

令和 3 年 6 月 21 日現在

機関番号：34412

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K05503

研究課題名(和文) 不連続な表面張力によりファセット化したマクロステップ形成とステップ・ダイナミクス

研究課題名(英文) Step dynamics on faceted macrosteps formed by discontinuous surface tension

研究代表者

阿久津 典子 (Akutsu, Noriko)

大阪電気通信大学・工学部・教授

研究者番号：40167862

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：マクロステップの高さ n 、成長速度、成長駆動力の絶対値との関係を解明しSiC観測値を説明し、 n の測定値がばらつく理由を明らかにした。ファセット化した面で形成された微斜面の表面荒さを計算し、核形成機構で成長しているにも拘らず連続成長し、ファセット化ラフな面になり、実験で観測される値に近い荒さ指数を得た。

制限SOS模型微斜面について温度、成長の駆動力、および表面傾きを変化させて表面荒さを計算し、Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (logarithmic) ラフな面からKardar-Parisi-Zhang (algebraic) ラフな面へのクロスオーバー現象を発見した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これまで平衡から遠く離れた微斜面における拡散律速な場合についてステップバンチングやステップメアングリングが調べられてきた。拡散現象を排除した結晶成長を実際に行うことは難しいが、拡散現象を排除したモデルに基づく計算機実験を行うことにより、表面張力の異常によって生じる平衡状態及び平衡状態近傍のマクロステップ形成ダイナミクスの一端を解明した。応用として、ファセット化ラフな表面になるパラメタ領域では良質な結晶育成を行える可能性を示した。低消費電力半導体の良質結晶育成に応用できるため、SDG'sに貢献できる。

研究成果の概要(英文)： The relationship between the macrostep height n , the growth rate, and the absolute value of the growth driving force has been clarified. This has explained the observed results on SiC and the reason why the measured n was scattered. The surface roughness of the vicinal surface formed by the faceted surfaces was calculated using the Monte Carlo method. We found the “faceted rough surface” where it grows continuously even though it grows by the nucleation process. The obtained value of the roughness exponent was close to the value observed in the experiment.

The surface roughness on a vicinal surface for the restricted solid-on-solid model was calculated by changing the temperature, the driving force for growth, and the surface slope. The crossover from Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (logarithmic) rough surface to Kardar-Parisi-Zhang (algebraic) rough surface has been found.

研究分野：計算材料物理学

キーワード：表面・界面張力計算 非平衡定常状態 表面・界面荒さ ファセット化 マクロステップ形成 結晶成長 表面・界面の統計熱物理学 半導体表面

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

数十 nm～数百 nm 程度のファセット化したマクロステップ形成は育成した結晶品質を落とすので、実験的には様々な研究がなされている。平衡状態から離れた拡散律速成長の場合、ステップ・バンチングやステップ・メアングリング、あるいはゆらぎの有る非平衡界面のダイナミクスなど、微斜面の形状およびダイナミクスについて解明が進んできた。しかし、理論的な研究は十分ではなく、なかでも平衡状態近傍の研究はあまりなされておらず、熱統計力学を含む理論的知見に基づくマクロステップ制御に関するガイドラインが望まれている。

先行研究には 1963 年 N.Cabrera の「表面自由エネルギーに「type II」という異常性があれば結晶平衡形のファセット端に形の 1 次転移が起り、かつ微斜面にマクロステップ形成の不安定性が生じる」というものが有る。Cabrera-Coleman の不安定性として以前は知られていたが、ミクロな模型からの基礎付けが無かったため最近では興味が失われている。ミクロな模型からの基礎付けができなかった理由は、表面やステップが低次元の物体であるため、低温であっても熱揺らぎの寄与が大きく、分子場近似や準化学近似では統計熱力学的に誤った結論へ導かれてしまうため、結果の信頼度が低かったためである。

そこで、申請者の先行研究として 2009 年から 2016 年にかけて、低次元の相転移にも信頼できる結果を与える密度行列繰り込み群 (DMRG) 法を用いて表面自由エネルギー密度を網羅的に計算した。微視的には表面ステップ間に表面再構成などの原因となる量子力学的な点型の引力相互作用がある微斜面の模型を使用した。得られた表面自由エネルギー密度 (表面張力) の特異性に基づきファセティング・ダイアグラムを作製した (図 1)。すなわち、ステップ間相互作用 ϵ_{int} を一定にして、十分高温ではステップが十分に分散した

