

による後方散乱をより精密に扱い、第四番目以後の原子については、二原子による散乱が繰返されると仮定して解析的な方法によって計算を行った。シミュレーションの結果との比較から表面原子の平衡位置の bulk 中のそれからの変位及び原子の振動振幅があまり大きくない限り、この方法の近似が良いことが確かめられた。

この方法の適用の一例として、表面再構成を起こしている W (100) 清浄表面に対する実験結果を解析し、不整合構造のモデルが実験を説明できるかどうか詳しく調べた。不整合構造に対する計算は、シミュレーションによったのでは非常な時間を要するが、この方法によれば比較的短時間で結果が得られ、また、散乱の詳細及び格子振動の影響などが考察できる。

15. アントラセンにおける表面及びバルクエキシトン

宮 本 克比古

Phillpot らはアントラセン (001) 面に垂直入射した b 軸偏光の光による反射率の測定を低温で行い、そのスペクトルの形状の解析により表面に局在したエキシトンの存在を結論した。

ここでは、この仕事に関連して次の二点について、更に立入った考察を加えた。(1) Phillpot の解析ではバルク励起子の寄与を理論的に導出することをせずに、実験から推定した反射スペクトルで代用するという不満足な取扱いがなされているので、これを励起子と格子振動の相互作用から導出することを試みて、ほぼ Phillpot の推定した形状が再現されることを示した。(2) 上記においては、表面に平行な分極をもち、面内の成分 $k_{\parallel}$ がゼロの (表面およびバルク) 励起子を考えたが、この表面励起子は、少しでも面内方向の波動成分をもつ場合には、真の表面局在状態から、バルク連続帯に埋もれた表面共鳴状態へと移り変ってゆくという興味ある挙動をすることを理論的に示した。この際、分子間の双極子相互作用を面ごとにまとめてとるという取扱いをするが、 d だけ離れた 2 枚の面の間で $k_{\parallel} \exp[-k_{\parallel} d]$ に比例する双極子相互作用があるという簡単な事情のために半無限系における表面およびバルクモードの取扱いが厳密にできる。

16. 反強磁性相互作用を持つイジング三角格子系における磁気相転移

: $\text{NiNa}(\text{Acac})_3 \cdot \text{benzene}$

山 田 典 克

「反強磁性相互作用を持つイジング三角格子系」は、スピンと格子が一種の不整合を起こす