

金沢大学総合メディア基盤センター

佐藤正英

名古屋大学理学研究科

上羽牧夫

名古屋市立大学システム自然科学研究科

三浦均

本研究課題では、低温でガリウム(Ga)を入射しているシリコン(Si)(111)微斜面で原子ステップが示す櫛(くし)状パターン形成について調べている。Gaを入射することでステップ近傍から表面構造の転移が起きる。表面構造の相境界は、転移に伴って過剰になったSi原子を結晶表面上に放出しながらステップから遠ざかる。また、表面構造の転移はステップ下段側で起きやすい。以上のことを考慮に入れて、ステップ前方に一定の速度で遠ざかりながら一定の原子を供給する直線的な粒子の供給源がある場合を考えて、ステップが示すパターンについてフェーズフィールド法を用いて調べている。本年度は、まずフェーズフィールド法によるモデルの構築を行い、それを用いて、規則的パターンを中心に調べた。

粒子供給源からの供給量が十分ではないと、ステップが直線のまま、粒子供給源に追従して成長することは不可能である。もし追従するならば、突起状のパターンを作り、突起の先端のみで成長せざるを得ない。これまでの研究から、ステップが有限の異方性を持ち、粒子の供給源速度が比較的遅いときに、図1に示すようなほぼ同じ太さ指状の枝が等間隔に並んでいる櫛状パターンを形成することが分かった。

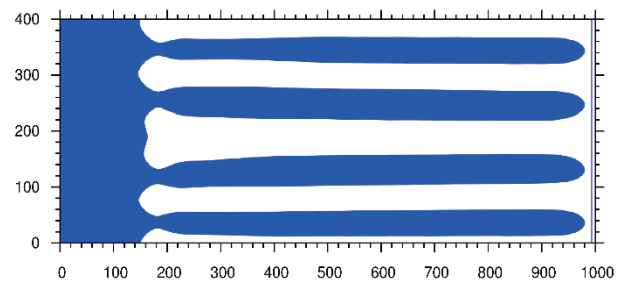


図1 典型的な櫛状パターン

直線ステップの直前に粒子供給源が存在するとしてシミュレーションで、このような櫛状パターンが形成される過程について調べ、以下のように成長することが分かった。

1. まず、粒子供給源からの供給される粒子がステップ位置で固化するが、ステップは直線のみである。粒子供給源からの供給量が少ないため、ステップは粒子供給源に対して送れることとなる。
2. ある程度時間が経つと、ステップは平均的には直線性を保つたまま、熱的な揺らぎで揺らぐ。また、ステップと粒子供給源の間には拡散場が形成される。そのため、ステップ自由エネルギーに由来するギブストムソン効果による安定化と拡散場による不安定化の効果の競合により、ステップが不安定化し、特徴的な波長の揺らぎの振幅が成長することになる。
3. 主にステップ先端で固化が起こるために、初期の振幅は枝状に延びる。このとき、微妙な位置の揺らぎによって、より多くの粒子を獲得しやすい部分が選択される。そのため、枝の間隔は広がり、パターンは粗大化しながら成長する。
4. 枝状に成長している間、枝の先端は粒子供給源よりも速く動くため、十分に時間が経てばステップの先端は粒子供給源に追いつく。

5. 粒子供給源は直線のために、粒子供給源に追いついてしまうと、先端の揺らぎは抑えられて粗大化は終了する。

このような過程を経るならば、最終的な枝間隔 $\Lambda$ は近似的に次の式を満たすことが分かった。

$$\Lambda = \delta y_{kmax}(t_0) \exp\left(\frac{\alpha c_0^{3/2} \Lambda}{1 - c_0}\right)$$

ここで、 $c_0$ は粒子供給源が放出する原子の過飽和度を表しており、 $\delta y_{kmax}(t_0)$ は初期の揺らぎの大きさである。過飽和度 $c_0$ を変えてシミュレーションを行い、最終的な枝間隔の過飽和度依存性を調べた。この式はかなり大雑把な見積もりから得られた式であるものの、おおよその傾向は示せた結果(図2)が得られたことから、最終的な枝間隔の決定過程のシナリオが大まかには正しいと考えている。

さらに一度規則的な櫛状構造を作成したのちに成長条件を変え、その構造が安定に保たれるかを調べた。図3は粒子供給源の速度と櫛状パターンにおける枝間隔の関係を示している。点Aで与えられる構造を作成したのち、粒子源の速度を急激に変えた。すると、枝の間隔を一定に保ったまま粒子源に追従し、点Bで与えられる状態になった。その後、十分に長い時間成長させたものの点Cの状態に遷移することは見られなかった。したがって、一度形成された構造は、小さな揺らぎに対しては安定な構造を保つことがわかる。以上の結果は論文(1)として現在印刷中である。また、国際会議(2)でも発表した。

現在は、一度粒子供給源から引き離された直線ステップが櫛状パターンを形成して粒子供給源へ追いつく過程で、粗大化の果たす役割についてさらに詳細に調べている。

### 参考文献:

- (1) M. Kawaguchi, K. Kishi, H. Miura, M. Sato, M. Uwaha, Phys. Rev. E in press  
 (2) "Formation of a Comb-Like Pattern on a Ga Deposited Si(111) Vicinal Face", K. Kishi, M. Kawaguchi, H. Miura, M. Sato, and M. Uwaha, The 7th International Symposium on Surface Science (Matsue, Japan, 2-6, Nov. 2014).

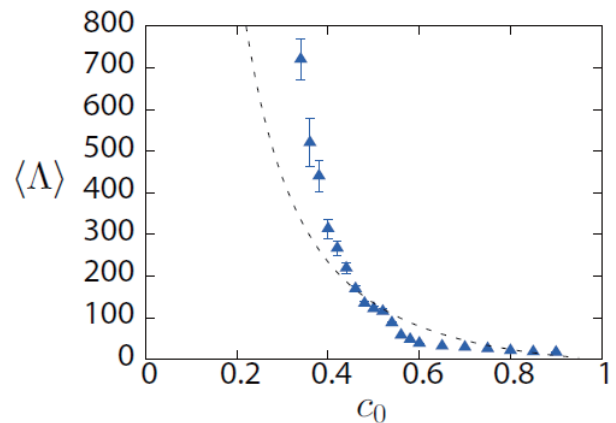


図2 枝間隔の過飽和度依存性。点線は式から期待される線、 $\Delta$ はシミュレーションの結果

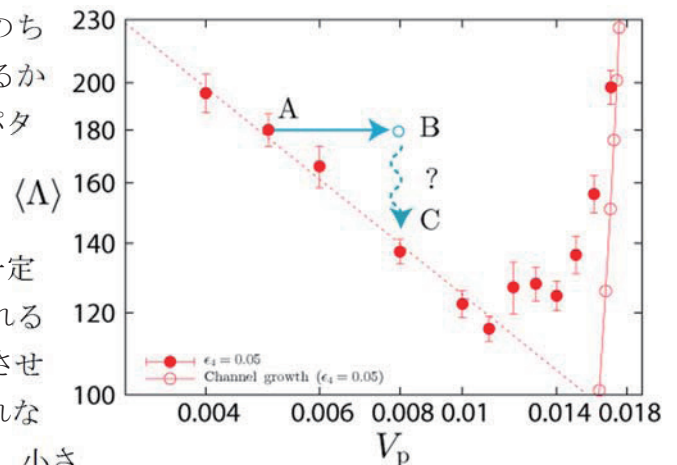


図3 枝間隔の粒子源速度依存性