# 吸着子のある微斜面での非普遍的ふるまい

## RSOS-Ising 結合模型における密度行列繰り込み群解析

大阪電気通信大学 工学部　阿久津典子[1]
阪大大学院 理学研究科　阿久津泰弘[2]
群馬大学 工学部　山本隆夫[3]

## 1 はじめに

$z$ 軸に垂直な結晶表面を，その面のラフニング温度$T_R$以下で，わずかに傾けた面を微斜面と呼ぶ．微視的に微斜面 $z(x,y)$ を考えると，$x$ 軸方向に傾けた微斜面は，$z$ 軸に垂直な結晶面をテラスとし，平均として $y$ 方向に走るステップ列から構成されている．結晶微斜面のステップ密度を $\rho$と書けば，微斜面の傾き $\overrightarrow{p}=(p,0,0)$ は $p=\partial z(x,y)/\partial x=\rho a_z$ となる．ここで，$a_z$ $(=1)$ はステップ１段の高さである．

結晶微斜面は，１次元自由フェルミオン系と同じ普遍的クラスに属し [1]，Gruber-Mullins-Pokrovskii-Talapov (GMPT) 型の普遍的振る舞い [2] を示す．射影表面自由エネルギー $f(p)$ は

$$f(p)=f(0)+\gamma|p|/a_z+B(|p|/a_z)^3+O(|p|^4), \tag{1}$$

となる．ここで $f(p)$ に $p$ の２次の項が無いことが普遍的振る舞いと呼ばれるものであり，$\gamma$はステップ張力，$B$ はステップ間相互作用係数と呼ばれる．さらに，傾きに共役な外場 (面を傾かせようとする外場) である Andreev 場 $\eta$[3] を導入すると

$$\eta=\partial f(p)/\partial p=\gamma/a_z+3B|p|^2/a_z^3+O(|p|^3) \tag{2}$$

となり，$p$-$\eta$曲線において，$p=0$ からの $p$ 立ち上がりが $p\propto\sqrt{\eta-\eta_c}$ $(\eta_c=\gamma/a_z)$ となる．

１次元自由フェルミオン系と同じ普遍的クラスに属することは以下のようにして理解できる．平均としてステップが走る方向を時間軸とみなし，ステップの空間的位置揺らぎをフェルミオン粒子の時間的位置揺らぎとみなせば，微斜面系は１次元的に並んだ粒子系になる．ラフニング温度以下であれば，いわゆるオーバーハング構造はエネルギー的に不利となって現れず，solid-on-solid (SOS) 条件が満たされる．そのため，ステップは互いに交差できなくなり，１次元粒子系はフェルミオン粒子系として記述される．

[1] E-mail:nori@phys.osakac.ac.jp
[2] E-mail:acts@phys.sci.osaka-u.ac.jp
[3] E-mail:yamamoto@phys.sci.gunma-u.ac.jp

また，微斜面を記述する2次元表面格子模型は，転送行列のハミルトニアンを1次元量子系へマップすることが可能であるため，1次元量子スピン系と近い関係にある [4]．すなわち，$p$ は磁化 $M$ に，$\eta$は磁場 $H$ に，対応する．

$f(p)$ が普遍的な $p$ 依存性を持ち，ステップ間相互作用が実効的に短距離反発系である場合，$B$ は一本のステップのステップ・スティフネス$\tilde{\gamma}$と

$$B = \frac{\pi^2}{6}\frac{(k_{\rm B}T)^2}{\tilde{\gamma}}. \tag{3}$$

のような普遍的関係式を満たす [5]．この，ステップ・スティフネスは温度上昇とともに減少し，Si(001) 面では観測値と理論計算値が良く一致することが示されている [6, 7]．

しかし，最近，B-doped Si(001) では，温度上昇とともにステップ・スティフネスが増大することが，報告され [8]，Si(111) 面の高温領域でもステップ・スティフネスの増大が報告されている [9]．また，一般に，吸着子があると表面の構造が変化し，ステップ諸量も変化する．そこで，これらの吸着子の秩序化と表面の荒れの競合関係をステップの立場から理解するため，RSOS-Ising 結合 (RSOS-IC) 模型 [10, 11] の微斜面を，密度行列繰り込み群 (DMRG) 法 [12] の一種である積波動関数繰り込み群 (PWFRG) 法 [13] で調べる．

## 2　吸着子のある微斜面の統計力学模型

表面最上層にある被覆率1以下の吸着子を Ising 模型で表し，表面の凹凸を 正方格子 restricted solid-on-solid (RSOS) 模型 [14] で表し，両系が相互作用をすると考えた RSOS-Ising 結合模型 (RSOS-CI 模型) [11] は以下のハミルトニアンであらわされる；

