

1. Mo, W(001)面の原子再配列, 原子面間隔の緩和

東大物性研 寺 倉 清 之

LEED の I-V 曲線の解析及びイオンビーム散乱の実験から, Mo, W(001) 表面では第 1 原子面間隔が数%縮んでおり, 又, 室温以下では表面原子は C(2×2) 構造に再配列することがわかっている。(Mo では厳密には C(2.2×2.2) であり, ごく最近 Cr でも C(2×2) 構造が観測されている。) Desjonqueres は tight-binding (TB) *d* バンドを用い, Born-Mayer のコア-間反発ポテンシャルを導入して実験とほぼ一致する原子面間隔緩和の値を得た。定量的なことは重要でないが, 原子面間隔緩和ではバンド中央近傍の表面状態の broadening は生じないという指摘は定性的に重要である。従って, 表面状態の存在は原子面間隔緩和においては重要な因子ではない。

表面原子再配列についての実験の簡単なレビューを行った。表面原子が面に垂直に変位するとする Felter 等のモデルと面内で<110> 方向に変位するとする Debe と King のモデルに対して, 我々は TB *d* バンドの応答関数を計算した。イオンビームの実験から Felter 等のモデルは完全に否定され, Debe-King モデルにも少々疑問が投げかけられたが, 我々は後者はまず正しいモデルだと考えている。我々の応答関数の計算は, Felter 等のモデルではフェルミレベル近くの表面状態からの寄与が無いのに対して, Debe-King モデルには表面状態の寄与が著しくて *d* バンドエネルギーの低下が大きいことを示している。(Surf. Science 86 (1979) 535) 今回は計算をさらに発展させ, 表面上の隣り合う原子間の site-off-diagonal Green 関数の計算を示し, それに基づいて上記 2 つのモデルに対する応答関数の定性的な相違の原因を議論した。原子再配列には, フェルミ面近くの表面状態の存在は重要な因子であり, 従って吸着原子の影響を受け易いと考えられる。