薄膜エピタキシャル成長プロセスにおけるステップ成長の異方性[†]

國澤 康平* 山本 昌裕*
尾方 成信** 渋谷 陽二***

Step-Growth Anisotropy on Thin Film Epitaxial Process

by

Kohei KUNIZAWA *, Masahiro YAMAMOTO *, Shigenobu OGATA ** and Yoji SHIBUTANI ***

Anisotropic growth process of two kinds of steps on Al (111) substrates is performed using kinetic Monte Carlo (kMC) method. Employed kMC parameters of activation energy and attempt frequency are estimated by nudged elastic band (NEB) method and transition state theory. Obtained set of results suggest that degree of the anisotropic growth clearly depends on substrate temperature and deposition rate. We find microscopic origin of the anisotropic growth is difference of diffusion rates along {111} and {100} steps, and there is a particular growth condition in which strong anisotropy is observed. At high deposition rate and low temperature, new islands which are easily generated on terraces, hinder the growth anisotropy weaker.

Key words : Kinetic monte carlo, Film growth, Anisotropy, Aluminum surface, Diffusion

1 緒 言

薄膜形成技術は、半導体、ディスプレイ、MEMS、光學デバイス等の様々な製品の中核をなす基盤技術であり、そのさらなる発展は巨大磁気抵抗効果¹⁾に代表されるような薄膜の新機能の創出に不可欠である。

現在作製されている薄膜の多くは、基板上へ原子を吸着させることで形成されている。形成される薄膜の形態は、基板上での吸着原子の挙動によって支配されており、基板温度や成膜速度などマクロな制御変数を用いてその挙動を制御することが可能になれば、薄膜の新機能創製技術に大きく貢献できる。

薄膜がエピタキシャル成長する時、供給された吸着原子同士が集合して島構造を形成するため、島の端に原子の段差(ステップ)が現れる。このステップは新たな吸着原子を誘引し島構造が成長する。そして、これらの島構造同士が融合し原子層を形成しながら薄膜が成長していく。したがって、薄膜形成過程で現れるステップの原子構造や方位は、生成する薄膜構造に大きく影響を与える。^{2)~4)}通常の薄膜基板表面は(111)面などの低指数面が選択されるが、低指数面から少し傾いた微傾斜面を基板として選択されることもある。こうすることで、基板に傾斜方向によって決まるステップをあらかじめ配置することができる。その上で、適当な成膜条件を選択すれば、原子レベルで平坦な表面⁵⁾やステップ上に周期的なナノワイヤー構造⁶⁾を形成することができる。また、Si微傾斜基板上にPb薄膜を蒸着させた系では、成長したステップ構造がコンダクタンスの異方性を与えることが

知られている。⁶⁾これらの微細構造の作製手法は薄膜成長を利用するため、構造欠陥の原因となるような加工プロセスを必要としない。そのため、各種薄膜デバイス作製に応用することができれば、従来とは異なる新たな薄膜成長プロセスを提案できる可能性がある。

ステップには同じ結晶構造中であっても方位によって異なる構造を持ち、成長に異方性が存在する。⁷⁾この性質を利用すると、基板方位を変化させるという特別な加工プロセスを用いることなく、異なる薄膜構造を自己組織的に作製することが可能となる。この技術の実現のために、ステップ成長の詳細な理解が重要となる。微視的に見るとステップ成長は吸着原子の拡散現象に帰着されるため、本研究では個々の吸着原子の拡散確率に着目し、成膜速度と基板温度に対するステップ成長の異方性を原子論的に解析する。また、材料としては、LSIや液晶パネル等の配線材料として工学的な需要が高いAlを対象とする。

