

Formation of a Comb-Like Step Pattern on a Vicinal Face

メタデータ	言語: eng 出版者: 公開日: 2019-09-12 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: メールアドレス: 所属:
URL	https://doi.org/10.24517/00052106

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 International License.



総合報告

微斜面上での櫛状ステップパターンの形成

佐藤正英^{1*}・三浦均²・上羽牧夫³

Formation of a Comb-Like Step Pattern on a Vicinal Face

Masahide Sato^{1*}, Hitoshi Miura², and Makio Uwaha³

We carry out a phase field simulation to study the formation of a comb-like step pattern induced by a straight adatom source advancing in front of a step. The asymmetry of the surface diffusion field induced by the adatom source causes step wandering and small protrusions are formed. The step pattern is changed by the velocity of the adatom source, V_p . When V_p is larger than a critical value V_p^c , the step cannot follow the adatom source. A seaweed-like pattern is formed with small ϵ_4 and a dendritic pattern is formed with large ϵ_4 , where ϵ_4 represents the strength of the anisotropy of step stiffness. When $V_p < V_p^c$, the protrusions follow the adatom source: the comb-like pattern with straight finger-like protrusions, which is induced by step wandering triggered by noise, is formed. For a small V_p , the period of protrusions depends on the strength of noise, but the dependence of the period on the noise strength is weak when V_p is near V_p^c . The relation between the period and V_p approaches to that between the width of a channel and the velocity of a needle-like step in the free growth in a channel.

1. はじめに

1.1 表面拡散場の非対称性によるステップの蛇行

平坦面からわずかに傾いて直線的なステップが等間隔に並んだ面は微斜面と呼ばれる。ステップ間に引力がないならば平衡では微斜面は安定になり、平均としては直線的なステップが等間隔に並んでいるステップ列が現れる。しかし、この微斜面上のステップ列は、成長もしくは昇華・溶解しているときに不安定になることがある。不安定化の結果として、ステップの束形成(バンチング)や、ステップに沿った揺らぎに対して不安定になる蛇行が起きることがある¹⁾。

これらの不安定性を引き起こす原因の一つに、ステップの前後の表面拡散場の非対称性がある。拡散場の非対称性の一つの代表的な要因としては、シュウェーベル(Schwoebel)効果^{2,3,4)}と呼ばれる上段のテラスからと下段のテラスからのステップへの原子の取り込みの非対称性が挙げられる。Bales等⁵⁾は、表面拡散場中に孤立しているステップのシュウェーベル効果による蛇行について理論的に調べた。蛇行の振幅の増加による非線形性まで考慮する^{6,7)}と、ステップの挙動は蔵本-シバシンスキー(Kuramoto-Sivashinsky)方程式^{8,9)}で表され、ステップはカオス的な振る舞いをすることを指摘した。しかし、ステップ間隔が十分に狭くて結晶表面からの吸着原子の蒸発が無視できる場合には、ステップのカオス的な動きが抑えられる。全てのステップが位相をそろえて蛇行することで、ステップに垂直な方向に一定周期で溝状構造ができる^{10,11,12,13)}。吸着原子のドリフト流がある場合にも拡散場の非対称性が生じ、ステップがカオス的な振る舞いや溝状構造を作ることが示されている^{14,15,16,17,18,19,20,21,22)}。

1 金沢大学総合メディア基盤センター 〒920-1192 金沢市角間町

2 名古屋市立大学大学院システム自然科学研究科 〒467-8501 名古屋市瑞穂区瑞穂町山の畑 1

3 愛知工業大学基礎教育センター 〒470-0392 豊田市八草町八千草 1247

1 Information Media Center, Kanazawa University, Kakuma-machi, Kanazawa 920-1192, Japan

2 Department of Information and Basic Science, Nagoya City University, Mizuho-cho, Mizuho-ku, Nagoya, 467-8501, Japan

3 Center for General Education, Aichi Institute of Technology, 1247 Yachigusa, Yakusa-cho, Toyota 470-0392, Japan

* Corresponding author (E-mail: msato002@staff.kanazawa-u.ac.jp)

1.2 シリコン表面でのステップの櫛状蛇行パターン

日比野らは、比較的まっすぐで側枝がない指状の枝が周期的に並んだ櫛状のステップのパターンを、ガリウム入射時のシリコン(111)微斜面で観察した²³⁾。ステップはカオス的な挙動を示さない。また、テラス幅よりも短波長で蛇行しているので溝状のパターンも形成しない。このパターンは第1.1節で挙げたような蛇行パターンとは大きく異なっている。

