

# 卒業研究報告

題目

高エネルギーイオン散乱法 (HEIS) における散乱確率の  
数値計算

---

指導教員

成沢 忠

---

報告者

森澤 大介

---

平成 13 年 2 月 9 日

高知工科大学 電子・光システム工学科

# 目次

## 1. 序論

- 1.1 はじめに
- 1.2 高エネルギーイオン散乱法の内容
- 1.3 論文の流れ

## 2. 高エネルギーイオン散乱法

- 2.1 高エネルギーイオン散乱法の歴史
- 2.2 物質解析の現状
- 2.3 物質解析の基礎
- 2.4 高エネルギーイオン散乱法の概略
- 2.5 高エネルギーイオン散乱法の一般的性質
- 2.6 高速イオンと物質との相互作用
- 2.7 チャネリング現象
- 2.8 二原子モデル
- 2.9 二原子モデルにおける高エネルギーイオンの散乱
- 2.10 二原子モデルにおける散乱確率の計算

## 3. C++を用いた計算プログラム

- 3.1 計算の流れ
- 3.2 計算プログラム

## 4. パラメータを振った計算

- 4.1  $\text{He}^+$  と Si 原子における散乱確率の計算
- 4.2 ランダムな値による散乱確率
- 4.3 データの考察

## 5. 結論

## 6. 謝辞

## 7. 参考文献

# 1. 序論

## 1.1 はじめに

卒業研究で高エネルギーイオン散乱法を学ぶにあたって、材料解析という今まで踏み込んだことの無い分野に踏み込み知らないことへの不安感、興味そして期待感と様々な感情が入り交じった。この高エネルギーイオン散乱法とは古くから使用されている原始的な手法である。しかし、現在においても材料解析でも基本となる手法で学ぶに値する分野である。

## 1.2 高エネルギーイオン散乱法の概念

高エネルギーイオン散乱法は様々な固体（ターゲット）の組成や構造を調べるという人類にとって非常に重要な分野である。その基本的な考え方はターゲット（固体）に直接、数百万電子ボルト（MeV）のエネルギーを照射しそれが原子に衝突（クーロン力によるイオンビームへの影響）することにより、いろいろな方向に散乱する。そして、その散乱されたイオンビームのエネルギースペクトルを調べることにより、固体の組成（元素の種類と量）や構造（元素の同定や深さの方向）をすることができる。これが高エネルギーイオン散乱法の基本的な概念である。

## 1.3 論文の流れ

この論文の流れについて説明する。この論文では第1章に高エネルギーイオン散乱法についての研究にあたるについて述べ、第2章で高エネルギーイオン散乱法について詳しく述べ、第3章で実際の計算プログラムについてプログラムの解説も交えて述べる。そして、第4章ではその計算プログラムを用いて実際にパラメータを振って数値を取り、グラフ化する。第5章でこの研究についてまとめを述べ、第6章で謝辞、第7章で参考文献を示す。

## 2. 高エネルギーイオン散乱法

### 2.1 高エネルギーイオン散乱法の歴史

高エネルギーイオン散乱法（HEIS）の歴史をひも解いてみる。この手法の歴史は古く、月面着陸に成功したアポロでも月表面の元素組成を調査すべく応用されたのは有名な話である。歴史上、原子や原子核の構造は粒子の散乱実験で得られてきたものである。つまり、現在でも高エネルギーイオン散乱法は、その基本的な理論を応用している。ラザフォード後方散乱法に代表されるように物質の非常に多くの情報を入手できる手法として幅広く利用されている手法である。

### 2.2 物質解析の現状

現在の物質解析では、一般的に物質の表面・界面やたかだか数ミクロンの厚さのごく薄い層の分析が重要視されている。腐食・摩擦・摩耗・接着あるいは破断などの多くの機械的、化学的性質が表面あるいはごく薄い表面層によって決定されると認識されているからである。さらに現在では、近年、表面・界面の重要性が増しており、それに伴って、そこに照準を当てた分析開発が行われてきている。表面層の組成と構造は、酸化や拡散などの古典的な手法の他にも、分子線エピタキシー法などによって自由にデザインし作ることが出来るようになってきているし、レーザー・電子・イオンなどのビームプロセスを用いて望むとおりにより改質することもできるようになっている。つまり、現在の物質解析においては、技術的にも精度的にもかなり高レベルの物質解析が可能になっており、その精度の高さにより物質のより奥深くまでの解析が可能になっている。このことにより、物質解析だけではなく、地質学や考古学の分野においてもさらなる地球の歴史の解明などにも非常に貢献できるのである。