2 fcc (111) 基板における薄膜成長のモデリング手法

2・1 kinetic Monte Carlo 法

基板上において、吸着原子がある準安定サイトから近接の別の準安定サイトへ拡散する過程を1つのイベントとする。ここで、薄膜成長はこれらのイベントの組み合わせによって表現できると考える。すなわち、成膜速度が極端に大きい場合や、基板温度が極端に高い場合を除いて、吸着原子の挙動をお互いに独立なポアソン過程とみなすことができる。このような場合、kMC法^{8)~10)}を用いたモデリングが有効である。分子動力学(MD)法も

[†] 原稿受理 平成 19 年 12 月 10 日 Received Dec. 10, 2007 ©2008 The Society of Materials Science, Japan

* 大阪大学大学院 〒565-0871 吹田市山田丘, Graduate Student, Osaka Univ., Yamadaoka, Suita, 565-0871

** 正 会 員 大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻 〒560-8531 豊中市待兼山, Dept. of Mech. Sci. and Bioengineering, Graduate School of Eng. Sci., Osaka Univ., Machikaneyama, Toyonaka, 560-8531

*** 正 会 員 大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻 〒565-0871 吹田市山田丘, Dept. of Mech. Eng., Graduate School of Eng., Osaka Univ., Yamadaoka, Suita, 565-0871

原子のダイナミクスを扱う手法として良く知られているが、時間刻みを原子振動が追跡できる程小さく (10^{-15} s 程度) 設定せざるを得なく、吸着原子の拡散イベントの計算には多くの計算が必要となる。それに対して、kMC 法では吸着原子の拡散を確率的なイベントの選択として表すため、MD 計算に比べて扱える時間スケールの飛躍的な向上が望める。kMC 法では遷移状態理論¹¹⁾に基づき、イベント j の発生確率 $\Gamma^{(j)}$ を式 (1) のように表す。

$$\Gamma^{(j)} = \Gamma_0^{(j)} \exp(-E_d^{(j)} / k_B T) \quad (1)$$

ここで、 $E_d^{(j)}$ 、 $\Gamma_0^{(j)}$ はそれぞれイベント j に対する活性化エネルギー、試行頻度であり、 T は基板温度、 k_B はボルツマン定数である。活性化エネルギーは、Nudged Elastic Band 法¹²⁾により評価される最小エネルギー経路から求める。種々の原子配置でのエネルギーは、Mishin¹³⁾らによる EAM 原子間ポテンシャルを用いて評価する。試行頻度 $\Gamma_0^{(j)}$ は次式によって与えられる。

$$\Gamma_0^{(j)} = \frac{\prod_{i=1}^{3N} \nu_i}{\prod_{i=1}^{3N-1} \nu_i^*} \quad (2)$$

ν_i 、 ν_i^* はそれぞれイベントの初期状態、遷移状態における固有振動モードの振動数である。 N 個の原子からなるモデルにおいては、 $3N$ 個の固有振動数が存在するが、自由エネルギー曲面の鞍点に相当する遷移状態では、そのうち一つが虚の値を持つ。kMC 法の計算手順を以下に示す。

- ① 式 (1) を用いて現在の原子配置において発生し得るすべての拡散イベントの発生確率 $\Gamma^{(j)}$ 、原子の供給イベント Γ^{dep} を計算し、イベント発生確率の総和 R を $R = \sum_j \Gamma^{(j)} + \Gamma^{\text{dep}}$ として求める。なお Γ^{dep} は原子の供給イベントの発生確率であり、成膜速度を $F[\text{ML/s}]$ (1ML は 1 分子層を表し、ここでは基板 1 層分の原子に相当)、基板 1 層の原子数を $N_{\text{sub}}[1/\text{ML}]$ として、 $\Gamma^{\text{dep}} = F \times N_{\text{sub}}[1/\text{s}]$ と評価できる。
- ② ①で求めた各イベントの発生確率とイベントの詳細を整理したイベントテーブルを作成する。イベントテーブルの概略図を Fig. 1 に示す。イベントテーブルは毎ステップ更新され、この情報が吸着原子のすべての挙動を支配する。
- ③ 一様乱数 ρ_1 を発生させ、②で求めたイベントテーブルから $\sum_{i=0}^{j-1} \Gamma^{(i)} \leq \rho_1 R < \sum_{i=0}^j \Gamma^{(i)}$ を満たすイベント j を選ぶ。
- ④ ③で選ばれたイベント実行する。
- ⑤ 一様乱数 ρ_2 を用いて、シミュレーション時間を $\delta t = -\ln(\rho_2/R)$ だけ進める。
- ⑥ ステップ①へ戻る。

Fig. 1 Event table.