この不安定化はガリウムを入射したことによる結晶表面構造の変化によると日比野らは考えた。実験が行われている温度では、シリコン表面は 7×7 構造である。ここにガリウムを入射すると $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造に変化する。さらにガリウムを入射すると、ステップの近傍から 6.3×6.3 構造に表面構造が変化する。 6.3×6.3 構造に変化する際に、余剰となったシリコン原子が $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造と 6.3×6.3 構造の相境界から結晶表面に放出される。この放出されたシリコン原子が表面拡散してステップ位置に到達して固化することでステップが前進する。主にステップ前方の相境界からステップへ原子が供給されるため、ステップの前後で表面拡散場の寄与が非対称となり、ステップがマリンス-セカーカ(Mullins-Sekerka)型の不安定性を起こして蛇行する。

相境界の前進に伴い相境界から放出される原子の量は、ステップを相境界と同じ距離だけ進めるのに必要な原子の量の半分だけである。もしも不安定化が起きずに直線ステップのままであったらならば、ステップは原子供給源にとり残される。蛇行により前方に突出した部分が形成され、主としてこの部分で固化が起きることで、突出部分の先端が原子供給源に追従して前進する。

1.3 これまでの理論的な研究

表面拡散場の非対称性があることでステップが不安定化することは分かる。しかし、不安定化したステップから規則的な櫛状パターンが形成されることまでは日比野らの考えからでは予測できない。そこで、できるだけ簡素化したシミュレーションを行ってステップの挙動を調べることとする。この系の最も特徴的な点はステップ前方に前進する原子供給源がある点である。表面構造の違いなど複雑な要因は無視して、この点に焦点を当てたモデルを構築し、シミュレーションを行った。

格子模型によるモンテカルロ・シミュレーション^{24, 25)}からは、指状の枝からなる櫛状ステップが形成されることがわかった。枝の周期は、実験²³⁾と同様に粒子供給源の移動速度 V_p の二分の一乗に反比例して減少する。また、格子の異方性があることが安定な櫛状パターンの形成に重要であることがわかった。しかし、我々の用いた格子モデルでは自由に異方性を制御することができない。定常成長時の櫛状パターンの指状枝の周期の決定には、ノイズの大きさも影響していると考えられるが、ノイズの大きさを制御することも難しい。そこで、異方性とノイズに注目するために手法を変え、フェーズフィールド・シミュレーション²⁶⁾を行うこととした。

以下では、我々が行ったフェーズフィールド・シミュレーションの結果^{27, 28)}を中心に報告する。第2節ではモデルを導入する。第3節ではシミュレーション結果について述べる。まず、櫛状パターンを作るパラメータの範囲を調べたのちに、櫛状パターンの性質を調べる。特に、原子供給源速度が遅いときの振る舞いを中心に調べる。第4節でまとめを行う。

2. モデル

シミュレーションでは、 x 方向に沿って存在する直線的な孤立ステップが y 方向に前進する系を考える。直線的な原子供給源は、ステップの直前で原子を放出しながら一定速度 V_p で前進する。過飽和度 u を $u(x, y) = \Omega(c(x, y) - c_{eq}^0)$ で定義する。ここで、 Ω は原子1個が占める面積、 $c(x, y)$ は吸着原子密度、 c_{eq}^0 は平衡吸着原子密度である。本研究では、実験²³⁾を考慮して原子供給源が放出する原子密度 u_0 を0.5とする。

離散的ステップ流モデルでは、ステップ位置で不連続的に結晶の高さが変わるが、ここでは、Fig. 1のように-1から1まで滑らかに値が変化するフェーズフィールド変数 $\phi(x, y)$ を導入してステップを記述する。ステップの挙動はフェーズ変数の時間変化により記述される。フェーズ変数の時間変化を決めるのが、以下で与えられるフェーズ変数の自由エネルギーである。

$$\mathcal{F} = \int dx dy \left[\frac{1}{2} \{W(\theta)\}^2 |\nabla\phi|^2 + F(\phi, u) \right]. \quad (1)$$

フェーズ変数の勾配の大きさ $|\nabla\phi|$ が大きいところがステップに相当しており、 $W(\theta)$ が界面幅に相当する。(1)式で界面幅には異方性を持たせて、

$$W(\theta) = W_0(1 + \epsilon_4 \cos 4\theta), \quad (2)$$

とする。 W_0 と ϵ_4 はそれぞれ正の定数であり、ステップが x 軸となす角度 θ は $\theta = \tan^{-1}(\partial_y\phi/\partial_x\phi)$ で与えられる。ここ