いわばこの物質解析という分野は、人類がこの地球について興味を持ちそして自らの前進のため踏み出す第一歩の手段となり、それが人類の進化にも繋がっているという非常に重要な分野であり将来的にも永遠に研究されるであろう分野である。

## 2.3 物質解析の基礎

今まで原子や原子核の構造は粒子の散乱実験によって得られてきた。簡単に説明すると、素粒子（光子、電子、中性子、イオン）のビームを既知の原子、または原子核に衝突させて、散乱を計測することにより両者の相互作用を知ることが出来た。

物質の解析では、多くの分析手法は、放射線源、粒子線の種類（光子、電子、中性子、イオン）、相互作用の断面積、放出される放射線の種類、検出系などによって特徴づけられる。

固体の分析手法には色々な手法がある。図 2.1 では考えられる手法の概念を図で表してみる。

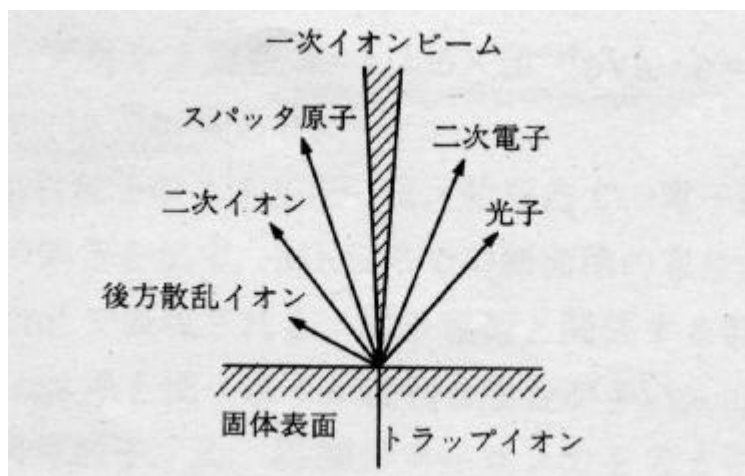


図 2.1

イオン衝撃により生成される各種信号

図 2.1 を参考に、入射粒子と放出粒子の種類で分類してみる。

a. 同種の放射線が入射と出射の場合

1. 電子（入射）, 電子（放出）の場合  
オージェ電子分光法（AES）
2. イオン（入射）, イオン（放出）の場合  
ラザフォード後方散乱法（RBS）

3. X線（入射）, X線（放出）の場合  
蛍光X線分光法（XRF）

b. 異種の放射線が入射と出射の場合

1. X線（入射）, 電子（放出）の場合  
X線光電子分光法（XPS）
2. 電子（入射）, X線（放出）の場合  
電子マイクロ分析法（EMA）
3. イオン（入射）, 資料イオン（放出）の場合  
二次イオン質量分析法（SIMS）

ターゲットに入射した粒子については、ある場合には弾性散乱され、ある場合にはターゲット原子内で電子遷移を起こさせるものである。

ターゲットの単位面積あたりの原子の個数については、入射粒子の個数（I）と相互作用が起きた回数との関係から計算できる。入射粒子と原子の相互作用の起こり易さの定量的な尺度となるのが断面積である。原子の断面積を  $\sigma$  と定義し、そのプロセスが起きる確率を P とする。このことより、

$$P = (\text{相互作用が起きた回数}) / (\text{入射粒子の個数})$$

に定義される。

入射粒子に垂直な単位面積あたりに  $N_t$  個の原子を含むターゲットに I 個の粒子が入射したとする。相互作用が起こる回数は

$$(\text{相互作用が起こる回数}) = I \cdot N_t$$

となる。ここで、I は個別に測定できる量であるから、断面積が分かっている出射粒子を計測すれば、ターゲット原子の個数、つまり組成が求められることになる。散乱された粒子や出射線のエネルギーは、ターゲット原子の種類についての情報を持っている。物質解析（分析）で得られる情報は、原子の種類・濃度・深さの方向の分布・構造などがある。