2・2 発生イベントと発生確率

本解析では 25 種類の拡散イベントを考慮している。そのうち、ステップ付近で発生回数が多く、ステップ成長に対して影響が大きい代表的なイベントについて、それらの拡散障壁と試行頻度を Table 1 に示す。Fig. 2 には Table 1 の各イベントが発生するときの原子配置を示す。Fig. 2 中で黒い原子が拡散イベントを持つ吸着原子であり、矢印が拡散方向、矢印近くに示す数字がそのイベントの拡散障壁を表す。原子の吸着イベントが選択された場合は、まず 2 つの一樣乱数を用いて基板面内の 1 点を決める。つぎに、薄膜構造を真上から見て、この点から面内方向にポテンシャルのカットオフ距離の範囲を探索し、その中で最も原子が堆積している場所を見つける。そして、その場所から最も近い結晶の格子点へ新たな吸着原子を配置し、原子の供給イベントを完了する。

2・3 吸着原子の拡散異方性について

基板表面に供給された吸着原子は、薄膜上の平坦な面 (テラス) やステップを拡散していき、ステップがキンク状になっている場所 (キンクサイト) でトラップされて島構造を成長させるか、テラス上で他の吸着原子と島の核を形成する。fcc (111) 基板には Fig. 3 に示すように結晶学的に異なる {111} ステップと {100} ステップが存在しており、¹⁴⁾吸着原子はステップにおいて拡散異方性を持つ。fcc (111) 面上で {111} ステップ沿いに吸着原子が存

Table 1 Estimated activation energies and attempt frequencies of an adatom on Al (111) surface.

Process	E_d [eV]	Γ_0 [Hz]
corner to {111} step	0.22	1.44×10^{12}
corner to {100} step	0.04	1.01×10^{12}
along {111} step	0.42	1.15×10^{13}
along {100} step	0.24	4.80×10^{12}
{100} step to corner	0.28	5.00×10^{12}
{111} step to corner	0.45	7.41×10^{12}
descent {111} step	0.12	1.77×10^{12}
descent {100} step	0.42	1.63×10^{13}

Fig. 2 Schematics of adatom diffusion processes and corresponding activation energies (a) along two kinds of steps and kink-sites of (b) {111} step and (c) {100} step on Al (111) surface.

Fig. 3 Two possible steps on fcc {111} surface. The insets are enlarged views of {111} step and {100} step. White dots in insets indicate adatom diffusion path along the steps estimated by NEB.

在するとき、吸着原子は {111} 面と {111} ファセットの両面に接する状態である。同様に、{100} ステップ沿いにある吸着原子は {111} 面と {100} ファセットの両面に接している。吸着原子が {111} ステップに沿った拡散を行う場合、その経路は3つある基板原子との結合手のうち2つを一時的に切る必要がある。一方、{100} ステップでは1つの結合手を切るだけでよく、拡散の活性化エネルギーは比較的小さくてすむ。そのため、吸着原子は {100} ステップでより高い拡散確率を持つ。