Gruber-Mullins-Pokrovsky-Talapov (GMPT) 型普遍的振る舞いを見せる GMPT ゾーンになり、温度 $T_{f2} < T < T_{f1}$ では (111) 面から直接傾き p_1 の微斜面に接続するステップ・ドロプレット・ゾーンになり、 $T < T_{f2}$ では (001) 面と (111) 面のみから構成されるステップ・ファセティング・ゾーンになることを明らかにした。

図 1 ファセティング・ダイアグラム

は (111) 面から直接傾き p_1 の微斜面に接続するステップ・ドロプレット・ゾーンになり、 $T < T_{f2}$ では (001) 面と (111) 面のみから構成されるステップ・ファセティング・ゾーンになることを明らかにした。

2. 研究の目的

平衡状態及び平衡状態近傍の非平衡定常状態にある結晶微斜面を理論的に調べ、マクロステップ制御をめざしたガイドラインとなるマクロステップ形成ダイナミクスの基礎研究を行う。本研究では、不連続な表面張力が表面・界面微斜面に引き起こす数十～数百 nm 程度のマクロステップ形成の不安定性を平衡状態および平衡状態に近い非平衡状態で調べる。

3. 研究の方法

理論的に考察する模型として 1980 年代に表面ラフニング転移で良く調べられている制限 solid-on-solid (RSOS) 模型、ステップ間に量子力学相互作用に起源をもつ点型のステップ間引力のある RSOS 模型 (p-RSOS 模型)、SiC や GaN など 2 成分定比化合物を想定した AB 型 RSOS 模型の微斜面を用いた。信頼できる計算を行うため、平衡状態では 1 次元量子スピン系の分野で開発された DMRG 法を Okunishi らによって転送行列に拡張された積波動関数繰り込み群 (PWFRG) 法を使用する。2 成分系の平衡状態、非平衡定常状態など PWFRG 法で扱えない系の研究には、エントロピーを厳密に再現するモンテカルロ法を使用した。

ここで、RSOS 模型の「制限」とは結晶 (001) 面の隣り合う格子点上の結晶面高さの差が 0、 ± 1 と制限されることである。ゆらぎの有る界面ダイナミクス研究の分野での RSOS 模型は、表面ラフニング転移研究の分野では ASOS 模型と呼ばれている模型に相当する。

4. 研究成果

4.1 平衡状態

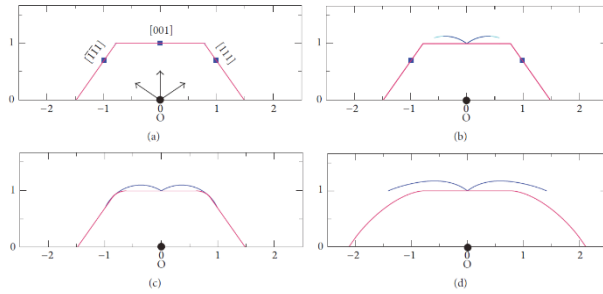


図2 PWFRG法で得られたp-RSOSモデルにおけるWulff図形とAndreev自由エネルギー(結晶平衡形)の温度変化。(a)ステップ・ファセティング・ゾーン(b)ステップ・ドロプレット・ゾーン(c)GMPTゾーン(d)元のRSOSモデル

