

子振動に関するデバイ温度は、低速電子回折 (LEED) の方法で、バルクの値、 226° よりも小さい、 155° の値が報告されている⁴⁾。

He 原子線散乱の方法は、LEED とちがって、入射粒子線がバルク内へ貫入しないため、表面第一原子層のみに関する情報が得られる。従って表面近傍の格子力学 研究する上で、He 原子線散乱は LEED と共に有効な方法であると考えられる。

参 考 文 献

- (1) H. Saltsburg et al., Rarefied Gas Dynamics, 5th Symp., 223 (1966).
- (2) R. B. Sabbrarao et al., J. Chem. Phys., 51, 4679 (1969).
- (3) R. Sau et al., Surface Sci., 34, 268 (1973).
- (4) E. R. Jones et al., Phys. Rev., 151, 476 (1966).

表 面 の 格 子 振 動

京大理・物理 松 原 武 生

LEED その他の実験で金属表面の原子の振動は内部原子の振動と相当ちがっていることが知られている。例えば有効 Debye 温度に換算して、表面原子の Debye 温度は内部原子の値の約 2 倍にもなる。このような表面近くの原子の振動の簡単な一つの扱い方として、self-consistent Einstein モデルを提案する。各原子の独立な振動の振動数を位置の関数として全系の自由エネルギーが極小になる条件からきめるのである。原子の質量を m 、原子間のポテンシャルを $v(\mathbf{r})$ とすると

$$m \omega^2(\mathbf{R}) \equiv \phi(\mathbf{R}) = \left\langle \sum_{\mathbf{R}'} v_{xx}(\mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{R}' - \mathbf{u}(\mathbf{R}')) \right\rangle$$

が $\omega^2(\mathbf{R})$ あるいは $\phi(\mathbf{R})$ をきめる方程式で、この右辺は変位 $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ の平均値を通して $\phi(\mathbf{R})$ の関数である。この非線型方程式を逐次近似で解くことで、LEED 実験から得られる種々の金属の表面 Debye 温度の値を定性的に説明できることが示される。