次に、散乱断面積の概念図を示してみる。

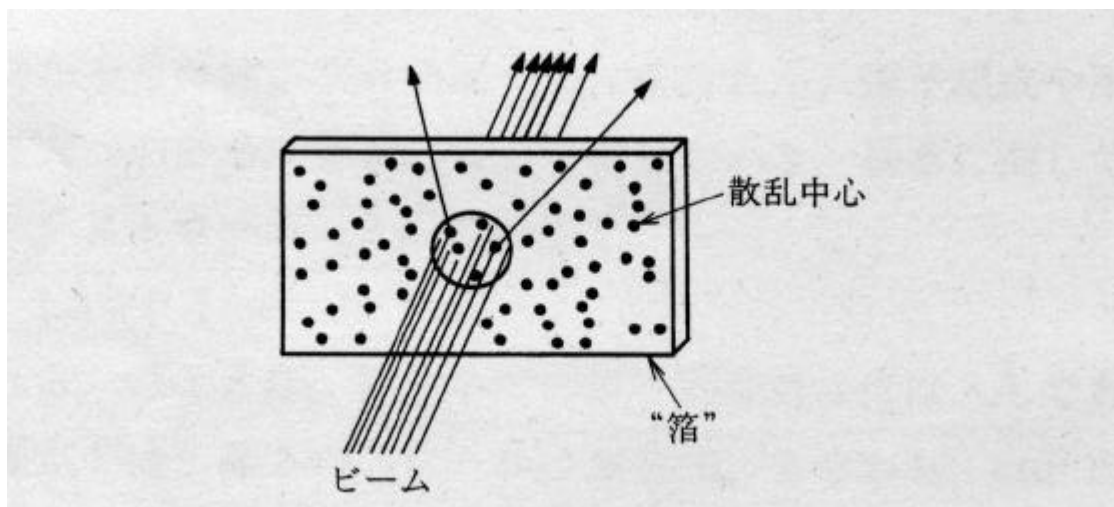


図 2.2  
散乱断面積の概念図

図 2.2 において、単位面積内に 5 個の散乱中心（原子）があって、それぞれの原子の散乱断面積が単位面積の  $1/10$  であるとするならば、入射粒子のうち  $5 \times 1/10 = 1/2$  が散乱されることになる。

## 2.4 高エネルギーイオン散乱法の概略

高エネルギーイオン散乱法とは、種々の物質（材料）解析でつかわれるものであり簡単にいうと、MeV 領域の H や He の軽イオンビームをある物質の固体表面に照射して、そのイオンビームが原子に衝突し散乱を起こした時の、エネルギー損失の量を調べることによって、表面層の組成、構造などを解析する手法である。その代表的な手法はラザフォード後方散乱法（RBS）であり、その原理を学ぶことによって、より理解し易い。

## 2.5 高エネルギーイオン散乱法の一般的性質

イオンビームについては次のように考える。MeV領域のHeイオンは $\sim 10^8$  (cm/sec)の速度をもっている。

次に固体中の原子について考える。原子は平衡点を中心に熱振動をしている。室温においての速度は $\sim 10^5$  (cm/sec)である。この二つの速度を比べるとイオンビームの速度の方が原子の熱振動速度よりはるかに速い。いわばイオンビーム側から見るとほとんど静止しているも同然である。次に実際にイオンビームを照射し固体中の原子に衝突した場合を考える。イオンビームは固体を構成している原子核と電子に衝突する。固体の構造を考えれば当然分かることである。単体の原子についていえばイオンビームと電子の衝突では大きく進路を変えられることはない。(電子の持つ運動エネルギーは数eV~数十eVの範囲であるから1MeVのイオンエネルギーに比べたら非常に小さいため。)

