

吸着原子のドリフトによる微斜面ステップの不安定化 —ステップの透過性の効果—

名古屋大学大学院理学研究科^a, 学習院大学計算機センター^b, 慶応大学理工学部^c
上羽牧夫,^{a, 1} 佐藤正英,^{a, b} 齋藤幸夫^c

微斜面の表面形状の平面波的なゆらぎに対する線形不安定化は、波数ベクトルとステップが平行な場合の蛇行 (wandering), 垂直な場合のバンチング (bunching), 傾いた場合の屈曲 (bending) にわけられる。不安定化のおきる原因としては、1) ステップカイネティクスの非対称性 (Ehrlich-Schwoebel 効果), 2) 吸着原子のドリフト, 3) 上下段のテラス幅の違い, 4) 表面構造のちがい (たとえば Si(100) 面) などが知られている。ここでは Si(111) の微斜面を念頭に、ドリフトによる微斜面の不安定化、とくに蛇行とバンチングにおよぼすステップの透過性の効果について我々の理論的研究をまとめて報告する。

x 軸に平行なステップ列からなり、ステップ下段方向に y 軸をとった微斜面を考える。気相から結晶表面への原子の入射がなく、ステップの下段方向に速度 v のドリフト流があるとすれば、吸着原子の満たす拡散方程式は

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_s \nabla^2 c - v \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{1}{\tau} c \quad (1)$$

となる。この方程式に対する m 番目のステップの位置 $y = \zeta_m(x, t)$ での境界条件は、

$$-\hat{n} \cdot (D_s \nabla c|_{\zeta_{m-}} - v_d c|_{\zeta_{m-}} \hat{e}_y) = K_-(c|_{\zeta_{m-}} - c_m) + P(c|_{\zeta_{m-}} - c|_{\zeta_{m+}}) \quad (2)$$

$$\hat{n} \cdot (D_s \nabla c|_{\zeta_{m+}} - v_d c|_{\zeta_{m+}} \hat{e}_y) = K_+(c|_{\zeta_{m+}} - c_m) + P(c|_{\zeta_{m+}} - c|_{\zeta_{m-}}) \quad (3)$$

となる。 P がステップの透過度 (permeability) で、ステップを素通りする拡散の程度を表している [1]。ステップでの平衡原子密度はステップエネルギーを ξ として近似的に

$$c_m = c_{\text{eq}}^0 \left[1 + \frac{\Omega}{k_B T} \left(\tilde{\beta} \kappa - \frac{\partial \xi_m}{\partial \zeta_m} \right) \right] \quad (4)$$

で与えられる。括弧内の第 2 項はスティフネスと隣接するステップとの相互作用の効果を表す。これを解いてステップに流れ込む吸着原子の量を計算すればステップの前進速度がわかる。

そこで微斜面を形成する等間隔直線ステップのそれぞれに $\zeta_m = \delta \zeta e^{iqx + \omega t}$ あるいは $\zeta_m = \delta \zeta e^{ikml + \omega t}$ というゆらぎが加わったとしてドリフトの効果の入った拡散方程式を解けば、特定の波数 q や k の蛇行やバンチングゆらぎに対する安定性を調べられる。

非透過性の場合はこれでよいが、透過性ステップに対するバンチングは連立方程式を解かなくてはならず解析が困難なので、最初から連続体モデルを用いて、 $P \rightarrow \infty$ かつ長波長での振る舞

¹ E-mail: uwaha@phys.nagoya-u.ac.jp

表 1: Conditions to induce instabilities

growth condition	permeability	terrace	kinetics	drift	instability
sublimation	permeable	isolated	fast/slow	down	wandering
		$l/x_s \ll 1$	fast/slow	down	wandering
			$(1 \ll \lambda \ll x_s/l)$	up	bunching
	impermeable	isolated	fast/slow	down	wandering
		$\alpha l/x_s \gg 1$	fast/slow	up	bunching
				down	wandering
growth	permeable	$\alpha l/x_s \ll 1$	fast/slow	down	wandering/bunching
		isolated	fast/slow	up	wandering
		$l/x_s \ll 1$	fast/slow	up	wandering
	impermeable		$(1 \ll \lambda \ll x_s/l)$	down	bunching
		isolated	fast ($\lambda \ll 1$)	up	wandering
			slow ($\lambda \gg 1$)	down	wandering
		$\alpha l/x_s \gg 1$	fast ($\lambda \ll l/x_s$)	down	bunching
			slow ($\lambda \gg l/x_s$)	down	wandering /bunching
		$\alpha l/x_s \ll 1$	fast ($\lambda \ll l/x_s$)	up	wandering
				down	bunching
			slow ($\lambda \gg l/x_s$)	down	wandering/bunching