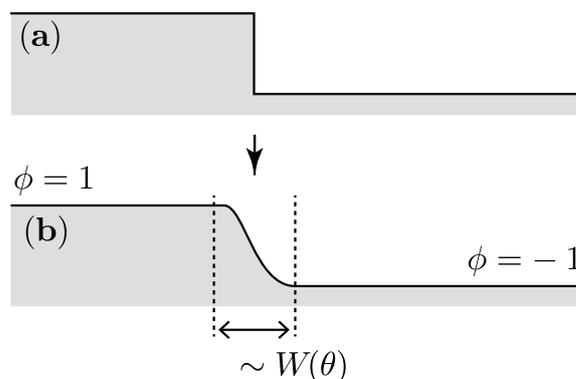


Fig. 1 surface profiles in (a) discrete model and (b) phase-field model.

で、 $\partial_x \phi = \partial \phi / \partial x$ および $\partial_y \phi = \partial \phi / \partial y$ である。 $F(\phi, u)$ は次式で与えられる。

$$F(\phi, u) = f(\phi) - \lambda u g(\phi). \quad (3)$$

第2項の正の定数 λ でフェーズ場と吸着原子の密度場を結合して、過飽和度による自由エネルギーの変化を表現している。 $f(\phi)$ は二重井戸型ポテンシャル、 $g(\phi)$ は ϕ の単調増加関数である。シミュレーションでは $f(\phi)$ と $g(\phi)$ は

$$f(\phi) = -\frac{\phi^2}{2} + \frac{\phi^4}{4}, \quad (4)$$

$$g(\phi) = \phi - \frac{2\phi^3}{3} + \frac{\phi^5}{5}. \quad (5)$$

とする。

Figure 2 のように、 u の値に関わらず $F(\phi, u)$ は $\phi = \pm 1$ で極小値を持つ。 $\phi > 0$ と $\phi < 0$ は、それぞれ上段側のテラスと下段側のテラスを表している。シミュレーションの初期設定では、 ϕ を y 座標の増加とともに 1 から -1 に単調に減少させることで、 y の正方向に前進する孤立ステップを用意した。過飽和度 $u > 0$ の場合には、 \mathcal{F} を減少させるために、時間と共に $\phi > 0$ の領域が増加する。つまり、上段側のテラスに対応する領域が増えるので、ステップが前進することを表している。

ϕ は結晶の高さに相当する非保存量であるので、時間発展は次式で与えられる^{29, 30}。

$$\begin{aligned} \tau(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} \\ &= \nabla \cdot [W(\theta)^2 \nabla \phi] + \frac{\partial}{\partial x} \left[|\nabla \phi|^2 W(\theta) \frac{\partial W(\theta)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[|\nabla \phi|^2 W(\theta) \frac{\partial W(\theta)}{\partial y} \right] - \frac{\partial F(\phi, u)}{\partial \phi} \end{aligned} \quad (6)$$

ここで $\tau(\theta)$ は緩和の時定数である。フェーズ場の変化は固化や融解によって生じるので過飽和度の変化も伴う。したがって、吸着原子の過飽和度の時間変化も同時に考える必要がある。(6)式と共に解くべき拡散方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \nabla^2 u - \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{q}, \quad (7)$$

となる。ここで、 D は拡散係数である。(7)式の右辺第2項が、固化によるフェーズ変数の変化に伴う吸着原子密度の変化、第3項はノイズの効果を表す。気相から結晶表面への入射や蒸発はないので、表面上での吸着原子の流れの揺らぎを由来とする次式の条件を満たすノイズを用いる。

$$\langle q_i(\mathbf{r}, t) q_j(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D F_u \delta_{i,j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (8)$$

ここで、 $q_i(\mathbf{r}, t)$ は $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ の i 方向成分である。熱平衡を実現するためには、ノイズの大きさ F_u は $F_u = \Omega^2 c_{\text{eq}}^0$ を満たすべきである³¹。しかし、ステップのパターンがノイズにどのように依存するのかを知りたいので、シミュレーションでは F_u を可変なパラメータとして扱う。

フェーズフィールド・モデルで用いた変数とステップ流モデルのカイネティック係数 $K(\theta)$ や毛管長 $\tilde{d}(\theta)$ は以下のように関連づけられる³⁰。

$$K(\theta) = \frac{\lambda W(\theta)}{a_1 \tau(\theta)} \left[1 - a_2 \lambda \frac{W(\theta)^2}{D \tau(\theta)} \right]^{-1}, \quad (9)$$

$$\tilde{d}_0(\theta) = \frac{a_1}{\lambda} \left[W(\theta) + \frac{d^2 W(\theta)}{d\theta^2} \right] = d_0 (1 - 15\epsilon_4 \cos 4\theta), \quad (10)$$

