

20. Newns-Anderson モデルについての comment

阪大基礎工 吉 森 昭 夫

相互作用のある不純物系（吸着子系も含まれることになる）に対する Friedel の総和則の議論はすでに種々なされている¹⁾。ここでは一般的に総和則が相互作用についての保存則と密接な関係があることを示す²⁾。例を軌道縮退のある Anderson モデルにとると、 σ をスピン、 m は軌道を表すとして、 $\langle n_{m\sigma} \rangle$ を $m\sigma$ 局在状態にある電子数、 $\sum_k \langle n_{km\sigma} \rangle$ を対応する伝導電子の局在電子数に対して

$$\sum_{m\sigma} C_{m\sigma} (\sum_k \langle n_{km\sigma} \rangle + \langle n_{m\sigma} \rangle) = \sum_{m\sigma} C_{m\sigma} \frac{1}{\pi} \text{Im} \log G_{m\sigma}(i0^+)$$

が成立することを証明することができる。 $C_{m\sigma}$ は 1、 σ または m である。 $G_{m\sigma}(i\omega)$ は $m\sigma$ 状態の Green 関数で、 $m\sigma$ 状態のエネルギー準位は $m\sigma$ に依存して異っていてもよい。

- 1) H. Shiba, Prog. Theor. Phys. 54 (1975) 967
- 2) L. Mihály and A. Zawadowski, J. Physique 39 (1978) L-483

21. 化学吸着の強結合理論

京大理 沢 田 信 一

Paulson と Schrieffer¹⁾ (P-S と略記する。) による Induced Covalent Bond 理論は、V.B. 法による化学吸着理論であり、金属表面上の水素原子の吸着を扱っている。このとき、取り入れられているのは、neutral configuration のみであるが、異核二原子分子では、ionic configuration からの寄与が大きいことから考えて、水素原子の遷移金属表面上への吸着の際にも、ionic configuration の寄与が大きいことが期待される。そ