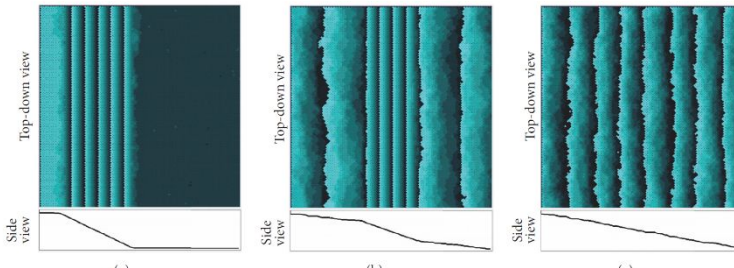


図3 モンテカルロ法で得られた微斜面のプロフィール(a)ステップ・ファセティング・ゾーン(b)ステップ・ドロプレット・ゾーン(c)GMPTゾーン

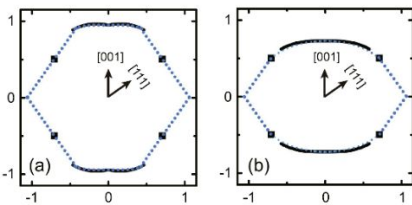


図4 PWFRG法で計算されたWulff図形と結晶平衡形の例

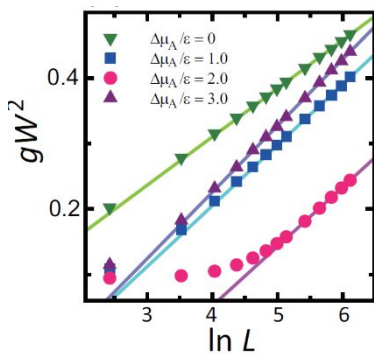


図5 表面ゆらぎ幅の二乗のサイズ依存性。gは表面が傾いているために入る幾何学的係数

ことがわかった。すなわち、ナノスケールにおいてはローカルに2本、あるいは4本のステップが束になる構造が安定になる領域があることを示した(2020年、Crystals)。

物理学分野では原子種が多成分であることは些末なことと考えられて研究されてこなかった。しかし、成分に偏りが有るとステップのつき方が1成分系と異なることが半導体育成現場で経験的に知られており、この研究は半導体育成現場の研究者の注目を集めた。

4.2 反応律速非平衡定常状態

ゆらぎの有る表面荒さについてラフネス指数、成長指数、動的指数を用いたFamily-Vicsekスケール関数で記述できることが知られている。対称性原理に基づく考察による表面の運動方程式が詳細に調べられており、非線形項を導入したKarder-Parisi-Zhang (KPZ) 普遍クラス

ファセティング・ダイヤグラムで不連続な表面張力(図2)と微斜面のファセット化の関係は予測されるものであったが、本当にそうなるのか、モンテカルロ・シミュレーションにより、調べた。具体的には、典型的な例について、ファセット化したマクロステップのプロフィールについてサイズを変えて計算した。その結果、ファセティング・ダイヤグラムの予測どおりに平衡状態の微斜面の構造は表面張力の不連続性により分類できることを示した(図3)(2017年、Adv. Condensed Matter. Phys., Invited)

PWFRG法で表面自由エネルギー及び表面張力を(001)面のラフニング温度以上と以下において、網羅的に計算し、Wulff図形と呼ばれる表面張力の極図形を具体的に描いた。そこから得られる結晶平衡形とAndreev自由エネルギーが一致することを具体的計算で示した(図2、4)。さらに、解析的理論により予測されていた性質、すなわちラフニング温度を越えるとWulff図形に有った(001)面のカスプが滑らかな2次関数になり、平衡形にファセットが消失するファセティング現象を起こすことを具体的に得た(2017年、J. Cryst. Growth)。

SiCやGaAs, GaNといった化合物半導体は2成分定比化合物である。結晶環境相において成分比に偏りが有る、という理由だけでマクロステップが形成されるかどうかを確かめるために大学院生の村田君、杉岡君と平衡状態におけるモンテカルロ計算を行った。ステップの高さに加えて表面ゆらぎ幅(平均表面高さの標準偏差)も計算した。その結果、環境相の成分比偏りだけではグローバルなマクロステップは形成されないことがわかった。系のサイズが大きいところで、サイズに対し表面ゆらぎ幅の2乗は対数発散し、これはBerezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT)型ラフニング転移で良く知られている表面張力波による表面ゆらぎによる普遍的振る舞いとコンシステントであった(図5)。

しかし、小さなサイズでは、状況が異なった(図5、 $\mu_A/\epsilon = 2.0$ 付近参照)。結晶構造を反映した極性方向に傾いたステップ列について、環境相の成分比偏りのせいで表面エネルギーの異方性が大きく変化し、Wulff図形の異方性も変化する。そのためステップ上の平均キルク距離が変化し有限サイズ効果の効き方が環境成分比の偏りに強く依存する