いを調べる．吸着原子の拡散方程式とステップ密度 $\rho(y, t)$ に対する連続の式は， $K_- = K_+ = K$ とし原子の入射 F も含めて

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_s \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - v \frac{\partial c}{\partial y} + F - \frac{1}{\tau} c - 2\rho K (c - c_{\text{eq}}(y)), \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} [2\rho \Omega K (c - c_{\text{eq}}(y))] = 0, \quad (6)$$

である．ここに $V_0 = 2\Omega K(F\tau - c_{\text{eq}}^0)/2\rho_0 K\tau + 1$ はゆらぎのないときのステップの速度であるステップエネルギーをステップ密度の関数と考えれば，平衡密度は

$$c_{\text{eq}} = c_{\text{eq}}^0 + \frac{\Omega c_{\text{eq}}^0}{k_B T} \frac{d\xi}{d\rho} \frac{\partial \rho}{\partial y} = c_{\text{eq}}^0 + \gamma(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial y}. \quad (7)$$

と書ける．ステップ密度と吸着原子密度のゆらぎ $\rho = \rho_0 + \delta\rho e^{iky + \omega_k t}$ ， $c(y) = c_0 + \delta c e^{iky + \omega_k t}$ をあたえると，ゆらぎの成長率 ω_k は

$$\begin{aligned} \omega_k^2 + \left[k^2 (D_s + 2\Omega\gamma\rho_0 K) + ik(V_0 + v) + \frac{1}{\tau} + 2\rho_0 K \right] \omega_k \\ + \left(k^2 D_s + ikv + \frac{1}{\tau} \right) (2k^2 \Omega\gamma\rho_0 K + ikV_0) = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

で決定される．

安定性解析の結果を表 1 に示す．重要な場合 ($l \ll x_s$) を要約すると次のようになる．

1. ステップの蛇行は，ステップの透過性によらず，拡散場の勾配がステップの前進する方向で急になる下段向きのドリフトで起こる [2, 3]．

2. バンチングは非透過性の場合には下段向きドリフト [4-8] , 透過性の場合には上段向きドリフトによって起きるが [9] , 透過性の場合には結晶を成長させると不安定化の起きるためのドリフトの方向が逆転する [10] .
3. 蒸発がある場合にはいずれの不安定化もステップスティフネスやステップ間斥力と競合するため , ある臨界ドリフト速度を越えたときにのみ起きる .

不安定化が起きてからの様子をモンテカルロシミュレーションによって調べた [11] . 図 1 と図 2 に非透過性と透過性の場合の例をしめす . 非透過性のものでは蛇行とバンチングの両者が同時に起きている .

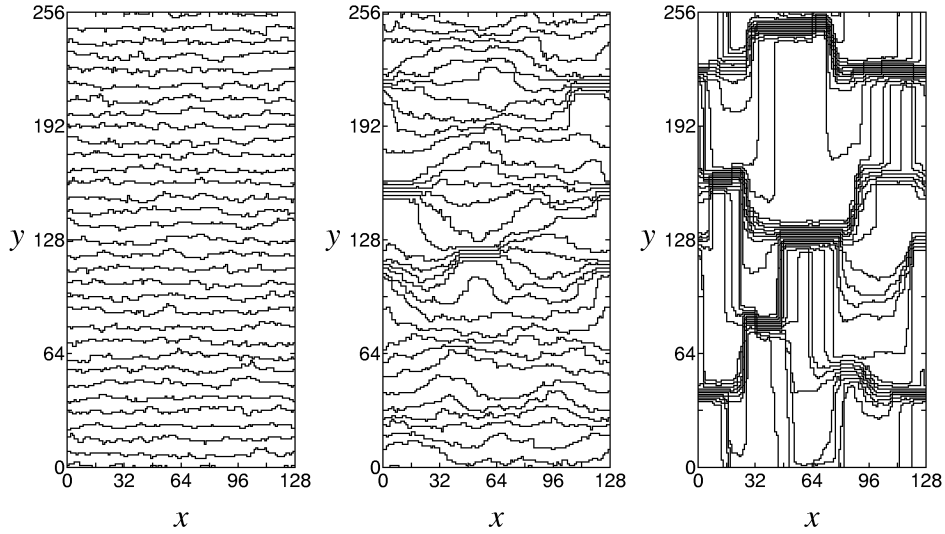


図 1: 昇華時の非透過性ステップからなる微斜面のスナップショット . ドリフトは , 左から (a) 上段向き , (b) 下段向き $t = 1.0 \times 10^4$, (c) 下段向き $t = 1.8 \times 10^4$.

