

3. Si(100)表面ランダム系の電子状態

井 上 耕一郎

Si(100)表面のバックルッド・ダイヤモンド模型において、ダイヤモンド列に垂直な方向の秩序の乱れが表面電子状態に及ぼす影響を数値計算で調べた。このために、ダイヤモンド列方向には、反強磁性的に秩序化されており、列に垂直な方向には秩序の乱れがある系を考えた。計算法は、ダングリングボンドのみを考慮したTight binding近似で、Transfer Integralをパラメーターとして導入した。パラメーターは、Chadiによる (2×1) 構造でのバンド計算の結果に良く合うように (2×1) 構造のパラメーターを設定し、乱れた構造に対しては (2×1) 構造のパラメーターを修正してもちいた。乱れた構造の決定は、一次元イジング模型を用いたモンテカルロ・シミュレーションで行った。計算の結果、ダイヤモンド列に垂直な方向に乱れがある場合でも、波数空間に投影した状態密度には鋭いピークが現れた。さらにそのピークは、ダイヤモンド列方向にも、列に垂直な方向にも、波数によって位置を変え、ピークの位置の温度依存性は小さいという結果が出てきた。

4. Incommensurate 相における核生成

小 川 淳 司

Incommensurate 相内で急に温度を変えたときの状態間の緩和は、核の発生、成長という過程のくり返しにより進行する。そのマイクロな核生成($R_c \ll l$, R_c : 臨界半径, l : Discommensuration 間距離)については, Commensurate 相での核生成として、またマクロな核生成($R_c \gg l$)については、連続体近似により超流動ヘリウムとのアナロジーから論じられている。本研究では、この2つの極限的領域の中間の場合における核生成について調べることを試みた。

また、既に Incommensurate 相中に核が存在し、Discommensuration が modulate されている状態における核生成について調べた。その核間相互作用エネルギーを、連続体近似の範囲で求めた。