

れで、P-S の formalism に沿って、強結合極限の場合に限って、ionic configuration を取り入れた計算を行なった。このとき、系は、surface molecule とくりぬかれた結晶の二つの部分に分かれるが、P-S はくりぬかれた結晶を、surface molecule を構成している金属原子の最近接原子だけに置き換えをという近似を行なっている。筆者は、surface Green 関数を用いて、くりぬかれた結晶が半無限であることによる効果を取り入れた計算を行ない、P-S の近似が妥当でないことを示した。また、ionic configuration からの寄与が、吸着原子と表面間の距離を変えたとき、かなりの領域で重要であること、そして、強結合近似が妥当であることを示した。最後の強結合近似の妥当性については、M.O. 法の観点からも調べる予定である。

1) P. H. Paulson and J. R. Schrieffer; Surf. Sci. 48 (1975) 329

22. 相転移近傍での熱脱離異常

相模工大 佐々田 友平

Substrate の相転移近傍のオーダパラメータと結合する吸着子のポテンシャルを無秩序相で計算する。表面効果を substrate の自由エネルギーにとり入れる。表面エネルギーが負の場合、即ち表面秩序が現われる場合、ポテンシャルは、対数発散を示す。絶対反応速度論にのって、熱脱離の問題を議論する。

23. 物理吸着系の相転移

九大理 太田 隆夫

物理吸着系の相転移のうち registered 相から non-registered 相への転移¹⁾ 及び non-