しかし、小さなサイズでは、状況が異なった(図5、 $\mu_A/\epsilon = 2.0$ 付近参照)。結晶構造を反映した極性方向に傾いたステップ列について、環境相の成分比偏りのせいで表面エネルギーの異方性が大きく変化し、Wulff図形の異方性も変化する。そのためステップ上の平均キルク距離が変化し有限サイズ効果の効き方が環境成分比の偏りに強く依存する

しかし、小さなサイズでは、状況が異なった(図5、 $\mu_A/\epsilon = 2.0$ 付近参照)。結晶構造を反映した極性方向に傾いたステップ列について、環境相の成分比偏りのせいで表面エネルギーの異方性が大きく変化し、Wulff図形の異方性も変化する。そのためステップ上の平均キルク距離が変化し有限サイズ効果の効き方が環境成分比の偏りに強く依存する

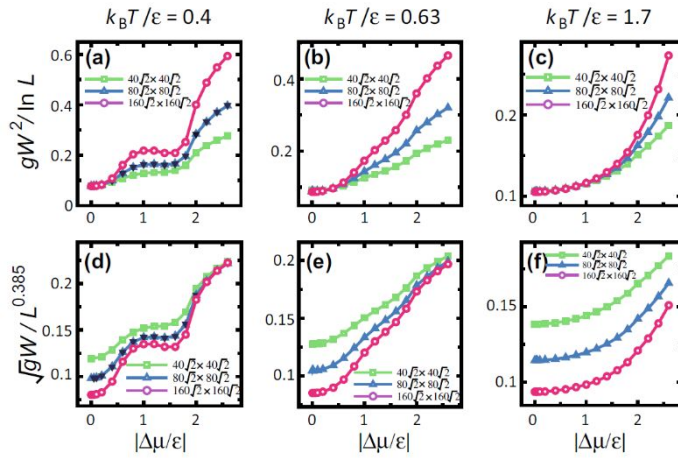


図6 (a)、(b)、(c)、スケールされた表面ゆらぎ幅の二乗と結晶成長駆動力の絶対値。(d)、(e)、(f) スケールされた表面ゆらぎ幅と結晶成長駆動力の絶対値

移るクロスオーバー点があること、3)このクロスオーバー点はWolfが1991年に提唱したカイネティック・ラフニング点と異なること、が得られた。また、表面荒さの傾き依存性も調べ、傾きが小さいところではBKTラフになり、傾きが大きいたちではKPZラフになることが得られた。この結果が意味することは、2次元核形成、あるいは(001)面のラフニング転移温度以上で(001)テラス面に多段差の島ができるとBKTラフになることである。これまで、テラス面上の島は普遍的クラスに影響しないと考えられてきたが、テラス上の多段差島が表面荒さの普遍クラスを変更することを明らかにした(2020年、Sci. Reports.)。

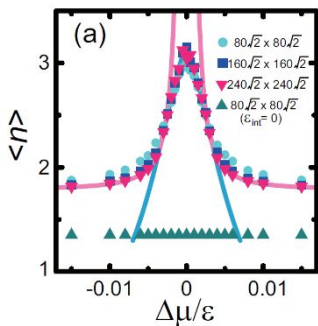


図7 マクロステップ高さや成長駆動力。ステップ・ドロプレット・ゾーン

ステップ・ドロプレット・ゾーンについてマクロステップ高さ $\langle n \rangle$ 及び成長速度と結晶成長駆動力 μ との関係をモンテカルロ法で調べた(図7)。 μ はバルク環境相とバルク結晶相の化学ポテンシャルの差である。その結果、1) $|\mu|$ が増大するとマクロステップ高さが減少すること、2) $|\mu|$ がクロスオーバー点 μ_R (図7では0.005) を越えるとグローバルなマクロステップは存在できず、ローカルなマクロステップのみになること、3) $\mu_R < |\mu|$ ではマクロステップの高さが代数的に $|\mu|$ に依存して減少すること、4) $|\mu| < \mu_R$ ではマクロステップの高さがスケーリング関数を持つこと、が得られた(2017年、Crystals)。

