

7. SOSモデルによる結晶成長の動力学

土 永 浩 之

結晶成長（特に、気相からの成長）の動力学を取り扱う一つの方法として、「気相からの吸着原子は結晶原子の上には存在できない」という SOS (Solid-on-Solid) 条件を付けた格子モデル (SOS モデル) が用いられる (図1)。モデルの理論的な解析には、主として、系全体を結晶-気相界面に平行な多数の層

(layers) に分割して、各層の状態を少数のパラメタ (状態パラメタ) で記述する近似計算 (層近似 = layerwise approximation) が用いられる。これは、界面における原子の吸着-蒸発過程による状態パラメタの時間変化として、結晶界面に対する運動方程式を導き、結晶の成長速度が結晶相と気相の化学ポテンシャルの差

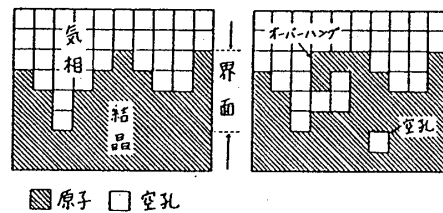


図1. SOSモデル

左が SOS 条件で許される配置である。
右は SOS 条件で禁止される配置を示す。

として定義される成長の駆動力 $\beta \Delta \mu$ ($\beta = 1/kT$) にどのように依存するかを調べるものである。Temkin は、各層の原子の濃度 (数密度) を状態パラメタとして用いる分子場近似 (点近似) を行い、結晶成長の定性的な議論を行った。¹⁾ その後、Saito と Müller-Krumbhaar は、層内の状態を二体の相関まで考慮した対近似によって、原子の表面拡散過程も含めた計算を行い、モンテカルロ (MC) 法によるシミュレーション実験³⁾ をかなり良く説明できることを示した。しかし、低温における界面の成長を点近似と対近似で計算すると、近似特有の広い準安定状態が存在し、駆動力 $\beta \Delta \mu$ がある臨界値 $\beta \Delta \mu_c$ を越えたときはじめて成長が始まるという結果を与える。準安定領域は実際の結晶成長にも存在するが、これらの近似の結果を見ると MC 法のシミュレーション実験と比べて臨界値 $\beta \Delta \mu_c$ が大きくなっている。これは、SOS モデルを層近似しているために、成長方向のゆらぎの取り込み方に比べて、層内のゆらぎの取り込み方が不十分であるためと考えられる。したがって、層内のゆらぎを更に正確に取り込むことにより、このような準安定状態の領域は狭くなって行くものと期待される。そのことを調べるためには、層内の状態について二体、三体、…と順次、相関を取り込んで行ける系統的な方法が必要である。Kikuchi のクラスター近似法は、体系に存在する点、対、三角といったクラスターの出現確率を状態パラメタとして用いて系統的に近似を進めることができるのでこの目的に

かなっている。また、この方法には、熱平衡状態のみならず、クラスターの時間変化を記述するパス (path) 変数を用いて体系の時間変化を調べる Path Probability Method (PPM) がある。^{4),5)}

しかしながら、PPM においては対近似以上の高次近似では SOS 条件の取り扱いが困難であった。われわれは、これを避けるため SOS 条件を表現する適当な補正項を導入することにより、PPM の特徴を損なうことなく、より高次の近似で SOS モデルを取り扱うことができることを見出した。具体的には、三角近似によって成長速度の駆動力依存性を計算し、確かに、対近似に比べ準安定領域が狭くなるという結果を得た (図 2)。また、成長速度は周期的に変化することが知られているが、これは対応するクラスター近似法から求めた結晶の熱平衡状態における自由エネルギーが駆動力によって構造を変えることと関連させて説明することができた。

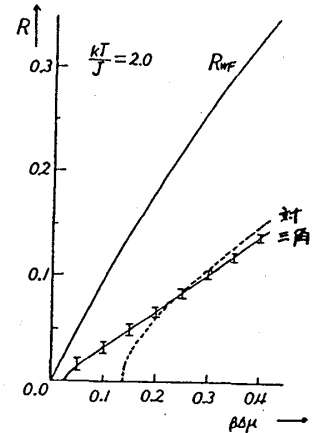


図 2. 成長速度 R の駆動力 $\beta \Delta \mu$ 依存性
実線が三角近似の結果である。

参 考 文 献

- 1) D. E. Temkin: Sov. Phys. -Crystallogr. 14 (1969) 344.
- 2) Y. Saito and H. Müller-Krumbhaar: J. Chem. Phys. 70 (1979) 1078.
- 3) G. H. Gilmer and P. Bennema: J. Appl. Phys. 43 (1972) 1347.
- 4) R. Kikuchi: Prog. Theor. Phys. (Kyoto) Suppl. 35 (1966) 1.
- 5) K. Wada, T. Isikawa and H. Tsuchinaga: to be published in Physica A.

8. 高圧下における $\text{Ce}(\text{In}_{1-x}\text{Sn}_x)_3$ の高密度近藤効果

沼 田 徹

1) 序論

$\text{Ce}(\text{In}_{1-x}\text{Sn}_x)_3$ は x の全範囲にわたって AuCu_3 型構造をとる。しかし、格子定数の x 依存性を見た場合、 $0 \leq x \leq 0.6$ では Vegard's law によくのっていたものが、 $x \geq 0.6$ で