

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(2×2), C(2.2×2.2)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 ϵ_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(2×2)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¹⁾。その主要な話題は次の4つである。

- (1) Surface Lattice Vibrations in Ni²⁾
- (2) Mean square displacement in Alkali-Halides at high temperatures³⁾
- (3) Surface Rumpling in Na-Halides⁴⁾
- (4) Theory of Melting⁵⁾

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

の理論を中心に解説と討論を試みた。

- 1) 前回のレビューは表面 **14** (1976年) p 500 にまとめられている
- 2) T. Hama & T. Matsubara: Prgg. Theor. Phys. **59** (1978) 1407
- 3) T. Nakayama & T. Ogawa: Z. f. Phys. to be published
- 4) S. Sawada & K. Nakamura: J. Phys. C. **12** (1979) 1183
- 5) L. Pietronero: Preprint to be published in Solid State Commun.

4. 合金表面の組成変化

阪大・基礎工 馬 越 健 次

合金の表面近傍では、組成が bulk とは異なっている。このことについての review をした。組成変化の原因としては、主に次の2点が考えられる。(1)表面で bond がきれるため昇華熱の小さい要素が表面に出やすい。(2) Strain energy が小さくなるように組成が変化する。(2)については今まであまり考えられていないが、(1)については、ideal solution model, Bragg-Williams 近似、及び Bethe 近似まで考えられている。それらの理論の結果について報告した。最近、Field Ion Microscope による信頼度の高い実験が行われるようになったが、今までの理論では、必ずしも満足な結果は与えられないようである。今後の理論・実験両面の進歩が望まれる。