の外側は電子しみ出しによって負，すぐ内側は電子不足で正に帯電し，電気二重層が形成し，電子を外に取り出すための障壁となる。

cf. 有限の高さの壁への波動関数のしみ出し