

4. ステップのある W (001) 表面再構成の計算機実験

萩野徹男

W(001) 水素吸着表面は低被覆度で $\langle 10 \rangle$ 方向に W が変位する $\sqrt{2} \times \sqrt{2} R45^\circ$ 構造となる。この表面に高い密度で $\langle 10 \rangle$ ステップが存在する時、平らな表面では同等であった $\langle 10 \rangle$ と $\langle 01 \rangle$ 方向の変位をもつ相のうちステップエッジに垂直な変位をもつ $\langle 10 \rangle$ 相が優先的に現れる。

また室温付近以下の低温で再構成相転移を起こし $\langle 11 \rangle$ 方向に W が変位する $\sqrt{2} \times \sqrt{2} R45^\circ$ 構造となる W(001) 清浄表面は $\langle 10 \rangle$ ステップの存在によって長距離秩序変数の温度変化曲線が平らな表面に比べて丸められる。

この W (100) 水素吸着再構成表面系に対して、表面 W 原子の変位モデルと、吸着水素原子の格子ガスモデルを組合せたものに基づいて、ステップの効果としてステップエッジ上の W 原子に実効的なポテンシャルの変化を与えた現象論的なハミルトニアンを設定しモンテカルロ法による計算機実験をおこなった。

$\langle 10 \rangle$ ステップのある清浄表面に対して長距離秩序変数の温度変化曲線を計算しステップエッジ上のポテンシャルの種類や強さを変えて相転移現象に与える影響を見た。その結果、温度変化曲線の丸めおよび相転移温度の低下は主にステップによって Domain の大きさが制限されたことからくる有限サイズの効果である結果を得た。

清浄表面と同じステップ上のポテンシャルのモデルに対してさらに水素吸着表面について計算を行なった結果、エッジに垂直方向の変位をもつ相が表われるという効果を再現することができた。また、エッジ上のポテンシャルによるテラス内の水素の分布からこのモデルでステップの効果が及ぶ範囲を知ることができた。

参考文献

- [1] J.F.Wendelken, J.Electron.Spectroscopy 38 (1986) 209
- [2] J.F.Wendelken and G.-C.Wang, Phys.Rev.B 32 (1985) 7542