

強磁性 Ni 薄膜の表面状態

大阪大学理学部物理 寺 倉 清 之

最近の、強磁性遷移金属に対する光電効果、電界放出及びトンネルの実験¹⁾によるスピン偏極の測定や、Liebermann等²⁾による表面の「dead layer説」又、それに対する反証としての新庄等³⁾によるCo表面でのメスバウア効果の測定は、互に一見相反するように見える所が多く、統一的に説明する試みはほとんどないが、とも角金属表面の理論的研究を大いに刺激した。ここでは単純ではあるが、バルクのNiのdバンドについてはある程度は現実的であると思われる tight-binding のモデル⁴⁾に基いて、Niの薄膜の電子状態を調べ、上記の実験の理解に対する一つの足がかりとなることを目的とする。

まず、薄膜の各層毎の状態密度を求める。計算は(100), (110), (111)の各面について行ったが、それぞれの面について、表面の原子は8, 7, 9ケの最近接原子を持っており、バルクでの12ケに較べて少い。その為に表面の状態密度は巾が狭くなる。特にNiの強磁性で重要な役割を担っている、dバンド上端近くのピークがくずれて、磁氣的性質に大きな変化が生じる⁵⁾。所で、真中の層ではバルクの状態密度とかなりよく似ている。層毎の磁気モーメントを決めるのに、単一バンドの近似を用いて有効dレベルを

$$E_{d,\sigma}^{(n)} = E_d + U^{(n)} n_{-\sigma}^{(n)} + D^{(n)}$$

とする。上の添字のnは層の番号、 $U^{(n)}$ は有効クーロン積分、 $n_{-\sigma}^{(n)}$ は $-\sigma$ スピンの電子数で $D^{(n)}$ は表面での種々の乱れによるポテンシャルのシフトである。self-consistent に $E_{d,\pm\sigma}^{(n)}$, $n_{\pm\sigma}^{(n)}$ を求めて各層毎の状態密度と磁気モーメントを計算する。図1に(100)面での表面の状態密度を示した。実線がそれであって、破線はバルクのものと比較の為に示してある。ただし、ここではdバンドの巾を2として、 $U^{(n)}$ を表面以外では0.4、表面では0.3とし $D^{(n)}$ は表面で0.05、それ以外では0とした。ここで重要なことは、表面では多数スピンの状態もフェルミ面で有限の状態密度を持っている

ことである。これは、表面の状態密度のくずれによって、 $\downarrow$ スピンの電子数が多くなり、それによるクーロン斥力で、表面での $\uparrow$ スピンのdレベルが高くなりバルクのdバンドの上に表面に局在した状態ができる為である。(111)面でも上記のパラメータでは同じ傾向であって、多数スピンのフェルミ面での状態密度は(100)面でもより大きい値を持つ。一方、(110)面では $\uparrow$ スピンの状態がdバンドの上に局在した表面状態をつくるが、フェルミ面を起すことはないようである。とも角、これらの計

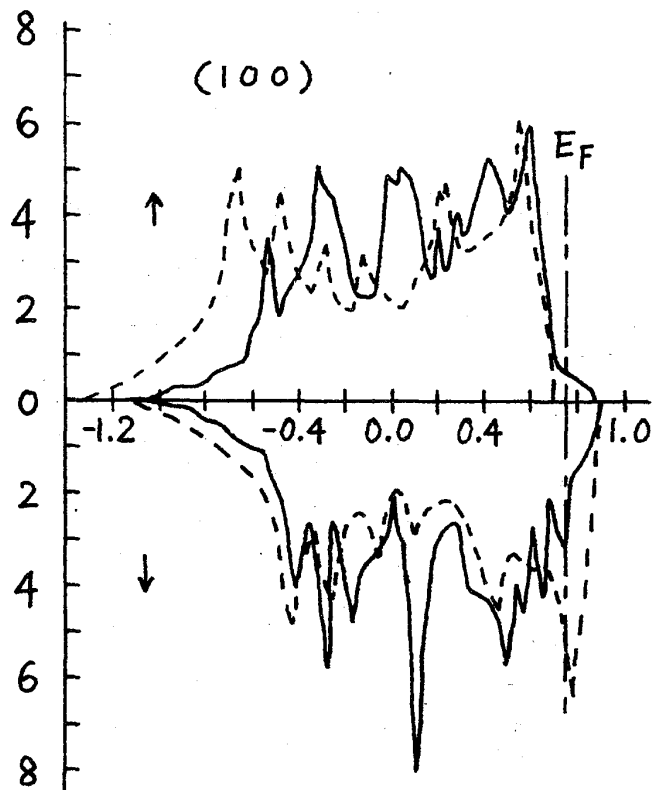


図 1

算結果は、実験でのスピン偏極の符号に関して、バルクのバンド計算よりは有利な方向に行っているが、状態密度だけからではなお実験の符号と一致しない。Watson⁶⁾は物理的には同じ考えから、もっと簡単なモデルで状態密度のフェルミ面での反転の可能性を指摘したが、それは実際のNiでは、ほとんどないように思える。しかし、 $\uparrow$ と $\downarrow$ のスピンではフェルミ面での状態が違っているので、遷移の行列要素の値が異なり、実験のスピン偏極の符号を説明できるという可能性は残されている。次に、磁気モーメントについて言えば、表面ではバルクの $\frac{1}{2} \sim \frac{1}{4}$ の大きさになっており、2層目以下の変化も考慮すると、表面当り約1層分の磁気モーメントの減少が得られ、Liebermann等の実験を支持する結果となった。しかし、新庄等の実験との関連は明らかでない。今後の実験として、電界放出での電界強度を変えた実験、トンネルでは、絶縁体の厚さを変えた実験を行うと、スピン偏極でd電子の寄与の仕方について、新しい情報が得られるように思われる。

佐久間哲郎

文 献

- 1) P.M. Tedrow and R. Meservey, Phys. Rev. B7(1973)318. 及びこの中の
文献
- 2) L. Liebermann, J. Clinton, D.M. Edwards and J. Mathon, Phys. Rev.
Lett. 25(1970)232.
- 3) T. Shinjo, T. Matsuzawa and T. Takaea, to be published in J. Phys.
Soc. Japan.
- 4) G. C. Fletcher, Proc. Phys. Soc. A65(1952)192.
- 5) K. Terakura, J. Phys. Soc. Japan. 34(1973)1420.
- 6) P. Fulde, A. Luther and R. E. Watson, preprint.