

ファセット化マクロステップがある微斜面の表面荒さ

○阿久津 典子*

大阪電気通信大学工学部

Roughness of a vicinal surface with faceted macrosteps

○Noriko Akutsu*

Faculty of Engineering, Osaka Electro-Communication University

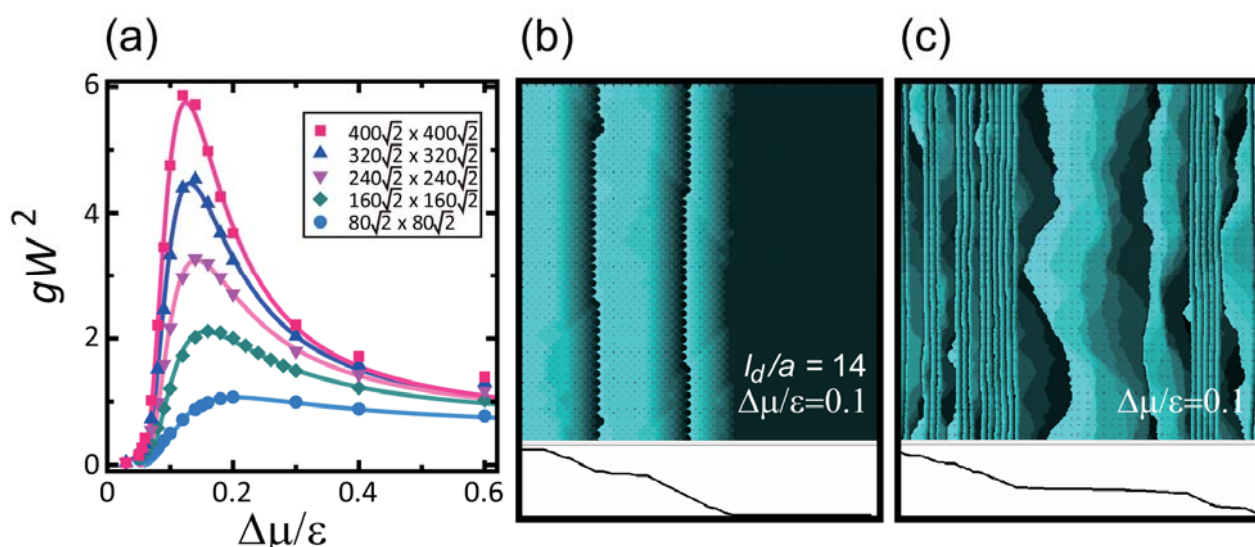


Fig. 1. (a) 微斜面の表面ゆらぎ幅の二乗の結晶成長駆動力($\Delta\mu$)依存性。(b) (c) 微斜面のスナップショット(4×10^8 MCS/site)。上図は上から表面を見た図、下図は横から表面を見た図。(b) 表面サイズ $40\sqrt{2} \times 40\sqrt{2}$ (c) 表面サイズ $320\sqrt{2} \times 320\sqrt{2}$. $k_B T/\varepsilon = 0.4$. $\varepsilon_{\text{int}}/\varepsilon = -0.9$. 表面傾斜 $p = 0.530$.

制限 solid-on-solid (RSOS) 模型に点型のステップ間引力を導入しただけの模型(p-RSOS 模型)について異方的表面自由エネルギーを密度行列繰り込み群法で計算し、具体的に Wulff 図形及び結晶平衡形を描いた [1]。その結果表面張力が不連続になることを示し、その不連続性に対応して微斜面構造の分類が可能になった [1]。ステップ・ファセティング・ゾーンでは、平衡状態の微斜面において(001)面と(111)面だけから成るファセット化したマクロステップで形成され、その間の一様に傾いた面は熱力学的に不安定であることを示した。

平衡状態に近い非平衡定常状態ではマクロステップ端の凹角部からの 2 次元核形成律速成長する [2]。このような微斜面について、表面荒さをモンテカルロ法で計算したのが Fig.1(a)である。平衡状態($\Delta\mu=0$)ではゆらぎ幅はゼロであった。しかし予期せぬことに、非平衡定常状態ではゆ

らぎ幅が表面のサイズが増大すると増大することが得られた (Fig.1 (a))。これは定義から微斜面がラフであることを示す。また、表面の幅はマクロステップの形成・解消点 $\Delta\mu_R$ (表面サイズに依存する) で最大になった。実際、モンテカルロ法によるスナップショットを見ると、小さいサイズではファセット化の様子がよく解るが (Fig.1 (b))、大きいサイズでは、ステップ端から離脱した素ステップ列の空間的ゆらぎの有るパターンが見える (Fig.1 (c))。

文 献

- 1) N. Akutsu, Applied Surface Science, **256**, 1205--1209 (2009); J. Phys. Condens. Matter, **23**, 485004, (2011); AIP Adv., **6** 035301 (2016); Adv. Condens. Matter Phys., 2021510 (2017).
- 2) N. Akutsu, Phys. Rev. Materials **2**, 023603 (2018).
- 3) N. Akutsu, Sci. Rep., **11**, 3711 (2021).

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