

バルクとは異なり、表面のような異方性の強い物質の電子状態をセルフ・コンシステントに求めない方法は、初期状態のポテンシャルの作り方（中性原子やイオンのポテンシャルの重ね合せ）に非常に依存するため、よい近似ではない。そのために固体以上にセルフ・コンシステントに計算することが重要となる。

DV- $X\alpha$ 法によるバンド計算に際して行った種々の近似方法について精度を検討した。マトリックスの積分のための乱数の点の数によりバンドの全体の構造は比較的变化しないことや、たとえばダイヤモンドについては $3s$ 軌道までと、平面波近似よりも比較的少ない軌道数で、よく知られたダイヤモンドのバンド構造が得られることを示した。また重い原子にも使えるように Kahn の pseudo-potential 法を導入した。

最後に、電荷分布を各構成原子に振り分ける際、Mulliken あるいは Löwdin population による方法は定量的には意味がなく、Bond の方向性を出すような最適一致法で電荷分布を振り分け、結合性を議論することが必要であることを示した。

14. $3d$ 遷移金属表面の電子スピン分極

電通大 平下紀夫, 神原武志, 権平健一郎

表面磁性は表面物理の中でも興味ある分野の一つである。いくつかの $3d$ 遷移金属の表面における電子スピン分極はバルクのものとは異なることが観測されている。Ni の表面は実験的にも理論的にも最も研究されている系の一つであるが、その表面磁性に関しては明確な解答は出ていないのが現状である。スピン偏極光電子スペクトルの実験結果¹⁾は、Wohlfarth²⁾ や Smith と Traum³⁾ によってバンド理論の立場から（初期状態の状態密度の形から）うまく説明された。しかし Smith と Chang⁴⁾ が最近終状態も考慮して結合状態密度 (k_{\parallel} を保存している) を計算して実験のスペクトルと比較すると定性的にも一致しない結果が得られた。但し彼らの計算はバルクのバンド計算に基づいたものであり表面の効果は入っていない。

そこで我々は表面の効果調べる為に、薄膜の電子構造を spin-polarized DV- $X\alpha$ 法

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