

層が第2原子層と一致した表面)であり、また、GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)As に対しては理想表面、表面As原子層が0.19Åばかり真空側へ expand した表面、及びAsとGaとの二重層間隔に等しい距離だけ expand (doubly expand) した表面である。ここで、0.26Åのrelaxationと0.19Åのexpansionとは、Paulingの共有結合に対するbond orderとbond lengthとの経験的な関係から見積った値に、GaAs結合のイオン性に対するわずかな補正を施したものである。また、Ga面が完全にrelaxした場合にはその幾何学的配置から、Gaのdangling-bondがpureな p_z でback-bondが sp^2 型混成となることが予想され、他方As面がdoubly expandすればback-bondはAsとGaとの p 軌道のみからなり、表面原子の s 電子はnonbonding的なlone pair characterを呈すると予想される。

以上のような表面緩和によるGa及びAs原子軌道の再混成(rehybridization)が表面電子構造に及ぼす効果を、表面バンドと電子状態密度について調べる。いずれの表面においてもdangling-bond並びにback-bondに付随した新しい表面状態が出現し、その特徴は上述のような表面の幾何学的構造による原子軌道のrehybridizationを良く反映している。計算によって得られた表面状態のエネルギー分布とUPSによる測定結果との比較も行う。

- 1) W. Ranke and K. Jacobi, Solid State Commun. 13, 705 (1973); Surf. Sci. 63, 33 (1977);
K. Jacobi, C. V. Muschwitz, and W. Ranke, Surf. Sci. 82, 270 (1979)
- 2) M. Nishida, Solid State Commun. 31, 513 (1979)

13. DV-X α 法による固体及び表面のバンド計算

分子研 里 子 允 敏

表面のバンド計算を行う方法として、バルクのバンドを再現するようなパラメータを用いたLCAO法がある。しかし、表面とバルクとで、同じパラメータを用いることは疑問がある。そのために、第一原理から表面のバンド計算を行う必要があろう。

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小さい軌道数で、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