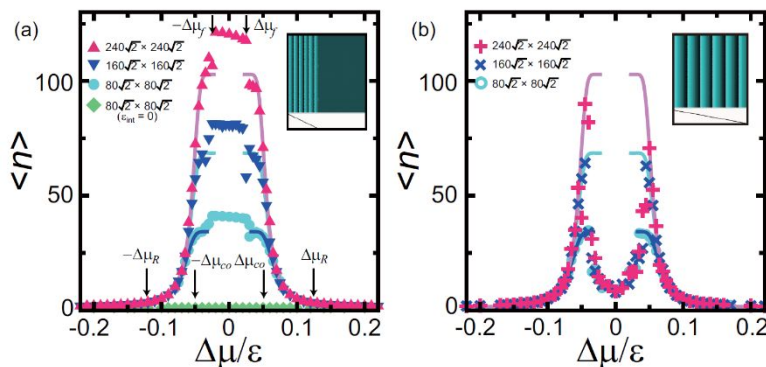


図8 マクロステップ高さや成長駆動力。ステップ・ファセティング・ゾーン(a)初期状態が集合ステップ(b)初期状態が等間隔ステップ

ステップ・ファセティング・ゾーンについてマクロステップ高さ $\langle n \rangle$ 及び成長速度と結晶成長駆動力との関係をモンテカルロ法で調べた(図8)。

その結果、1)結晶成長駆動力の絶対値が増大するとマクロステップ高さが減少すること、2)結晶成長駆動力の絶対値 $|\mu|$ がクロスオーバー点 μ_R を越えるとグローバルなマクロステップは存在できずローカルなマクロステップのみになること、はステップ・ドロプレット・ゾーンと同様だったが、 $|\mu|$ が小さいところはもっと複雑であった。すなわち μ_f 、 μ_∞ という特徴

的な駆動力があることがわかった(図8、9)。

$\mu_\infty < |\mu| < \mu_R$ ではマクロステップのステップ端で2次元poly nucleationにより素ステップがマクロステップから離脱する方法で成長/後退する(図9(c))。この領域ではシミュレーション結果は初期値に依存せず再現性が良い。 $\mu_f < |\mu| < \mu_\infty$ ではマクロステップのステップ端における単数核形成機構による間歇的成長/後退を示す(図9(b))。 $|\mu| < \mu_f$

が提案され、多くの現象がこのKPZクラスに属することが明らかにされている。ところが、結晶成長では観測値がKPZの指数にならないことも良く知られている。なぜ異なるのか多数の研究があるが、まだ解明されていない。そこで、申請者が計算しているモデルでステップ間引力が無い場合どうなるのかモンテカルロ法で調べた(図6)。計算開始から 2×10^8 MCS / site のデータは捨て、その後の 2×10^8 MCS / site について返金した。

その結果、1)平衡状態に近いところはBKTラフであり、大きな成長駆動力の絶対値ではKPZラフであること2)BKTラフからKPZラフへ

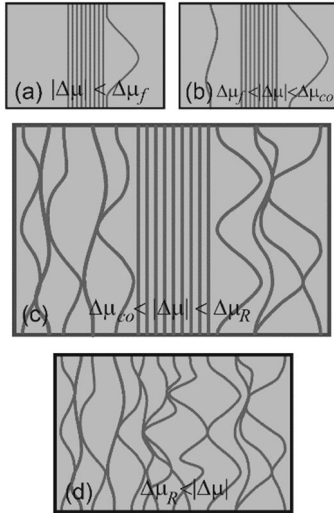


図9 特徴的成長駆動力と微斜面の構造との関係。ステップ・ファセティング・ゾーン

ではステップ端で核形成しても素ステップがマクロステップから離脱しないため、成長/後退できない(図9(a))。 μ_f 、 μ_{co} は系のサイズと臨界核サイズ、平均核間距離との大小関係から得られる(2018年、Phys. Rev. Materials)。

2018年に得たマクロステップの高さと成長速度との関係がSiCにおける実験と相似であることから、SiCの実験結果の説明を試みた。すなわち、ステップ・ファセティング・ゾーンとステップ・ドロプレット・ゾーンについてマクロステップの高さと成長速度の関係を実験と比較できるように図示した(図10)。