ここで、 $a_1 = 5\sqrt{2}/8$ かつ $a_2 = 0.6267$ であり、 $d_0 = a_1 W_0 / \lambda$ である。界面幅 $W(\theta)$ に異方性を取り入れたことが、ここでステップの異方性として反映される。カイネティック係数が大きい極限を考えると、

$$\tau(\theta) = \frac{a_2 \lambda}{D} W(\theta)^2 = \frac{a_2 \lambda W_0^2}{D} (1 - \epsilon_4 \cos 4\theta)^2. \quad (11)$$

となる。

(6)式と(7)式を正方グリッドで陽解法を用いて解く。初期配置では $y = y_0$ で 1 から -1 に ϕ を急峻に変える。無次元化した過飽和度 u は $y < y_0$ では 0、 $y > y_0$ では 0.5 とする。 x 方向には周期的境界条件を用い、 $y = 0$ で $\phi(x, 0) = 1$ 、 $u(x, 0) = 0$ とする。原子供給源の初期位置は $y_p = y_s + 3$ とステップ位置 y_s の直前に配置する。時間刻み Δt は $\Delta t = 0.2$ とし、 $1/V_p$ だけ時間が経った時に一格子分だけ原子供給源を y 方向に移動させる。シミュレーションでは $0 < y < y_p$ で ϕ と u を変え、 $y > y_p$ では $\phi = 0$ と $u = u_0$ に保つ。

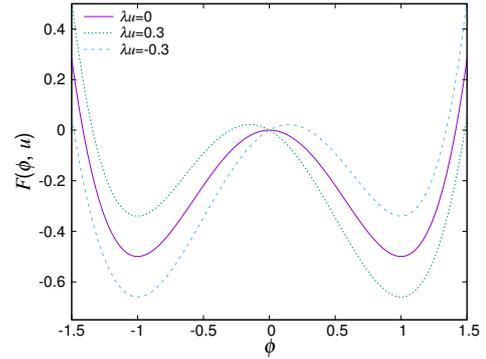


Fig. 2 $F(\phi, u)$ with $\lambda u = 0.3, 0$, and -0.3 .

3. シミュレーション結果

典型的な櫛状パターンとして、 $V_p = 4 \times 10^{-3}$ での櫛状パターンを Fig. 3 に示す. 青く塗られた部分が $\phi > 0$ の領域で上段側のステップに相当している. 異方性の強さは $\epsilon_4 = 5 \times 10^{-2}$ とし, $W_0 = 3$, $F_u = 10^{-5}$ とした. 以後のシミュレーションでは, 特に断らない限り ϵ_4, W_0 および F_u として, これらの値を用いる. $y_0 = 100$ として, 幅 $L_x = 800$, 長さ $L_y = 2000$ の系でステップを成長させた.

まず直線ステップが不安定化して短い突起状の形態が現れる. その後, Fig. 3 に示すような指状枝からなる櫛状パターンができ, 指状枝の本数は変化せずに枝が高く伸びて定常成長する. 櫛状パターンの前方にある直線は原子供給源の位置を示している. 指状枝は周期的に並んで櫛状パターンを形成しており, 原子供給源が先端の直前にあることも分かる.

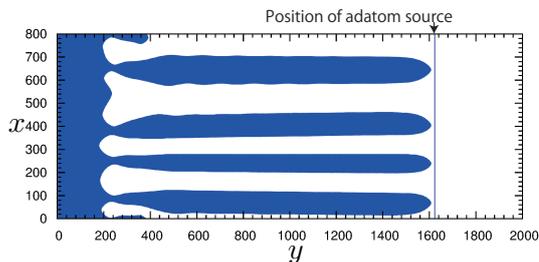


Fig. 3 Snapshot of protrusions.

3.1 パターンへの異方性の強さと原子供給源速度の影響

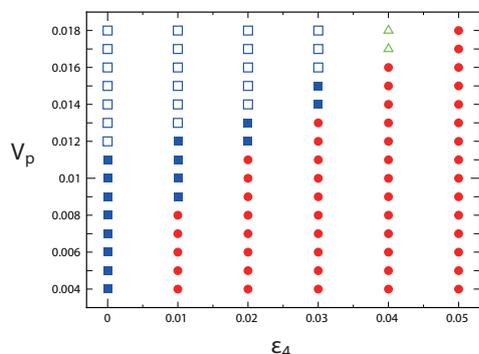


Fig. 4 Morphology diagram.