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\rm RSOS-IC} \;=\; & \sum_{m,n}\{\epsilon[1-\alpha\sigma_y(m,n)]\cdot|h(m+1,n)-h(m,n)| \\ & +\epsilon[1-\alpha\sigma_x(m,n)]\cdot|h(m,n+1)-h(m,n)|\} \\ & -H\sum_{m,n}[\sigma_x(m,n)+\sigma_y(m,n)], \\ & -J\sum_{m,n}[\sigma_x(m,n)\sigma_y(m,n)+\sigma_x(m,n)\sigma_y(m-1,n)],\end{aligned} \tag{4}$$

ここで，位置 $(m,n)$ の表面高さを $h(m,n)$，RSOS 模型のキンクエネルギーを$\epsilon$とし，最近接格子点間の高さの差は $\{\pm1,0\}$ という制限が暗黙に課せられている．$\sigma = \pm1$ をスピン (吸着子の有無) 変数，RSOS-スピン結合定数を$\alpha$，スピンに働く外場（吸着子の化学ポテンシャル）を $H = (1/2)k_{\rm B}T\ln P+$ const.，$P$ は吸着子の環境相における蒸気圧 (理想気体近似)，$J$ は Ising 結合定数 (吸着子の面内相互作用定数)，とする．また，$\sigma$はSOS カラムの辺の位置に置き，$x$ $(y)$ 軸と平行な辺上のスピンには $x$ $(y)$ の添え字を付ける．

さらに，表面を傾かせる Andreev 外場，$\eta$，により，微斜面のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\rm vicinal} = \mathcal{H}_{\rm RSOS-IC} - \eta\sum_{m,n}[(h(m+1,n)-h(n,m))] \tag{5}$$

のように得られる．

(5) 式のハミルトニアンには，$\epsilon, J, \alpha$の三つのミクロなパラメタと，$\eta, H, T$ の三つの熱力学的示強変数とがある．

分配関数 $Z$ より，直接求まる量は $f(p)$ をルジャンドル変換した Andreev 自由エネルギー$\tilde{f}(\eta)$ である [3, 15]．すなわち，

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{\{h(m,n)\}} \sum_{\{\sigma_x(m,n)\},\{\sigma_y(m,n)\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\mathrm{vicinal}}}, &(6)\\
\beta \tilde{f}(\eta) &= -\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln Z, &(7)\\
\tilde{f}(\overrightarrow{\eta}) &= f(\overrightarrow{p}) - \overrightarrow{\eta} \cdot \overrightarrow{p}, &(8)
\end{aligned}
$$

ここで $N$ はRSOS 系の格子点数, $\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$, $k_{\mathrm{B}}$は Boltzmann 定数, $T$ は温度，$\overrightarrow{p} = (p, 0, 0)$, $\overrightarrow{\eta} = (\eta, 0, 0)$，である．

微斜面のハミルトニアンを，decorated vertex 模型 ($16 \times 19$ vertex 模型) へマップし，転送行列法により微斜面の表面熱力学諸量を数値的に計算する．その際, 転送行列の最大固有値の基ベクトルを効率的に求めるためにPWFRG アルゴリズムを適用する．

## 3　主な結果

・熱平衡状態であってもステップ・バンチングが起こること [10, 11]

ステップ・バンチングとは，結晶微斜面でステップが集まって束になる現象のことである．これまでは，動的な原因によるステップ・バンチングのみ理論的に知られていた．我々の得た計算結果のよれば，平衡状態であっても，引力型 ($J > 0$) の吸着子があれば，広いパラメタ領域でステップ・バンチング，または準ファセット形成，はふつうに起こってしまうことが解った．すなわち，$p$-$\eta$曲線において，普遍的な振る舞いである $p \propto \sqrt{\eta - \eta_c}$とはならず，$p$ がある$\eta_q$で不連続に飛んでしまう (1 次相転移) 現象を発見し，サーマル・ステップ・バンチングと呼んでいる．また，バンチした表面領域とそうでない表面領域では吸着子の偏析が生ずる．

・吸着子間相互作用定数がレリバントなパラメタであること [11, 16, 17]

$J = 0$ の場合，ハミルトニアン (4) は厳密にオリジナルのRSOS 模型になることを示した [16]．このとき，ミクロなレッジエネルギー$\epsilon$は吸着子の配置自由度が繰り込まれて$\epsilon^{\mathrm{eff}}(T, H)$ に置き換えられる．これまで，マクロステップ生成と吸着子間相互作用の関係について全く言及されて来なかったが，この吸着子層内の吸着子間相互作用が重要なパラメタであることを明確に示した [11, 16, 17]．

・サーマル・ステップ・バンチングの起源の解明 [11, 17]

サーマル・ステップ・バンチングの起源は $J > 0$ の場合二つあることを示した．一つは，吸着子の秩序状態の入れ替えによる 1 次相転移であり，もう一つは，吸着子を媒介とするステップ間引力が発生することである．ステップ間引力が（何らかの理由で）あったと仮定した上での研究は，これまでもいくつかあったが [18, 19]，実際にステップ間引力をミクロな模型から導いたのは我々の研究が世界で初めてである．起源が解明されたので，吸着子を利用した，ステップの離合集散

を制御する本質的に新しい方法の基礎論を提供した.