拡散律速成長では成長速度がマクロステップ高さに反比例するため、実験では拡散律速成長と反応律速成長を区別できていた。しかし、ステップ・ファセティング・ゾーンでは成長速度はマクロステップ高さに反比例することが得られた。反比例の関係だけからは拡散律速の結晶成長と反応律速の結晶成長を区別できないことがわかった。さらに、 $|\mu| < \mu_{co}$ では初期状態によって結果が大きく異なることがわかった。このことが実験での観測値がスカッターしている理由を説明できる可能性を示した(2019年Crystal Growth & Design)。

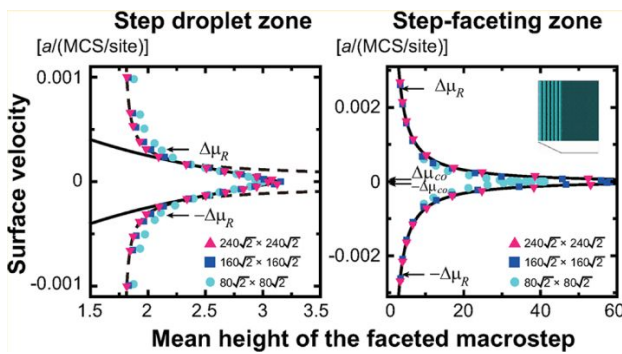


図10 マクロステップ高さと成長速度。(a)ステップ・ドロプレット・ゾーン(b)ステップ・ファセティング・ゾーン

ステップ・ファセティング・ゾーンにおいて表面荒さをモンテカルロ法で計算した。すると予想外にも μ_R 付近で系のサイズと共に表面ゆらぎ幅が増大した(図11)。これは、二つのことを意味する。一つは、 $\mu_{co} < \mu < \mu_R$ でファセットしたマクロステップがグローバルに存在しマクロファセットの高さが低い方のエッジで二次元核形成過程により成長している(図9(c))にも拘らず、表面はラフだという事である。実際ラフな面の特徴である連続成長をしている(図10(b))。この時得られた荒さ指数はKPZラフな面の値0.386よりずっと大きく0.6~0.8であり、結晶成長の実験で観測される値に近かった。

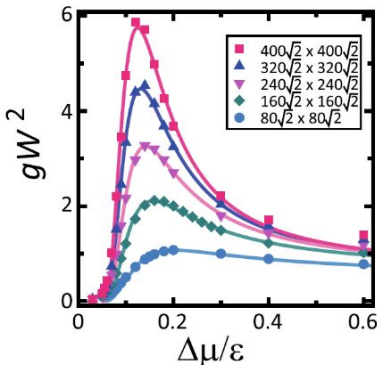


図11 表面ゆらぎ幅の2乗と成長駆動力。ステップ・ファセティング・ゾーン

この状況下のファセット化したステップを持つラフな微斜面をファセット化ラフな面と呼ぶことにした。もう一つは μ_R が非平衡相転移点の候補であるという事である。ゆらぎ幅は、高さ高さ相関関数において距離を系のサイズにした場合の1/2であることが知られている。系のサイズを大きくすると μ_R における表面のゆらぎ幅の最大値は指数0.60で発散したことから、系のサイズが十分大きいところではラフネス指数も0.60に収束すると考えられた。さらに、 μ_R におけるスケール関数を求めた(図12)。

ファセット化しているにも拘らずラフな面の発見は常識を大きく覆すものである。メゾスケールの表面・界面成長を計算する理論方法にR.

Kobayashiらによって開発・発展されたフェーズフィールド法があるが、表面・界面はラフであることが前提であった。それにも拘わらず、例えば雪の結晶のようにファセット化した結晶形がフェーズフィールド法によりよく再現されることが知られている。同様のことは融液成長におけるSiについても知られている。本研究はメゾスケールのファセット化とナノスケールのファセット化では仕組みが異なることを示している。また、表面張力の異方性が大きい結晶であっても、ファセット化ラフな面を狙えば良質な結晶を育成できる可能性が有ることを明らかにした(2021年、Sci. Reports.)。

