巻　頭　言

第一原理理論による表面構造の決定

吉　森　昭　夫

いま表面研究は激しく動いている。理論でいえばモンテカルロ・シミュレーションの広範な応用，第一原理理論による表面原子・電子構造の決定など，すでに大きな流れになっているもの，これからの大きな可能性を示しながら動き出したところのものなど，10年といわず数年のうちに表面研究のすがたかたちが一変するのではないかと思わせるものがある。

特にここで取り上げたいのは第一原理理論による表面構造の決定である。親しくしているミシェル・ヴァンホーヴ博士（Michel van Hove, カリフォルニア州立大バークレー）と最近電子メールの数往復をした。彼は低速電子線回折に基づく表面構造解析の権威のひとりで，彼の統計によると，昨年までに約600の表面系の構造解析がなされている。そのうちの半数以上が低速電子線回折によるもので，残りはイオン散乱，放射光X線その他というわけである。当然のことながら理論によって定められたという項目はない。そのことで私は半分冗談半分真面目に，10年先の統計の大きな変化は放射光X線に低速電子線回折がその首位をおびやかされることと，理論で構造が確立された表面系の数という項目が現れるに違いないとメールで述べた。彼は比較的真面目にそれをうけとったようで，前者についてはそうかもしれないが，後者についてはそんなつもりはないと生真面目な返事が戻ってきた。理論の過去の寄与は惨憺たるもので，そんな項目を作るほどの実績はないとにべもない調子であった。私もいささかむきになって，最近のカー・パリネロ法に代表される局所密度汎関数法による第一原理の理論計算は十分信頼度をもち，10年先には否応なしにその項目をいれないわけにはいかないだろうといってみた。すぐに返事がやってきて，一言 Pt(110)1×2 の再構成表面のカー・パリネロ法での結果がでれば，私のいい分を信用しようという。

メールはまだ続いたけれどこれくらいにして，この話を紹介していいたかったことは第一原理による表面構造の原子・電子構造の理論の将来は約束されているということであった。すでに表面構造決定手段としての有用性を十分に実証しているし，貴金属金属表面系の研究もそんなに手間取ることもないのではないかと思われる。この方法に関連して期待したいことは，単に結果を得ることだけでなく，そのような結果をもたらす機構，それに含まれる概念などを明らかにすることであろう。それもすでにその方向への試みも現れており，十分楽観的になれる気がする。

（岡山理科大学工学部）