3 kMC 法によるステップ成長の解析結果

3・1 ステップ成長の異方性

Fig. 4 に示すようにモデル基板サイズを $34\text{nm} \times 34\text{nm}$ とし、3本の {111} ステップまたは {100} ステップを等間隔に配置した構造をそれぞれモデル I、モデル II とする。この基板の平均的な面方位は {111} 面を、 $[11\bar{2}]$ 方向または $[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向に約 1.2 度だけ傾けた面方位に一致する。ステップ長さ方向に周期境界条件を施す。基板温度を 100K, 200K, 300K に設定し、成膜速度は 15ML/s とする。kMC 計算は 0.25ML 分の吸着原子が堆積するまで実行し、モデル I とモデル II のステップが持つ成長異方性について調べる。得られたステップ構造を Fig. 5 に示す。

Fig. 5 に示すように、基板温度 100K と、200K の場合に樹枝状な成長が見られ、ステップ成長方向はモデル I とモデル II で異なっている。このような、直線状ではなくなったステップは 2 種類のステップが混在した構造となっており、このステップ上には多種類の拡散イベントが発生する。一方、300K ではどちらのステップも直線形状に近い形状を保っており、形状の大きな違いは見られ

Fig. 4 Computational model of vicinal fcc {111} surface.

Fig. 5 Comparison of step morphologies on Model I and Model II with $F = 15\text{ML/s}$ up to total coverage $\theta = 0.25\text{ML}$ at 100K, 200K and 300K.

ない。著者の知る限り、実験によって Fig. 5 に示すような、成膜条件の変化に従ってステップ成長異方性が変化する例は報告されていない。この結果から予想される、それぞれのモデルのステップが持つ成長傾向は Fig. 6 のように図示される。

これは Fig. 3 にあるように隣り合う {111} ステップと {100} ステップが 60 度回転した関係を持つことから理解できる。モデル I のステップでは成長方向が 2 つあるため、成長段階でステップ先端が結合し、直線状なステップ成長が起りやすい。これに対し、モデル II のステップは成長方向がステップに対して垂直方向のみであるので、ステップの成長起点を保ちやすく、指状なステップ成長が起りやすい。

Fig. 6 Different tendencies of step-growth between Model I and Model II.

本研究では、kMC 計算の結果から得られる薄膜構造を特徴づける指標として、基板上に形成される全ステップの長さ L_{step} を求める。配位数 9 の原子が表面原子面内に含まれる原子、3 の原子が表面で孤立した吸着原子を表すことから、ステップを構成する原子の数を配位数が 4 以上 9 未満の原子数 N_{step} とする。Al の原子直径 0.286nm より $L_{\text{step}} = N_{\text{step}} \times 0.286\text{nm}$ と計算できる。Fig. 7 に成膜速度 15ML/s における L_{step} を示す。 L_{step} は成長するステップ構造が同じなら、基板温度が低いほど長くなる傾向がある。これは吸着原子の拡散イベントは基板温度が低くなるほど発生確率が低下し、吸着原子がキンクサイトへ拡散する前にステップに固定されるようになり、ステップが樹枝状に成長するためである。

Fig. 7 に示す黒と白の棒グラフの高さの差は、2 種類のステップに関する L_{step} の差を表している。例えば、成膜速度 15ML/s の場合、基板温度 200K で最も強くなり、吸着原子のステップにおける拡散異方性、および成膜条件によって吸着原子の拡散、供給イベントの確率の大小関係が変化することに起因している。

拡散イベントの温度依存関係と成膜速度 15ML/s である原子供給イベントの発生確率 Γ^{dep} を Fig. 8 に示す。吸着原子の供給イベントに比べて発生確率が十分小さい表面拡散イベントに関しては、そのイベントが発生する前に吸着原子が島構造に取り込まれて動けなくなるため、ほとんど発生しない。例えば {100} ステップに沿った拡散イベント (Fig. 8 中 along {100} step) の発生確率は基板温度 200K、成膜速度 15ML/s において Γ^{dep} より大きいので、発生することができる。しかし、基板温度が 100K になると、この大小関係が逆転し、{100} ステップに沿った拡散イベントはほとんど発生できなくなる。このようなイベント発生確率の大小関係は与えられた基板温度、成膜速度といったマクロな成膜条件により決まり、ステップ形状を決定する大きな要因となる。以下ではこのステップの形状に影響を与えるイベント群を 3 つに分類して個別に考察する。3 つのイベント群が発生する原子配置の概略図を Fig. 9 に示す。

1 つ目は、ステップの端に吸着した原子の拡散イベン

Fig. 7 Step length of Model I and Model II on Al (111) surface up to total coverage $\theta = 0.25\text{ML}$ at 100K, 200K and 300K with $F = 15\text{ML/s}$.