な櫛状パターンは現れない. Brener らは過冷却融液からの自由成長時のパターンについて詳細に分類している³²⁾が, ここではスナップショットを見て判断した. 目視による判断のため, 海藻状パターンと樹枝状パターンのパラメータ境界には曖昧さが残るが, 異方性が弱いときには海藻状パターンが現れ, V_p が十分大きく, かつ異方性が強くなると樹枝状パターンが現れる. 規則的な櫛状パターンは, ステップが原子供給源に追従して成長し, 異方性が比較的強いときに現れる.

3.2 櫛状パターンにおける枝の周期

3.1 節で, 櫛状パターンが現れるパラメータ領域が分かった. ここでは, 櫛状パターンにおける枝の周期が原子供給源速度とともにどうに変化するかを調べる. 櫛状パターンにおける指状枝の周期 Λ と原子供給源速度 V_p の関係を Fig. 5 に示す. 赤い丸印 ● が, Λ と V_p の関係を表す. V_p が十分に小さいときには, 枝の周期 Λ は V_p の増加とともに $\Lambda \sim V_p^{-1/2}$ と減少する. Λ の V_p に対する依存性は, 初期に現れる波長 λ_{ini} (□ と ■) の依存性と同じであるが, λ_{ini} に比べて Λ は数倍大きくなっている.

低速度側の振る舞いはモンテカルロ・シミュレーションで得られた振る舞いと同様である. しかし, 高速度側の振る舞いはモンテカルロ・シミュレーションとは異なり, Λ は V_p の増加とともに急激に増加する. モンテカルロシミュレーションでは, 格子と同程度の幅を持つ微細な構造も形成できるが, フェーズフィールド・シミュレーションでは $W(\theta)$ を有限としているために, そこまでの微細なパターンは形成できない. そのために, 代わりに別の解が現れて Λ が V_p とともに増加するのではないかと考えている. 実験²³⁾では, V_p の二分の一乗で枝の周期の減少のみがみられている. 我々の考えているように界面幅 $W(\theta)$ が有限であることが, 高速側での振る舞いの原因なら, 実験ではモンテカル

まず異方性の強さ ϵ_4 と原子供給源の速度 V_p を変えて, どのような場合に Fig. 3 で示すような櫛状パターンが現れるかを調べよう. ϵ_4 と V_p により現れるパターンを Fig. 4 にまとめた. 赤く塗りつぶされた丸印 (●) は規則的な櫛状パターンが現れたパラメータを表す. 青く塗りつぶされた四角形 (■) は, 不規則に枝が伸びた海藻状パターンを作るパラメータである. この 2 つの印で示すパラメータでは, 枝の先端が原子供給源に追従して成長する. 中抜き四角 (□) と中抜き三角 (△) は, 枝の先端が原子供給源に追従できない場合で, それぞれ海藻状パターンと樹枝状パターンを作るパラメータを表している.

ϵ_4 によって決まる閾値 V_p^c よりも V_p が大きくなると, ステップは原子供給源に追従できない. この場合には規則的

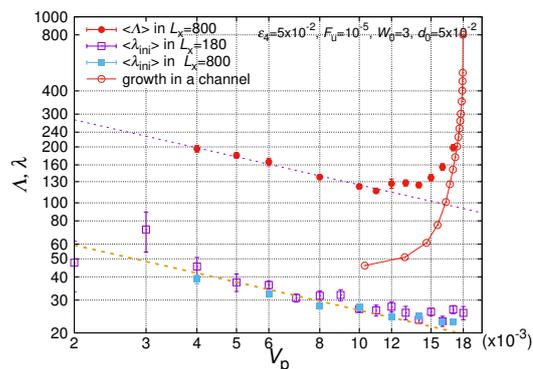


Fig. 5 Dependence of the period of protrusions in a comb-like pattern on V_p . Λ and λ_{ini} are averaged over 10 samples.

ロシミュレーションのようになると予想され、実験結果とも一致しているように見られる。しかし、実験ではまだ十分に高速とはみなせない可能性もあり、より詳細な検討の余地がある。