## 謝辞

この研究は日本学術振興会「未来開拓プロジェクト」(JSPS-RFTF97P00201) および文部省科学研究費 (No.09640462) の援助を受けてなされたものであることを記し，謝意を表します.

## 参考文献

[1] F. D. M. Haldane and J. Villain, J. de Physique **42** (1981) 1673. T. Izuyama and Y. Akutsu, J. Phys. Soc. Jpn. **51** (1982) 50. T. Yamamoto and T. Izuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **56** (1987) 632. C. Jayaprakash, W. F. Saam, and S. Teitel, Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 2017. H. J. Schultz, J. Phys. (Paris) **46** (1985) 257; G. F. Gallet, P. Noziéres, S. Balibar and E. Rolley, Europhys. Lett. **2** (1986) 701.

[2] E. E. Gruber and W. W. Mullins, J. Phys. Chem. Solids **28**, 6549 (1967). V. L. Pokrovsky and A. L. Talapov, Phys. Rev. Lett. **42**, 65 (1979) [Sov. Phys. JETP **51**, 134 (1980)].

[3] A. F. Andreev, Zh. Eksp. Theor. Fiz. **80**, (1981) 2042 [Sov. Phys. JETP **53** (1982) 1063].

[4] J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **48** (1979) 659. K. Rommels and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 2578.

[5] Y. Akustu, N. Akutsu and T. Yamamoto, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 424. T. Yamamoto, Y. Akutsu and N. Akutsu, J. Phys. Soc. Jpn. **57** (1988) 453.

[6] N. Akutsu and Y. Akutsu, Phys. Rev. **B57** (1998) R4233.

[7] N. C. Bartelt, R. M. Tromp, and E. D. Williams, Phys. Rev. Lett. **73** (1994) 1656.

[8] J. B. Hannon, N. C. Bartelt, B. S. Swartzentruber, J. C. Hamilton, and G. L. Kellogg, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 4226.

[9] A.V. Latyshev, H. Minoda, Y. Tanishiro, and K. Yagi, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 94. A. B. Latyshev, A. L. Aseev, A. B. Krasilnikov and S. I. Stenin, Surf. Sci **213** (1989) 157.

[10] N. Akutsu, Y. Akutsu and T. Yamamoto, Prog. Theor. Phys. **105** (2001) 323 (http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/ ~ptpwww/), (cond-mat/9903448).

[11] N. Akutsu, Y. Akutsu and T. Yamamoto, Surf. Sci. **493**/1-3 (2001) 475, (cond-mat/0011210).

[12] S.R. White: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863.

[13] T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 3598. T. Nishino and K. Okunishi: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 4084. Y. Hieida, K. Okunishi and Y. Akutsu, Phys. Lett. A **233**, (1997) 464. K. Okunishi, Y. Hieida and Y. Akutsu, Phys. Rev. B **59** (1999) 6806.

[14] K. Sogo, Y. Akutsu and T. Abe, Prog. Theor. Phys. **70**, (1983) 739. T. T. Truong and M. den Nijs, J. Phys. A**19**, (1986) L645. Y. Honda and T. Horiguchi, Phys. Rev. E**56** (1997) 3920.

[15] 太田隆夫: 物理学最前線 10 "界面の不安定性とパターン形成", 共立出版 (1985)

[16] N. Akutsu, Y. Akutsu and T. Yamamoto, Phys. Rev. B**64** (2001) 085415-1, (cond-mat/0104559).

[17] N. Akutsu, Y. Akutsu and T. Yamamoto, 投稿準備中.

[18] V. B. Shenoy, S. Zhang, and W. F. Saam, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 3475. D.-J. Liu and J. D. Weeks, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 1694.

[19] K. Sudoh and H. Iwasaki, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 216103. J.-K. Zuo, T. Zhang, J. F. Wendelken, and D. M. Zehner, Phys. Rev. B **63** (2001) 033404. N. Shimoni, S. Ayal, and O. Millo, Phys. Rev. B **62** (2000) 13147.