

ies のバンドに fit させることを試みた。Slater-Koster の方法を用い、遷移積分だけで、nesting に効いていそうなフェルミ面を再現することを試みた。次に、そのバンドを用いて、 $\chi^0(\mathbf{q})$ を計算した。この $\chi^0(\mathbf{q})$ はフェルミ面の nesting だけの情報を与えるものである。その結果として、 $\mathbf{q} = 2/3 \vec{PM}$ (これは実験で観測されている波数ベクトル) と $\mathbf{q} = 1/2 \vec{PK}$ に同程度のピークがみられた。

次に、 $\chi^0(\mathbf{q})$ でピークのみられた2つの $\mathbf{q}$ に対して、電子格子相互作用係数の波数ベクトル、モード依存性を調べた。その結果、フェルミ面の nesting に効いていそうな部分では、常に longitudinal mode の方が transeverse mode より、電子格子相互作用係数の絶対値が大きいことがわかった。このことより、longitudinal mode の変位の可能性の方が大きいと期待される。

さらに、一般化された電子感受率 $\chi(\mathbf{q}_\lambda)$ の計算は現在実行中である。

4. W(001) 表面再構成と水素吸着の効果

稲 岡 毅

W(001) 表面に水素を吸着させると吸着水素が表面の再構成にきわめて大きな影響を与え、被覆度の変化に応じてさまざまな現象が現れる。

清浄表面は室温付近より低温で低速電子線回折のパターン (LEED pattern) の半整数スポットで示される再構成を起こしているが、これに水素を吸着させていくと被覆度 $\theta = 0.11$ ($\theta = 1$ で飽和) で表面 W 原子の変位の周期性が変化し半整数スポットが4つに分離する (commensurate-incommensurate 転移、以下この2相をC相、IC相と略記)。Lau と Ying のモデルに基づき平均場近似の範囲でこの転移について調べた結果、清浄表面ではC相が安定であるが、H-W間相互作用を第2近接まで考慮するとこの相互作用がC相をこわしてIC相に転移することがわかった。Lau と Ying もこの転移について論じているが、IC相を安定にする機構は異なっている。

電子エネルギー損失分光 (EELS) の実験により、bridge site に吸着したHの3つの固有振動数が測定できるとされている。その固有振動数の被覆度依存性の測定値から、吸着水素と変位しているその最近接Wの間の相互作用と吸着水素間の相互作用を考慮し、吸着水素の最近接Wの変位の被覆度依存性と吸着配置に関する短距離秩序度についてある程度の考察が可

能である。その考察に基づき熱脱離スペクトル（温度を時間的に一定の割合で上げたときの被覆度の時間微分の大きさ $-d\theta/dt$ の変化）を計算したところ、実験結果と形状の似たスペクトルが得られた。

5. 単位胞に 2 種類の原子を含む遍歴系の磁気相図

大 西 裕 明

単位胞内にいくつかの原子を含む規則合金や遷移金属化合物では、様々な強磁性、反強磁性状態の出現が知られている。これらの物質の磁気相図に関しては、これまで主として、局在電子模型の立場から研究がなされてきたが、遍歴電子模型がよい、と考えられている物質も多い。そこで、遍歴電子模型の立場で、単位胞に 2 種類の原子がある系の $T = 0$ での磁気相図を調べた。

単位胞内に 1 個の原子がある系については、すでに Penn らによって磁気相図が調べられている。ここでは、Penn のモデルを次のように拡張した。

- (1) 軌道の異方性や縮退は無視して、2 個の原子 (A, B) は、等方的な局在軌道を 1 個ずつ持つ。局在準位の差は、A の準位から測って、B の準位が V だけ異なる。
- (2) transfer は最近接の A-B, A-A, B-B 間の 3 種類 (t_1, t_2, t_3) を取って、tight-binding 近似で扱う。

(3) 相互作用としては、A, B 原子上での原子内クーロン相互作用 (U_a, U_b) のみ考える。このようなハバード型のハミルトニアンを平均場近似で扱う。結晶構造としては、NaCl 型と CsCl 型の 2 種類を取る。まず、常磁性状態の不安定性を調べ、さらに、A, B 原子上の電子数をセルフ・コンシステントに決めて、各状態のエネルギーの比較から、 $U_a/2t_1$ を縦軸、平均の電子数を横軸とした平面内で磁気相図を作った。

その結果、transfer 積分、クーロン積分、 V 、全電子を変えると、単位胞内のモーメントの相対的な向きや大きさが変わり、観測されている様々な秩序状態が現われる。そこで、CsCl 型構造の FeRh にこのモデルを適用してみた。FeRh は、低温で反強磁性状態であり、340K で強磁性へ 1 次転移する。また、この転移温度は成分比、磁場、圧力を変えると、大きく変化する。このような FeRh の挙動を、定性的ながらも説明できることを示した。