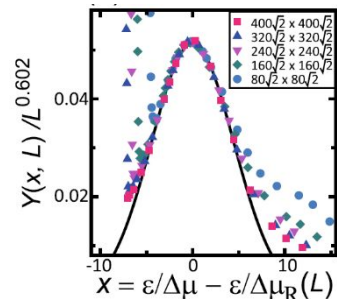


図12 マクロステップ凝集/分散に関するスケール関数

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 9件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 10件）

1. 著者名 Akutsu Noriko	4. 巻 11
2. 論文標題 Faceted-rough surface with disassembling of macrosteps in nucleation-limited crystal growth	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-83227-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Akutsu Noriko	4. 巻 10
2. 論文標題 Crossover from BKT-rough to KPZ-rough surfaces for interface-limited crystal growth/recession	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-70008-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Akutsu Noriko, Sugioka Yoshiki, Murata Naoya	4. 巻 10
2. 論文標題 Surface Roughness Changes Induced by Stoichiometric Deviation in Ambient Phase for Two-Component Semiconductor Crystals	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Crystals	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/cryst10030151	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Akutsu Noriko	4. 巻 1290
2. 論文標題 Driving force dependence of the height of a faceted macrostep in non-equilibrium steady-state crystal growth	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/1290/1/012015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Akutsu Noriko	4. 巻 19
2. 論文標題 Relationship between Macrostep Height and Surface Velocity for a Reaction-Limited Crystal Growth Process	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 2970 ~ 2978
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.9b00168	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Akutsu Noriko	4. 巻 2
2. 論文標題 Height of a faceted macrostep for sticky steps in a step-faceting zone	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.2.023603	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Akutsu Noriko	4. 巻 7
2. 論文標題 Disassembly of Faceted Macrosteps in the Step Droplet Zone in Non-Equilibrium Steady State	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Crystals	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/cryst7020042	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Akutsu Noriko	4. 巻 2017
2. 論文標題 Profile of a Faceted Macrostep Caused by Anomalous Surface Tension	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Advances in Condensed Matter Physics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1155/2017/2021510	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Akutsu Noriko	4. 巻 468
2. 論文標題 Effect of the roughening transition on the vicinal surface in the step droplet zone	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 57~62
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2016.10.014	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計52件(うち招待講演 10件/うち国際学会 15件)