Fig. 8 Temperature dependence of the frequencies of adatom diffusion and deposition ($F = 15\text{ML/s}$) events.

Fig. 9 Three kinds of events related to step growth. A, B and C show “corner to step”, “along step” and “descent step” events respectively.

トである (Fig. 9 中 A)。これらイベントの発生位置では、吸着原子は常に 2 種類の拡散障壁、拡散方向を持ち、{111} ステップへの拡散障壁が 0.22eV に対して {100} ステップ方向へは 0.04eV である。そのため、ステップ端に吸着したほとんどの吸着原子 (基板温度 300K で 99% 以上) は {100} ステップ方向へ拡散し、ステップの先端は {100} ステップと垂直な方向に成長する。ステップが成長して複雑な形状になればこのような原子配置はさらに増え、ステップの成長異方性をさらに顕著にする。

2 つ目は、ステップに平行な拡散現象である (Fig. 9 中 B)。これらの吸着原子はステップに沿った拡散イベントを持ち、ある程度拡散した後にステップ上で島構造の一部となる。また、比較的大きな障壁であるが、別のステップ上の拡散に移るイベントも持ち、2 種類のステップ間を互いに移動することができる。基板温度が 100K の場合は、このどちらとも発生しにくく、吸着原子は樹枝状なステップを形成し、 L_{step} の値は大きくなる。しかし、基板温度が 200K になると、{100} ステップ沿いの拡散 (拡散障壁: 0.28eV) が発生するようになり、キンクサイトまで拡散できる吸着原子が増える。そして、Fig. 6 で示したように、モデル I のステップはモデル II のステップに比べて直線形状を保った成長をしやすいため、樹枝状な成長は見られなくなる。基板温度が 300K の場合は、吸着原子は {111} ステップに沿った拡散イベント (同: 0.42eV) も発生することができるようになり、モデル II のステップでも、樹枝状な形状に成長しない。

3つ目は、吸着原子がステップを下ることによって、ステップに取り込まれるイベント群である (Fig. 9 中 C). このイベントのエネルギー障壁はシュワーベル障壁¹⁵⁾と呼ばれる。ステップの上側のテラスからステップへ到達する吸着原子は最初の吸着位置から最もステップに近い点、つまりステップの成長が遅い点からステップに取り込まれる確率が高い。そのため、C のイベント群はステップに沿った成長速度の変化を平滑化する作用があり、ステップ成長においてステップの形状変化を抑える効果を持つ。¹⁶⁾ Al (111) 基板上ではシュワーベル障壁は吸着原子が {111} ステップを下るときの障壁 0.12eV であり、原子がステップの下側のテラスから吸着するための障壁はテラス上での拡散障壁 0.04eV と大きな違いはない。そのため、100K の場合はほとんどの吸着原子がステップの下側テラスから直接ステップへ吸着し、C のイベント群はほとんど発生しない。しかし、成膜温度が上昇するにつれて、テラス上の拡散イベントの発生確率に対してシュワーベル障壁を越えるイベントの発生確率が相対的に大きくなり、C のイベント群がステップ形状の安定化に寄与するようになる。

