

で self-consistent に計算した。現在まだ完全には self-consistent な解は得られていないが、現時点での傾向を以下に示す。

5層の Ni(100) 面については、 d -band の巾は約 7 eV で表面層では 5.5 eV になっている。2層, 3層の LDOS は bulk 的になって似かよっている。また寺倉の結果や Levin et al⁵⁾ や Fulde et al⁶⁾ の予測とは反対に (Mulliken population によると) 表面層から電子が内部に流れ込む傾向にあり、LDOS も両方のスピンは共に、フェルミレベルで状態数が大きくなり d ホールの数を増やしている。この結果スピン偏極光電子スペクトルへの表面層の寄与は ESP を threshold 付近で負にする方向にある。しかしながら、self-consistency の悪さや relaxation を取り組んでいないこと等の影響も考えられ、今後計算する予定である。また、exchange splitting は約 0.4 eV である。

5層の Cr(100) 面については、 d -band の巾は約 7 eV で表面層では小さくなっている。また、2層, 3層の LDOS は 2 倍の幅になっており、フェルミレベルは状態が小さくなっている所にある。反対に表面層ではフェルミレベルの所で状態密度が高くなってスピン偏極は大きくなって live layer 的傾向になっている。

- 1) Eib and Alvarado, Phys. Rev. Lett. 37 ('76) 444
- 2) Wohlfarth, Phys. Lett. 36A ('71) 131
- 3) Smith and Traum, Phys. Rev. Lett. 27 ('71) 1388
- 4) Smith and Chiang, Phys. Rev. B19 ('79) 5013
- 5) Levin et al, Phys. Rev. B7 ('73) 3066
- 6) Fulde et al, Phys. Rev. B8 ('73) 440

15. 吸着子の光電子放出における多体効果

静岡大工短 山田耕作

金属に吸着した原子(分子)の内殻電子の光電子放出において、終状態での内殻 hole

の screening が重要になり, relaxation shift や peak の Asymmetry として現われる。この問題はすでに金属, 合金の bulk で, Wertheim らにより詳細な実験がなされ, Doniach and Sunjic による次式を用いて解析がなされている¹⁾

$$I(\epsilon) = \frac{\Gamma(1-\alpha)}{(\epsilon^2 + \gamma^2)^2} \cos \left\{ \frac{\pi\alpha}{2} - (1-\alpha) \tan^{-1} \frac{\epsilon}{\gamma} \right\}$$

ここで, γ は hole の寿命による巾, $\epsilon = (\epsilon_k)_{max} - \epsilon_k$, 自由電子では α は phase shift δ_l を用いて, $\alpha = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\frac{\delta_l}{\pi} \right)^2$ と与えられる。上式は γ を 0 にすると $\epsilon^{-(1-\alpha)}$ となる。

一般に Asymmetry の程度を決める α は Anderson の直交定理により定まる量であるが, この定理は inseparable potential や電子間相互作用のある場合にも成立し, S-matrix \hat{S} の Fermi 面での値を用いて表わされる事が示される²⁾。それ故, α は一般に

$$\alpha = \frac{1}{(2\pi)^2} \left\{ \text{Im Tr} \left[\ln \hat{S}_f(0) - \ln \hat{S}_i(0) \right] \right\}^2$$

と表わされ, 吸着子の系にも適用できる。又, すでに Friedel sum rule は

$$Z = \frac{1}{2\pi} \text{Im Tr} \left[\ln \hat{S}_f(0) - \ln \hat{S}_i(0) \right]$$

と表わされることが知られている³⁾。

上のような拡張は貴金属の小さい α を理解する上でも必要であり, すでに定量的な議論がなされている。

現在, 吸着子の光電子放出における α を定量的に求めることはまだなされていないが, その side peak に intrinsic な surface plasman が発見された Bradshaw らの Al(111) 面に吸着した O_{1s} core の main peak に明らかに Asymmetry が見られ⁴⁾ いずれそのような解析が進むものと思われる。

relaxation shift を議論した Lang と Williams の計算によれば, 終状態では core hole の screening は吸着子の空いている最低エネルギー準位へ金属から電子が移動する描像で近似されることが示されている (Na, Si, Cl)。

Friedel sum rule (今の場合 $z=1$) と直交定理をあわせて考えると, bulk に比べて表面では対称性が低くなるため, 縮退がとけ, 一般に α が大きくなる事が予想される。

逆に α を実験的に求める事により最低励起状態の縮重度が判断できる。

以上の議論は吸収端の異常にも始状態で励起された電子の phase shift を考慮すれば、同様に適用できる。

- 1) S. Doniach and M. Sunjic, J. Phys. C, 3 (1970), 285
- 2) K. Yamada and K. Yoshida, Prog. Theor. Phys. 62 (1979), 363
- 3) J. S. Langer and V. Ambegaokar, Phys. Rev. 121 (1961), 1090
- 4) A. M. Bradshaw, W. Domcke and L. S. Cederbaum, Phys. Rev. 16 (1970), 1480.
- 5) N. D. Lang and A. R. Williams, Phys. Rev. B16 (1977), 2408

16. 吸着層における IC-IC, IC-C 転移

東大物性研 斯波 弘 行

グラファイトを下地とする(a)重い希ガス原子 (Ar, Kr, Xe) のモノレイヤーあるいは(b)簡単な分子のモノレイヤー, 及び金属を下地とする(c)重い希ガス原子層 (Cu, Ag の様々な結晶面, Pd, Nb などの上の Xe, Ar) あるいは(d)アルカリ金属 (W上の Na など) モノレイヤーで, 下地とモノレイヤーの三角格子の間の相対関係について様々な興味ある実験の報告があり, まずそれを簡単にレビューした。その後, この中で最も簡単な系であるグラファイトを下地とする重い希ガスモノレイヤーに対する理論研究 —— 下地とモノレイヤーの結晶軸の回転角 θ の問題, $\theta \neq 0$ の不整合相 (incommensurate, IC) と $\theta = 0$ の不整合相の間の相転移, 不整合, 整合 (incommensurate-commensurate, IC-C) 相転移について —— の現状を話した。