

- 6) D. J. Chadi (例えば Phys. Rev. Letters. 43 (1979) 43) もエネルギーの計算から表面原子配位を決定する研究を行なっているが、電荷移動の self-consistency も core-orthogonalization も考慮されていない。
- 7) J. E. Rowe and H. Ibach, Phys. Rev. Letters 32 (1974) 421

8. 結晶の表面再構成と電子構造

物性研 菅 野 暁

結晶表面の、(i)原子配置、(ii)電子構造の2つは共に、現在の所 unknown である。今迄になされた、或はこれからなされようとする理論研究は、(A), (B), (C)の3つに分類出来る。(A)は(i)又は(ii)のどちらか1つを仮定して他を求めるもので、イオン結晶の buckling の計算、bulk で求めた力の定数を用いた Si(100) 面の再構成の計算等があげられる。

(B)は(i)と(ii)を完全に self-consistent にはしないが、うまい starting model をえらんで self-consistency への急速な convergence が得られるようにする理論である。この理論では、(ii)を仮定して出発するものと、(i)を仮定して出発するものの2種類がある。前者の理論としては Harrison の bond orbital model, Chadi の parametrized tight binding 法の適用等があげられる。いずれも共有結合結晶に小さなイオン性を導入するものである。後者の線上にあるが convergence は保証されていないものとして、Tossatti & Anderson の理論があるが、完全な後者型の理論はないように思う。

(C)は(i)と(ii)を完全に self-consistent にする大型の計算で、Freeman のグループ、分子研の塚田・里子グループ等で研究が進められている。

この講演では Si(100) 面の再構成に関する Chadi の理論を例にとって、(B)型の研究の重要性が強調された。