$$N_{\perp}^{-1} \sum_{k_z} \delta(E - E_{\perp}(k_z)) = (\Gamma/\pi)/(E^2 + \Gamma^2)$$

$$V_i(\mathbf{k}) = (N_{/\!/} N_{\perp})^{-1/2} \nu \; \exp(i\, \mathbf{k}_{/\!/} \mathbf{R}_i)$$

パラメーター $\Delta_{/\!/}$, Γ は金属の d バンドの巾から，又 ν は $\theta \to 0$ での吸着熱の値から決定する。研究会では H/W(100) 及び K/W(110) 系の計算結果を報告し，更に局在スピンの存在する様な状態についての議論を行ったが，詳細は別の機会に譲る。[5)]

参　考　文　献

1) J. R. Schrieffer and P. Soven: Physics Today, April (1975) 24.
2) T. L. Einstein and J. R. Schrieffer: Phys. Rev. **B7** (1973) 3629
3) T. B. Grimley ; Proc. Phys. Soc. **90** (1967) 751.
T. B. Grimley and S. M. Walker: Surface Sci. **14** (1969) 395.
4) D. M. Newns: Phys. Rev. **178** (1969) 1123.
5) M. Tsukada, to be published.

表面電子状態の分子軌道論的取り扱い

日大文理（化）　工　藤　隆　雄

K・K・R・法等の精密な理論を用いて，対称性の大きく破れる表面での現象を扱うのは困難なことから，L・C・A・O・近似の再検討をし，表面現象の取り扱いを試みた。

まず系の ℓ 番目原子に注目し，近傍原子よりの影響は Mattheiss の方法に依って取り入れるものとする。ハミルトニアンは近似的に，

$$\mathbf{h}_\ell = \mathbf{h}_\ell^0 + \triangle \mathbf{h}_\ell$$

$$\mathbf{h}_\ell^0 = -\triangle_1 + \left(-\frac{2Z_\ell}{R_\ell} + V_\ell\right) + \sum_{\ell'} \left[-\frac{2Z_{\ell'}}{R_{\ell'}} + V_{\ell'}\right]_\ell^0 - 6\alpha\left[\frac{3}{8\pi}(\rho_\ell + \triangle\rho_\ell)\right]^{1/3}$$

$$\triangle \mathbf{h}_{\ell} = \sum_{\ell'} \{ (-\frac{2Z_{\ell'}}{R_{\ell'}} + V_{\ell'}) - [-\frac{2Z_{\ell'}}{R_{\ell'}} + V_{\ell'}]_{\ell}^{0} \}$$

と表わされる。ここに$\triangle \mathbf{h}_{\ell}$ は近傍原子の作用の非球対称成分を表わす。

続いて系の波動関数は $\mathbf{h}_{\ell}^{0}$ の固有関数を用いて近似する。

$$\mathbf{h}_{\ell}^{0} \phi_{\ell}^{i} = \varepsilon_{\ell}^{i} \phi_{\ell}$$

$$\therefore \quad u_{i} = \sum_{\ell} C_{\ell}^{i} \phi_{\ell}^{i}$$

展開係数は永年方程式,

$$\sum_{\ell} \sum_{m} C_{\ell}^{i*} C_{m}^{i} [(\varepsilon_{\ell}^{i} - \varepsilon_{i}) S_{\ell m} + O_{\ell m}] = 0$$

$$S_{\ell m} = \int \phi_{\ell}^{i*} \phi_{m}^{i} d\tau, \quad O_{\ell m} = \int \phi_{m}^{i*} \triangle \mathbf{h}_{\ell} \phi_{\ell}^{i} d\tau$$

と u_{i} の規格直交条件より決まる。又積分は，必要ならば，Löwdin の α 展開を用いて求めることができる。

テストとして，リチウム金属の 2 s エネルギーバンドの計算を試みた。しかし最近接原子との重なり積分が約 0.7 にもなり，規格化定数が零となるなどの不都合さが見出され，具体的問題を扱うには，多分に検討の余地のあることが見出された。