

平衡状態におけるマクロステップのファセティング・ダイアグラム

Faceting Diagram for Macrosteps at Equilibrium

大阪電通大¹, 阪大院理² ◯阿久津 典子¹, 阿久津泰弘²

Osaka Electro-Commu. Univ.¹, Osaka Univ.², ◯Noriko Akutsu¹, Yasuhiro Akutsu²

E-mail: nori@phys.osakac.ac.jp

非平衡状態では、ステップ・バンチングやステップ・メアンダリングが知られているが、平衡状態近傍でのマクロステップ形成については十分に研究されているとは言えない。そこで、表面荒さを取り入れた傾斜面のモデルである制限 SOS モデルを考え、ダンダリング・ボンドの重なり積分を起源とする点型引力を導入する (p-RSOS モデル)。ここで「制限」とは隣り合う高さの差が 0、±1 に制限されているという意味である。ステップの集合・分散と表面荒さに焦点をあて、Tensor network 法の一つである積波動関数繰り込み群 (PWFRG) 法で表面自由エネルギーと表面傾きを精密に計算し、ステップの凝集に関する相図を求めた (Fig.1) [1,2]。特に表面傾き依存性 (Fig.1 (b), (c)) と Si(113)+(114)面のマクロステップに関する相図 [3]と比較して Si(113) +(114)面のステップ間引力を 123meV と見積もった[2]。

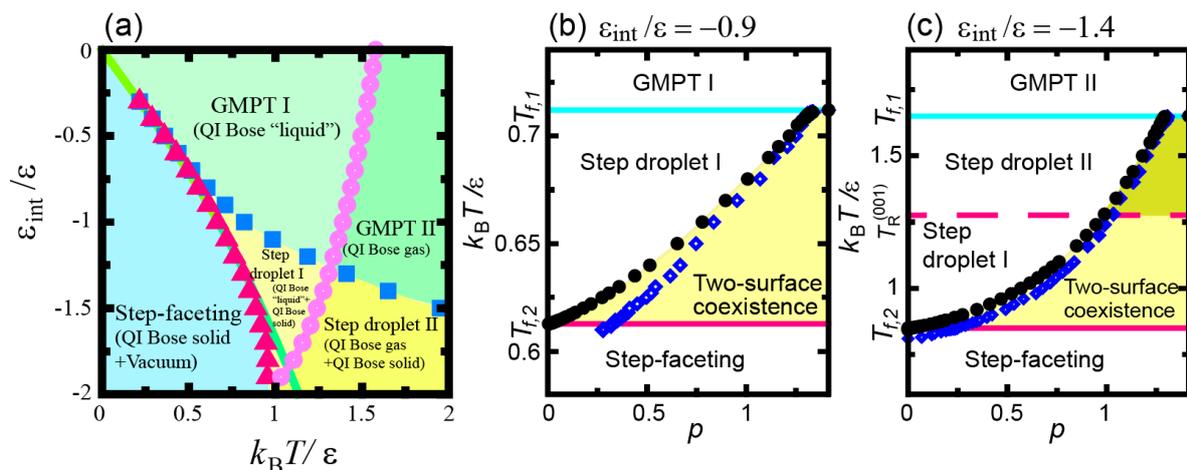


Fig.1 Faceting diagrams. (a) ε_2 — T diagram [1]. (b) T — p diagram at $\varepsilon_2/\varepsilon=-0.9$ [2]. (c) T — p diagram at $\varepsilon_2/\varepsilon=-1.4$ [2]. Here, ε_2 is the point-contact-type step-step attraction, ε is half of the lateral bond between atoms, T is the temperature, and k_B is the Boltzmann constant, All data are calculated by the PWFRG method. \blacktriangle : $T_{f,2}$ \blacksquare : $T_{f,1}$ \circ : Roughening temperature. \bullet : T_f , coexisting temperature for slope p and (111) surface. \diamond : T_{SP} , the spinodal point. These figures are licensed under CC BY 4.0 (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>).

ここで注意しておくが、Terrace—Step—Kink (TSK) モデルでは力の及ぶ範囲が重要で、点型引力の TSK モデルでは step droplet zone が存在しない。Fig. 1 (b), (c) を得るためにはテラス面における表面アドアトム等の励起構造が必要である。

参考文献

- 1) N. Akutsu: AIP Adv. **6**, 035301 (2016).
- 2) N. Akutsu, Y. Akutsu: Sci. Rep., **12**, 17037, (2022).
- 3) S. Song and S. G. J. Mochrie: Phys. Rev. Lett., **73**, 995—998 (1994).