固体というものは、原子核と電子が多数結合して構成しているものである。ということは照射されたイオンビームは多数の原子核と電子に衝突することになる。多数の電子と衝突を繰り返すことによって、しだいにエネルギーを奪われていく。その時、たまたま原子核に接近したイオンはクーロン反発を受けて大きな角度に散乱される。なお、高エネルギーイオン散乱法において使用されているエネルギーおよび核種の範囲では、散乱は核反応や核のエネルギーレベルの励起を含まない弾性散乱である。ここまでは、高エネルギーイオン散乱法について説明してきたが、理解を深めるために高速イオンと物質との相互作用について考える。

## 2.6 高速イオンと物質との相互作用

イオンが物質中を通過する際、互いの相互作用によりイオンは散乱されることはもうすでに学んだ。次に、散乱過程について学ぶ必要がある。なぜなら、それについて学んでおかないと散乱については漠然としたものとしてしか理解できないからである。

### 1. 散乱過程

散乱過程については大きく二つに分類される。

#### a. 弾性散乱

散乱前にイオンおよび散乱体(ターゲット,物質中の原子)の持っていた全運動エネルギーが散乱後も保存される場合のことである。



b. 非弾性散乱

全運動エネルギーの一部が他のエネルギーに変わるため保存されない。たとえば、物質中原子のイオン化など、つまり電子励起にエネルギーが消費される場合

なお 一般的に、上記に示した二つの散乱過程は同時に起こる。

2. イオンの速度による場合分け

イオンビームに主眼を置いてその速度により場合分けする。

a.  $V_i > V_e$  のとき (高速イオン)

弾性散乱はほとんどなく電子励起 (非弾性散乱) が起こる。

理由: 運動するイオンと軌道電子間に生じるクーロン相互作用の時間的変化が電子励起をおこすのに十分なほど激しくなるからである。

b.  $V_i < V_e$  のとき (低速イオン)

相互作用は十分ゆっくりとしか変化しないので電子励起は無視できる (断熱近似が成立する) ため、ほとんど弾性散乱のみが起こり得る。

理由: イオンのスピードが遅いとそれだけ相互作用の時間的変化が電子励起を起こすには不十分であるからである。

一般に  $V_e$  は  $10^8$  (cm/sec) である。なお、これは光速の  $1/100$  程

度の速度である。  $V_i$  がこのオーダーになるためには、イオンの原子量を  $N$  とすると、そ

の運動エネルギー $E_i$ は $N$  ( k e V ) 程度であるということが分かる。

上で示したエネルギー以上になればこのイオンは電子励起 ( 原子のイオン化 ) を起こ

しうる。したがって、物質構成原子のイオン化による非弾性散乱を誘起しうる最小のイオンエネルギーを  $E_I$  とすると、

$$E_I = N ( k e V )$$

という関係式が出てくる。

上記の関係式は、多くの物質において係数 2 以内で成立する。

例.

$H^+$  と  $Cu^+$  の場合 :  $H^+$  と  $Cu^+$  のエネルギーがそれぞれ 1 k e V および 6 5 k e V より大きくなれば、これらのイオンは物質内を進行する際に、その通路近くの原子 ( または分子 ) のイオン化などの励起現象を誘起する。

### 3. 原子にイオンが衝突したときの概念

今まで述べてきたことには、原子核の周りに存在する電子の存在を無視してきたが、それほど問題ないことである。なぜなら、これらの電子のもつ運動エネルギーは数 eV から数 eV の範囲にあり、1 MeV のイオンエネルギーに比べれば十分小さく、そのうえ質量はイオンに比べて数千倍以上も小さい。したがって、これらの電子により高速イオンが散乱され、イオンの運動方向が変化することはいえない。また、前述のごとくラザフォード ( 広角 ) 散乱がおこるのは、 $b \sim 10^{-3}$  程度に両原子核が接近しなければならぬから、その場合、これら電子が原子核間に働くクーロン反発力を弱める ( 遮へい ) することはない。

電子と原子核との距離はイオンが原子に近づきうる最短の距離より 23 桁は大きいからである。つまり、これらの電子は、ラザフォード「散乱には何も寄与せず、非弾性散乱に寄与するだけである。