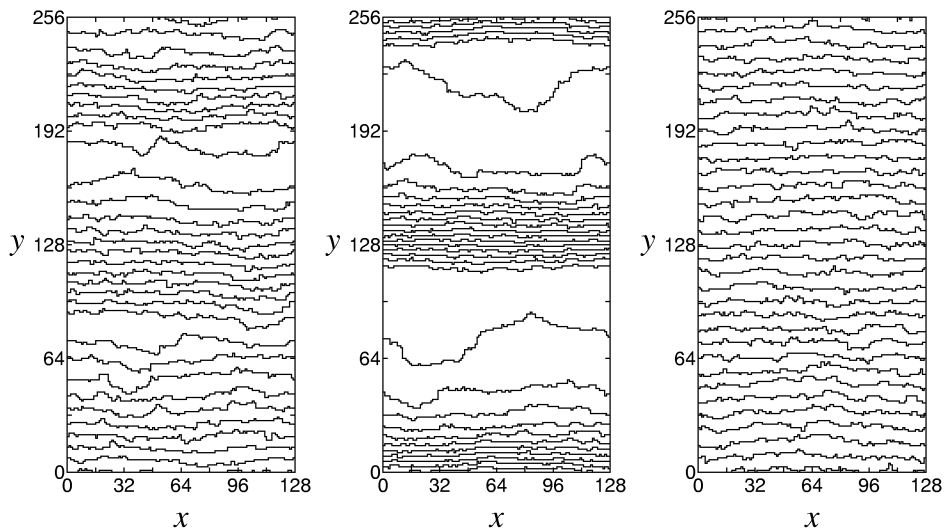


図 2: 昇華時の非透過性ステップからなる微斜面のスナップショット . ドリフトは , 左から (a) 下段向き $t = 9.6 \times 10^4$, (b) 下段向き $t = 1.9 \times 10^5$, (c) 上段向き .

ステップ束の形は，非線形効果 [12] によっていずれの場合でも昇華時には上端がなだらか，成長時には上端が鋭い形が予想される．

不安定化が強い場合のステップ束の成長則を調べてみると，大きなテラスの幅あるいは同じことだが束の中に含まれるステップの数は時間のべき乗則 $N \sim t^\beta$ に従って増大する．この指数 β は条件によって 1/4 から 1 の間の値をとるが，一般に透過性の場合のほうが値が大きいようである [13-16]．実験は温度領域によらずにだいたい 1/2 と言われているが [17-19]，理論実験ともに詳しい検討が必要であろう．

参考文献

- [1] M. Ozdemir and A. Zangwill, Phys. Rev. B **45**, 3718 (1992).
- [2] M. Sato and M. Uwaha, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2146 (1996).
- [3] M. Sato, M. Uwaha and Y. Saito, Phys. Rev. Lett. **80**, 4233 (1998).
- [4] S. Stoyanov, Jpn. J. Appl. Phys. **30**, 1 (1991).
- [5] A. Natori, Jpn. J. Appl. Phys. **33**, 3538 (1994).
- [6] B. Houchmandzadeh, C. Misbah and A. Pimpinelli, J. Phys. I France **4**, 1843 (1994).
- [7] C. Misbah and O. Pierre-Louis, Phys. Rev. E **53**, R4319 (1996).
- [8] M. Sato and M. Uwaha, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1515 (1996).
- [9] S. Stoyanov, Surf. Sci. **416**, 200 (1998).
- [10] J. J. Métois and S. Stoyanov, Surf. Sci. **440**, 407 (1999).
- [11] M. Sato, M. Uwaha and Y. Saito, Phys. Rev. B **62**, 8452 (2000).
- [12] M. Uwaha and M. Sato, Surf. Rev. Lett. **5**, 841 (1998).
- [13] D.-J. Liu and D. J. Weeks, Phys. Rev. B **57**, 14891 (1998).
- [14] S. Stoyanov and V. Tonchev, Phys. Rev. B **58**, 1590 (1998).
- [15] M. Sato and M. Uwaha, J. Phys. Soc. Jpn. **47**, 3675 (1998).
- [16] M. Sato and M. Uwaha, Surf. Sci. **442**, 318 (1999).
- [17] Y. -N. Yang, E. S. Fu and E. D. Williams, Surf. Sci. **356**, 101 (1996).
- [18] A. V. Latyshev, H. Minoda, Y. Tanishiro and K. Yagi, Surf. Sci. **401**, 22 (1998).
- [19] Y. Homma and Aizawa, Phys. Rev. B, **62**, 8323 (2000).