以上、3種類の拡散イベントのせめぎ合いによって、ステップの形状が決定される。総じて、A のイベント群がステップの成長方向を決定し、樹枝状な形状にステップを成長させる要因となる一方、B と C のイベント群は直線形状を保ったステップ成長を促す働きがある。モデル I とモデル II のステップ形状が基板温度によって変化するのは、成膜条件によってこれら A, B, C のイベント群の発生回数が増えるためである。本研究での成膜条件では、B 群のイベントのうち、特に {111} ステップと {100} ステップ上での拡散イベント (along {111} step, along {100} step) は発生する原子配置が多く、また成長するステップ選択と成膜条件によって発生回数が影響を受けやすい。そのため、ステップの成長異方性を理解する上で重要なイベントである。200K 基板で最も強くステップ成長の異方性が現れるのは、これら 2つのイベントのうち {100} ステップ上での拡散イベントのみが発生する条件からであり、この条件付近ではモデル I のステップだけが直線状な成長をできるためである。

3・2 成膜条件とステップ成長異方性の関係

成膜速度を変化させた場合の L_{step} の異方性について検討する。基板温度は、先ほどと同様に 100K, 200K, 300K に設定する。ここで、モデル I, モデル II の全ステップ長さをそれぞれ L_{Istep} , L_{IIstep} と定義することにより、 L_{step} の異方性 $I = (L_{\text{IIstep}} - L_{\text{Istep}}) / L_{\text{IIstep}}$ と評価し、これを新たなステップ成長の異方性を表す指標とする。成膜速度と I の関係を Fig. 10 に示す。

前節で述べたように、ステップ成長異方性は {100} ステップと {111} ステップ沿いの拡散イベントのうち、前者のみが発生する成膜条件で高くなると考えられる。基板温度一定の条件で成膜速度を低速から高速へ変化させた場合、十分低速である場合はどちらの拡散イベントも発生するため、モデル I, モデル II のステップとも直線状な

Fig. 10 Step-growth anisotropy vs. deposition rate.

成長が起こり、 I の値は小さい。しかし、成膜速度が大きくなるにつれ、相対的に発生確率の小さい {111} ステップ沿いのイベントがまず発生できなくなり、モデル II のステップが樹枝状な成長をする結果、 I の値が大きくなる。成膜速度がさらに大きくなると、{100} ステップ沿いのイベントも発生できなくなり、両方のモデルのステップが樹枝状に成長をするようになり、 I の値は再び小さくなる。以上のように、成膜速度を変化させると I は Fig. 10 のようなピークを持つ。また、吸着原子は基板が持つステップを成長させるだけでなく、テラス上に新たな島を形成することがある。本研究で用いるステップ間隔が 11.3nm のモデル基板では、基板温度 100K, 200K, 300K においてそれぞれ成膜速度が 1.5×10^2 ML/s, 1.5×10^3 ML/s, 5.0×10^3 ML/s 以上の場合に島の形成が観察された。間隔が大きくなるほど孤立した吸着原子はステップまで拡散して島に取り込まれなくなるため、これら臨界成膜速度の値は小さくなる。そして、島が発生する成膜条件では、基板に元からあるステップの成長が阻害されるため、 I の値は大きく低下する。

ステップ成長異方性が大きくなると予想される成膜条件 (Anisotropy region) および kMC 計算から得られた成膜条件との関係を Fig. 11 に示す。同時にテラス上に島が形成された成膜条件と、その値から予想される島発生条件 (Nucleation region) を示す。大きなステップ成長異方性が予想される条件は、吸着原子の供給イベントの発生確率 Γ^{dep} が {111} ステップ沿いの拡散確率より大きく、{100} ステップ沿いの拡散確率より小さい条件である。Fig. 11 中に kMC 計算より得られたステップの成長異方性が大きく ($I > 0.2$) なった成膜条件をプロットすると、成長異方性が大きくなると予想される領域 (Anisotropy region) とほぼ一致することから、3・1 節で述べた異方性成長メカニズムの妥当性が確かめられた。

4 結論

kMC 法を用いて Al (111) 面におけるステップ成長の異方性を解析し、以下のような結果を得た。

- (1) ステップ成長の異方性は基板温度、成膜速度に依

Fig. 11 Step-growth anisotropy map.

