

## 2. バネモデルによる表面原子再配列

大阪府大 総合科学 寺岡義博

Cr, Mo, WのBCC(100)面で見出されている $C(2 \times 2)$ ,  $C(2.2 \times 2.2)$ などの表面原子再配列については、多くの人々が、その表面電子構造を調べることによって議論した。そして、その surface density of states が  $\epsilon_F$  近傍で非常に鋭い peak を持つことが関係していると結論した。しかし、これらの議論では、表面原子のみが変位すると仮定していること、又、band energy 以外の energy を全く考慮していないことなど不満足な点がある。そこで我々は、バネモデルを用いて、表面原子再配列を調べた。force constant は 2nd nearest neighbor まで取り入れ、表面原子に関係した force constant のみが、bulk のそれと異なった値を持つことを許した。二層目以下の原子の変位も許して“力のつりあい”の方程式を各層について求め、これを解くことによって、表面原子に変位を与えた時、系が不安定になる条件を調べた。その結果、(110)方向の $\vec{Q}$ に対しては、もし不安定なものがあるとすれば、それは $C(2 \times 2)$ であることがわかった。

## 3. 固体表面の格子振動

京大理 松原武生

前回の研究会でも同じ表題でレビューを試みたが、その時提案した“Self-consistent Einstein Model”のその後の発展について報告した<sup>1)</sup>。その主要な話題は次の4つである。

- (1) Surface Lattice Vibrations in Ni<sup>2)</sup>
- (2) Mean square displacement in Alkali-Halides at high temperatures<sup>3)</sup>
- (3) Surface Rumpling in Na-Halides<sup>4)</sup>
- (4) Theory of Melting<sup>5)</sup>

最後の theory of melting では、固体の融解が表面からはじまるという最近の Pietronero