ここでのモデルではステップ前方を一定速度で前進する原子供給源を考えている。このことが解析的に定常解を求めることを複雑にしている。Brenerらは無限遠方で温度が一定になる条件で過冷却液体中を成長する指状枝の性質について解析的に調べた³³⁾。彼らはまっすぐで幅の狭い領域(チャンネル)中を成長する孤立した枝について考え、成長速度がチャンネル幅の二分の一乗に反比例して減少する解と、チャンネル幅によらずほぼ一定の速度を持つ2つの解の存在を示した。枝が周期的に現れるならば、チャンネル幅は櫛状パターン中の枝の周期と見なせるし、過冷却を過飽和度に読み替えることは問題の本質を変えない。また、櫛状パターンが成長するときには、成長速度は V_p と一致している。したがって、Brenerらの示したチャンネル幅と成長速度の関係は、櫛状パターンにおける枝の周期と V_p の関係と同等と見なせる。原子供給源がステップ直前にあるという違いがあるにもかかわらず、 V_p が小さいときには V_p の二分の一乗に反比例して枝の周期が減少するが V_p が大きくなると周期が増加するというFig. 5で示した結果は、チャンネル幅に対して2つの解が存在するというBrenerらが示したチャンネル幅と成長速度の関係³³⁾と傾向が良く似ている。

3.3 V_p が小さいときの櫛状パターンの性質

一様な過飽和度にしたチャンネル内で孤立した枝を十分に成長させると、吸着原子密度は定常分布になり先端は一定速度で成長する。このときのチャンネル幅と成長速度の関係を調べると、 V_p が大きいときの Λ と V_p の関係に漸近する。このことは、 V_p が大きくて Λ が V_p とともに増加する領域では、チャンネル内を孤立して成長する指状枝の性質によって櫛状パターンの周期が決まることを示している。

Brenerらのモデル³³⁾において、成長速度がチャンネル幅の二分の一乗に反比例して減少する解は不安定な解である。我々のモデルでこれに対応するのは V_p が小さいときの櫛状パターンであるが、このパターンは安定に成長できる。原子供給源がステップの直前にあることが、この安定化の原因ではないかと考え、 V_p が小さい領域では櫛状パターンの周期は次のような過程を経て決まると予想した。

【段階1】直線ステップがマリンサーセカーカ型の不安定化を起こし一定の波数で揺らぐ。揺らぎの振幅は指数関数的に増大し、ステップ上に突起状に飛び出した部分が現れる。周囲から供給される原子は十分な量がないために、直線ステップは原子供給源に追従できない。ステップに突起が現れたときには、先端部分は原子供給源から離れている。

【段階2】それでも、突起部分の周囲は他の部分よりも高過飽和度であり優先的に成長する。より前方に飛び出した突起の方がより多くの吸着原子を取り込む。隣接する突起の先端高さの揺らぎは、突起間の競合を起こし、突起の数が減って粗大化が生じる。

【段階3】粗大化しつつ指状枝の間隔が等間隔にそろふ。指状枝の先端が、ゆっくりと前進する原子供給源に追いつくと、速度は V_p に収束する。直線状の原子供給源が指状枝の先端の位置にあるので、先端位置が揃えられて揺らぎが押さえられる。そのため、粗大化が起こらずに、指状枝が一定の周期で並んだ櫛状パターンは定常成長する。

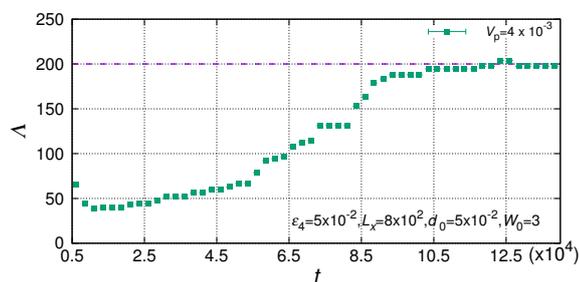


Fig. 7 Time evolution of the period between protrusions, Λ , averaged over 10 samples.

はすでに枝間隔はほぼ一定値に収束している。段階3で考えたように、指状枝の先端が原子供給源に到達してからは、枝間隔はほとんど粗大化しない。

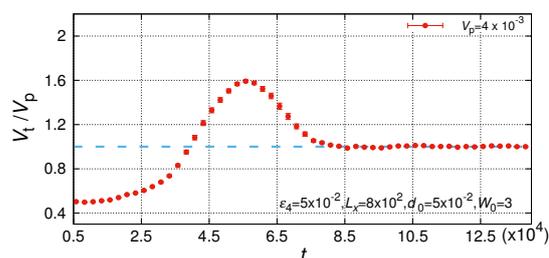


Fig. 6 Time evolution of the velocity of the tip of the highest protrusion, averaged over 10 samples.