存しており、異方性は吸着原子が2種類のステップのうち{100}ステップのみで拡散可能な成膜条件で大きくなる。

(2) ステップ成長は吸着原子の拡散に支配されており、各拡散イベントの発生確率を解析することによってその形状を予測することができる。

参 考 文 献

- 1) M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau and F. Petroff, "Giant magnetoresistance of (001)Fe/(111)Cr magnetic Superlattices", *Physical Review Letters*, Vol.61, No.21, pp.2472-2475 (1988).
- 2) T. Maroutian, L. Douillard and H.-J. Ernt, "Wavelength selection in unstable homoepitaxial step flow growth", *Physical Review Letters*, Vol.83, No.21, pp.4353-4356 (1999).
- 3) H. Omi and T. Ogino, "Growth-induced atomic step ordering on patterned and non-patterned Si (111)", *Thin Solid Film*, Vol.380, pp.15-19 (2000).
- 4) F. Nita and A. Pimpinelli, "When smoothening makes it rough : unhindered step-edge diffusion and the meandering instability on metal surfaces", *Physical Review Letters*, Vol.95, pp.106104-1-4 (2005).
- 5) X. Q. Shen, H. Matuhata and H. Okumura, "Reduction of the threading dislocation density in GaN films grown on vicinal sapphire (0001) substrates", *Applied Physics Letters*, Vol.86, pp.021912-1-3 (2005).
- 6) H. Pfner, V. Zielasek, C. Tegenkamp, T. Block and Z. Kallasy, "Geometrical and electronic properties of ultra thin epitaxial metal nanowires on flat and vicinal Si surfaces", *Materials Science Poland*, Vol.23, No.4, pp.861-876 (2005).
- 7) M. H. Xie, S. M. Seutter, W. K. Zhu, L. X. Zheng, H. Wu and S. Y. Tong, "Anisotropic step-flow growth and island growth of GaN(0001) by molecular beam epitaxy", *Physical Review Letters*, Vol.82, No.13, pp.2749-2752 (1999).
- 8) H. Jonsson, "Theoretical Studies of Atomic-Scale Processes Relevant to Crystal Growth", *Annual Review of Physical Chemistry*, Vol.51, pp.623-653 (2000).
- 9) M. Yamamoto, K. Kohei, A. Fujinami, S. Ogata and Y. Yoji, "Formation of Atomistic Island in Al Film Growth by Kinetic Monte Carlo", *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers A*, Vol.73, No.728, pp.490-497 (2007).
- 10) M. Yamamoto, A. Fujinami, S. Ogata and Y. Shibutani, "Hybridized atomistic modeling of migration observed on thin film surface by incident particles", *Journal of Computational Science and Technology*, Vol.1, No.1, pp.14-21 (2007).
- 11) G. Wahnstrom, "Interaction of Atoms and Molecules with Solid Surfaces", p.529 (1990) New York, Plenum Press.
- 12) G. Henkelman, B. P. Uberuaga and H. Jonsson, "A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths", *Journal of Chemical Physics*, Vol.113, No.22, pp.9901-9904 (2000).
- 13) Y. Mishin and D. Farkas, "Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations", *Physical Review B*, Vol.59, No.5, pp.3393-3407 (1999).
- 14) R. Stumpf and M. Scheffler, "Theory of self-diffusion at and growth of Al (111)", *Physical Review Letters*, Vol.72, No.2, pp.254-257 (1994).
- 15) R. L. Schwoebel, "Step Motion on Crystal Surfaces. II", *Journal of Applied Physics*, Vol.40, No.2, pp.614-618 (1969).
- 16) G. S. Bales and A. Zangwill, "Morphological instability of a terrace edge during step-flow growth", *Physical Review B*, Vol.41, No.9, pp.5500-5508 (1990).