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Disassembling of Faceted Macrosteps on a Vicinal Surface for Interface-Limited Growth near Equilibrium
3. 学会等名 The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Noriko Akutsu, Yoshiki Sugioka, and Naoya Murata
2. 発表標題 Atomically Smooth but Globally Rough: Stoichiometric Deviation in Ambient Phase at Equilibrium for Two-Component Semiconductor Crystals
3. 学会等名 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Roughness of Vicinal Surface: Crossover from Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Rough to Kardar-Parisi-Zhang-Rough Surfaces
3. 学会等名 The Conference on Complex Systems 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 阿久津典子
2. 発表標題 化学とAI」時代の情報教育 学ぶAIから使うAIへ
3. 学会等名 日本化学会 第101春季年会 シンポジウム[S10-1am]日本化学会 第101春季年会 シンポジウム[S10-1am]「化学・情報科学の融合による新化学創成に向けて」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 阿久津典子
2. 発表標題 BKT-ラフな面からKPZ-ラフな面へのクロスオーバー現象とカイネティックラフニング現象の関係
3. 学会等名 日本物理学会2021年年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 阿久津典子、杉岡良樹、村田直也
2. 発表標題 環境相成分比の偏りによる2段差4段差ステップの割合とキंक密度変化：2成分定比化合物における平衡状態微斜面
3. 学会等名 日本結晶成長国内会議
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Faceted Macrostep-Height Dependence of the Surface and the Step Velocities: Reaction-Limited (Interface-Limited) Crystal Growth
3. 学会等名 The 12th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices 19 (ALC'19) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Disassembly of Faceted Macrosteps in Non-Equilibrium Steady State: the Cases in the Step-Faceting Zone or in the Step Droplet Zone
3. 学会等名 BIT's 7th Annual Conference of AnalytiX-2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Macrostep-Height Dependence of Surface Velocity for a Reaction- (Interface-) Limited Crystal Growth
3. 学会等名 International Conference on Crystal Growth and Epitaxy-18 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 阿久津典子
2. 発表標題 "AI vs 人間" 良い結晶を創るのはどっち?
3. 学会等名 第42回結晶成長討論会ランブセッション (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 阿久津典子
2. 発表標題 学ぶAIから使うAIへ 「AIと化学」の時代の情報教育
3. 学会等名 分子科学研究所所長招聘会議「化学の近未来：化学と情報科学との融合 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 阿久津典子
2. 発表標題 氷ブリズム面の格子気体模型とその相転移温度：密度行列繰り込み群計算
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 阿久津典子
2. 発表標題 Crystal Dissolution in a Reaction- (Interface-) Limited Process on a Vicinal Surface with Self-Assembled Faceted Macrosteps
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2019年大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Introduction to Deep Learning with Software Keras: A guide for End-to-End Users
3. 学会等名 International Symposium & School on Crystal Growth Fundamentals (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Disassembly of Faceted Macrosteps in the Non-Equilibrium Steady State: a Vicinal Surface with Step-Step Attraction
3. 学会等名 2018 Collaborative Conference on Crystal Growth (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Driving force dependence of the height of a faceted macrostep in non-equilibrium steady-state crystal growth
3. 学会等名 XXX IUPAP Conference on Computational Physics 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 阿久津典子
2. 発表標題 二つの数値計算：密度行列繰り込み群法による表面張力&モンテカルロ計算法による表面荒さ計算
3. 学会等名 計算機センター特別研究プロジェクト「第13回結晶成長の数理」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Practice in Machine Learning for Beginners
3. 学会等名 International Symposium & School on Crystal Growth Fundamentals (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Faceted macrosteps in the step droplet zone in non equilibrium steady states
3. 学会等名 The 4th Int'l Conference on Surface and Interface of Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Step droplets on a crystal surface with properties similar to one-dimensional clusters
3. 学会等名 EMN Meeting on Droplets 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Faceted macrosteps caused by anomalous surface tension in the step droplet zone in the non-equilibrium steady state
3. 学会等名 大阪電気通信大学国際ワークショップ (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Profile of a faceted macrostep in the step droplet zone: a Monte Carlo study in the non-equilibrium steady state
3. 学会等名 The 8th International Symposium on Surface Science (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Noriko Akutsu
2. 発表標題 Driving force dependence of the size of a faceted macrostep in step droplet zone: non-equilibrium steady state
3. 学会等名 4th World Congress and Expo on Nanotechnology and Materials Science (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Noriko Akutsu and Yasuhiro Akutsu	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Nova Science Publishers, Inc., New York	5. 総ページ数 253, Ch.6 197-227.
3. 書名 "Density-Matrix Renormalization-Group Study of Lattice Gas on the Surface of a Wurtzite Crystal Structure" in "Understanding Density Matrices"	

〔産業財産権〕

〔その他〕

1. 2019年11月、大阪電気通信大学エレクトロニクス基礎研究所ワークショップ「固液を区別するパラメタ 長距離秩序か配向秩序か」を企画し実施。 http://www.feri.osakac.ac.jp/workshop/ws20191130.html 2. 2019年7月、大阪電気通信大学エレクトロニクス基礎研究所主催、九州大学応用力学研究所共催、講演会「企業のAI導入現場で起きていること」講演者 古屋正 (株)東京システムリサーチを企画し実施。 http://www.feri.osakac.ac.jp/lecture/lec20190717.html 3. 2018年7月、大阪電気通信大学エレクトロニクス基礎研究所ワークショップ「界面・ナノ構造・結晶成長への機械学習の応用と実践」を企画し実施。 http://www.feri.osakac.ac.jp/workshop/ws20180701.html 4. 2017年10月、大阪電気通信大学国際ワークショップ`New developments in step dynamics on crystal surfaces: from nanoscale to mesoscale`を企画し実施。 http://www.feri.osakac.ac.jp/workshop/ws20171027.html 5. 大阪電気通信大学阿久津研究室 http://oweb1.osakac.ac.jp/labs/akutsu/n_akutsu/pub_papers/pub_paper_e.html 6. 大阪電気通信大学教員情報データベース https://research.osakac.ac.jp/index.php?%E9%98%BF%E4%B9%85%E6%B4%A5%E3%80%80%E5%85%B8%E5%AD%90

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------