上記の根拠となるシミュレーション結果をいくつか示したい。Figure 6は、指状枝の先端の成長速度の時間変化を示す²⁸⁾。縦軸はステップ先端の成長速度を原子供給源の速度で規格化している。初期にはステップは直線的なために原子供給源よりも遅く、 $V/V_p = u_0 = 0.5$ の速度で前進する。不安定化が起きると、段階1で考えたように指数関数的に加速する。先端速度は原子供給源速度よりも速くなるが、原子供給源に近づくで減速し、最終的に原子供給源の速度と同じ速度になる。段階3で考えたように、原子供給源があるために指状枝の先端速度が減速される。

Figure 7は、Fig. 6のサンプルでの指状枝の周期の時間変化を示している²⁸⁾。段階1, 2のように、先端が急速に成長すると枝間隔が増加する。時刻 $t = 10.5 \times 10^4$ ごろに

Figure 8 は、ノイズの強さ F_u に対する指状枝の周期の依存性を示している。他のデータとは異なり $V_p = 5 \times 10^{-3}$ のときの依存性であるが、低速度側であることに変わりはない。この図からノイズが強くなると枝の周期は短くなることが分かる。枝の周期を決める要因は、初期の不安定化の波長と枝の先端が原子供給源に追いつくまでの時間、つまり粗大化できる時間によるはずである。ノイズの強さの変化は不安定化の波長は変えないが、不安定化の起きやすさを変える。シミュレーションでは原子供給源の初期配置はステップの直前である。原子供給量が少ないために不安定化が起きるまでの間にステップは原子供給源から遅れる。しかし、ノイズが強くなり早く不安定化が起きれば、不安定化が起きたときに原子供給源とステップの距離があまり離れていない。そのため、粗大化を何度も繰り返す前に原子供給源に指状枝の先端が追いつくはずである。Figure 8 で Λ の対数的な F_u 依存性は突起の指数関数的成長を反映していると考えられ、段階 1, 2 の解釈が正しいことを支持している。

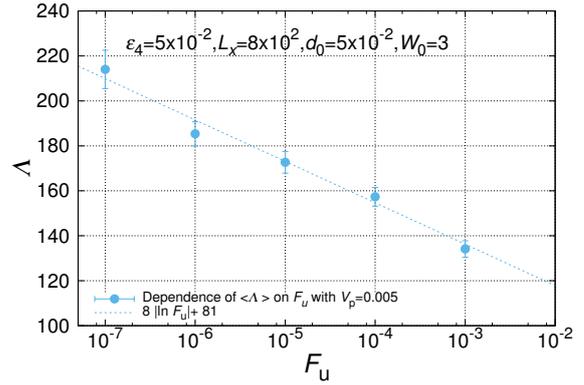


Fig. 8 Dependence of the period between protrusions Λ on the noise strength F_u .

4. まとめ

本稿では、ガリウム入射中のシリコン微斜面で観察される櫛状ステップの形成²³⁾を念頭に置き、ステップ前方を前進する直線原子供給源があるときに起きるステップの不安定化について、フェーズフィールドシミュレーションで調べた結果^{27,28)}を報告した。櫛状パターンは異方性が強く原子供給源速度が遅いときに生じることがわかった。原子供給源速度が十分に小さいときには、原子供給源がステップの前方にあることで本来は不安定なパターンが安定化する。また、この速度領域では、櫛状パターンの周期は揺らぎの強さにも依存する。

本稿では、比較的 V_p が小さいときの櫛状パターンについてまとめたが、低速度と高速度での違いについても興味深い³⁴⁾。パターン周期のノイズの強さに対する依存性や、系の幅と指状枝の本数の関係なども、 V_p が大きいときと小さいときで違いが生じる。また、櫛状パターン中の指状枝の周囲の密度場の様子も大きく変わる。これらは、 V_p が大きいときと小さいときの櫛状パターンの周期を決定する機構の違いを反映している。

原子供給源がステップの前方に存在するとみなせる系は、比較的特殊な系なのかもしれない。しかし、パターン形成の視点から見るとシリコンカーバイド (SiC) 表面でのグラフェンの成長時にも、指状に成長するパターンがみられ^{35,36,37)}、これも同一の機構によると思われる。同様に説明できる系は、まだ他にもあるのかもしれないと考えている。

謝辞

本稿をまとめるにあたり、科学研究費補助金 (課題番号 26103515, 15K05127, 16K05470) の助成を受けた。ここに記し謝辞とする。

参考文献

- 1) ステップの不安定化について述べている日本語の教科書として、上羽牧夫:「結晶成長のダイナミクスとパターン形成」(培風館, 2008年)
- 2) R.L. Schwoebel and E.J. Shipsey: J. Appl. Phys., **37** (1966) 3682.
- 3) R.L. Schwoebel: J. Appl. Phys., **40** (1969) 614 .
- 4) G. Ehrlich and F.G. Hudda: J. Chem. Phys., **44**(1966) 1039.
- 5) G. S. Bales and A. Zangwill: Phys. Rev. B, **41** (1990) 5500.
- 6) I. Bena, C. Misbah, and A. Valance: Phys. Rev. B, **47** (1993) 7408.
- 7) Y. Saito and M. Uwaha: Phys. Rev. B, **49** (1994) 10677.
- 8) Y. Kuramoto and T. Tsuzuki: Prog. Theor. Phys., **55** (1976) 356.
- 9) G.I. Sivashinsky: Acta Astronaut., **4** (1977) 1177.
- 10) T. Maroutian, L. Douillard, and H.-J. Ernst: Phys. Rev. Lett., **83** (1999) 4353.
- 11) T. Maroutian, L. Douillard, and H.-J. Ernst: Phys. Rev. B, **64** (2001) 165401.
- 12) O. Pierre-Louis, C. Misbah, Y. Saito, J. Krug, and P. Politi: Phys. Rev. Lett., **80** (1998) 4421.

- 13) O. Pierre-Louis and C. Misbah: *Phys. Rev B*, **58** (1998) 2276.
- 14) M. Sato and M. Uwaha: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **65** (1996) 2146.
- 15) M. Sato and M. Uwaha: *Phys. Rev. E*, **60** (1999) 7120.
- 16) M. Degawa, H. Nishimura, Y. Tanishiro, H. Minoda, and K. Yagi: *Jpn. J. App. Phys. Part2*, **38** (1999) L308.
- 17) 佐藤正英, 上羽牧夫: 表面科学 (日本表面科学会誌), 第 20 卷 (1999 年) 824.
- 18) M. Degawa, H. Minoda, Y. Tanishiro, and K. Yagi: *Surf. Sci.*, **461** (2000) L528.
- 19) M. Sato, M. Uwaha, and Y. Saito: *Phys. Rev. B*, **62** (2000) 8452.
- 20) J.-F. Nielsen, M. S. Pettersen, and J. P. Pelz: *Surf. Sci.*, **480** (2001) 84.
- 21) M. Sato, M. Uwaha, Y. Saito, and Y. Hirose: *Phys. Rev. B*, **65** (2002) 245427.
- 22) 佐藤正英, 上羽牧夫, 齋藤幸夫: 日本結晶成長学会誌, 第 29 卷 (2002 年) 28.
- 23) H. Hibino, H. Kageshima, and M. Uwaha: *Surf. Sci.*, **602** (2008) 2421.
- 24) S. Kondo, M. Sato, M. Uwaha, and H. Hibino: *Phys. Rev. B*, **84** (2011) 045420.
- 25) S. Kondo, M. Kawaguchi, M. Sato, and M. Uwaha: *J. Cryst. Growth*, **362** (2013) 6.
- 26) フェーズフィールド法についての日本語の教科書として, 高木知弘, 山中晃徳: 「フェーズフィールド法-数値シミュレーションによる材料組織設計-」 (養賢堂, 2012).
- 27) M. Kawaguchi, H. Miura, K. Kishi, M. Sato, and M. Uwaha: *Phys. Rev. E*, **91** (2015) 012409.
- 28) K. Kishi, M. Kawaguchi, H. Miura, M. Sato, and M. Uwaha: *e-J. Surf. Sci. Nanotech.*, **13** (2015) 269.
- 29) A. Karma and M. Plapp: *Phys. Rev. Lett.*, **81** (1998) 4444.
- 30) A. Karma and W.-J. Rappel: *Phys. Rev. E*, **57** (1998) 4323.
- 31) A. Karma and W.-J. Rappel: *Phys. Rev. E*, **60** (1999) 3614.
- 32) E. A. Brener, H. Müller-Krumbhaar, and D. Temkin: *Phys. Rev. E*, **54** (1996) 2714.
- 33) E. A. Brener, M. B. Geilikman, and D. E. Temkin: *Sov. Phys. JETP*, **67** (1988) 1002.
- 34) M. Sato, H. Miura, and M. Uwaha: *Phys. Rev. E*, **95** (2017) 032803.
- 35) M. L. Bolen, S. E. Harrison, L. B. Biedermann, and M. A. Capano: *Phys. Rev. B*, **80**(2009) 115433.
- 36) T. Ohta, N. C. Bartelt, S. Nie, K. Thürmer, and G. L. Kellogg: *Phys. Rev. B*, **81** (2010) 121411(R).
- 37) H. Hibino, S. Tanabe, S. Mizuno, and H. Kageshima: *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **45** (2012) 154008.

(2018 年 3 月 12 日受理)