そこで、高速イオンが固体物質中に一様に降り注ぐ場合、これらイオンからみれば、物質はきわめて希薄に小さな (  $\sim 10^{-4}$  ) 原子核が点々と、互いに遠く離れて ( 数 ) 散在している大きな空間である。そして、これらイオンのごく一部 ( 計算すれば数百万分の一以下であることが分かる ) が、たまたま原子核のごく近くを通る場合にのみ広角散乱が起こるが、大部分のイオンは散乱されずに物質内を直進する。また高速イオンの通路に存在する電子群は、ここの過程としては小さいが、集積してこのイオンに対してのブレーキの役目を果たす。ここで、一般的な散乱の模式図を示す。

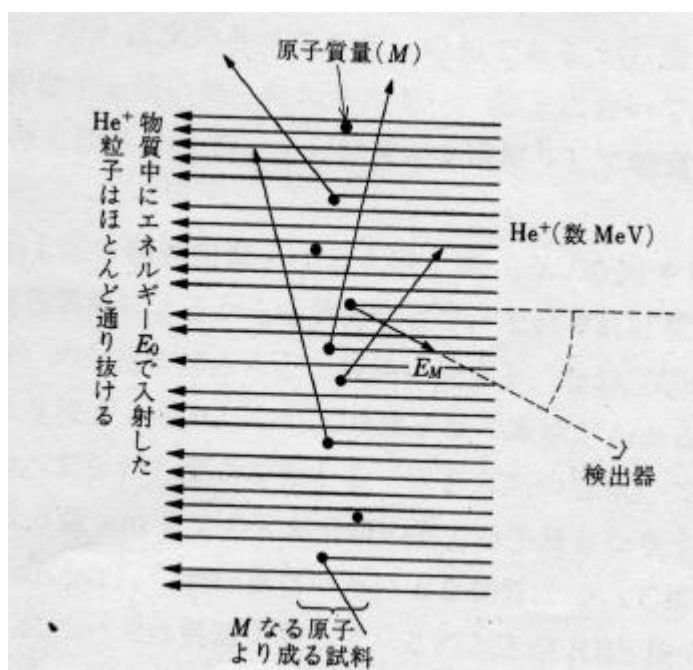


図 2.3

ある固体にイオンビームを入射したときの一般的模式図

図 2.3 は RBS 法に用いられる高速イオン (He<sup>+</sup>) は標的物質中で非常に小さな確率で広角散乱を受けるが、大体の場合、前方 (小角) 散乱される。なお、広角散乱に寄与する原子核のみを示す。

### 3. 阻止能

#### a. 電子阻止能

電子によるブレーキ作用の強さは、イオンが物質中を  $dx$  進むと  $dE$  のエネルギーを失う (単位長さあたり失うエネルギーの量) として  $(dE/dx)_e$  で表される。

#### b. 原子核阻止能

イオンはもちろん、原子核との衝突による弾性散乱でもエネルギーを失う (単位長さあたり失うエネルギーの量) ので、この効果を  $(dE/dx)_n$  に対して  $(dE/dx)_n$  で表される。

図 2.4 に阻止能とイオン速度を定性的に描く。

なお、RBS 法に用いられるイオン速度は、図 2.4 での (a) が高速イオンに対応する。高速イオンのエネルギー損失の原因は出んしによる阻止現象（非弾性散乱）が圧倒的で、原子核によるもの（弾性散乱）は非常に少ないことが分かる。

以上のことにより、高速イオンの弾性散乱の確率は非常に小さいことが分かる。なお、この散乱イオンは相手の原子核にエネルギーを与え、自身は減速される。

## 2.7 チャネリング現象

### 1. チャネル

下の図 2.4 (a) について説明する。(a) は、 $\langle 110 \rangle$  結晶軸方向からダイヤモンド結晶を見たもので、黒い柱みたいなものが原子核の柱（原子列）である。その柱と柱の間に見える空間がチャネルである。個のような穴は、結晶軸方向ばかりではなく結晶面から見たときにもみられる。原子核のまわりには、電子の大部分（内殻電子）集中し、その範囲はほぼ、ボーア半径 ( $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ ) 程度で、結晶のチャネルの中は外殻電子が、価電子あるいは、伝導電子として分布しているだけである。

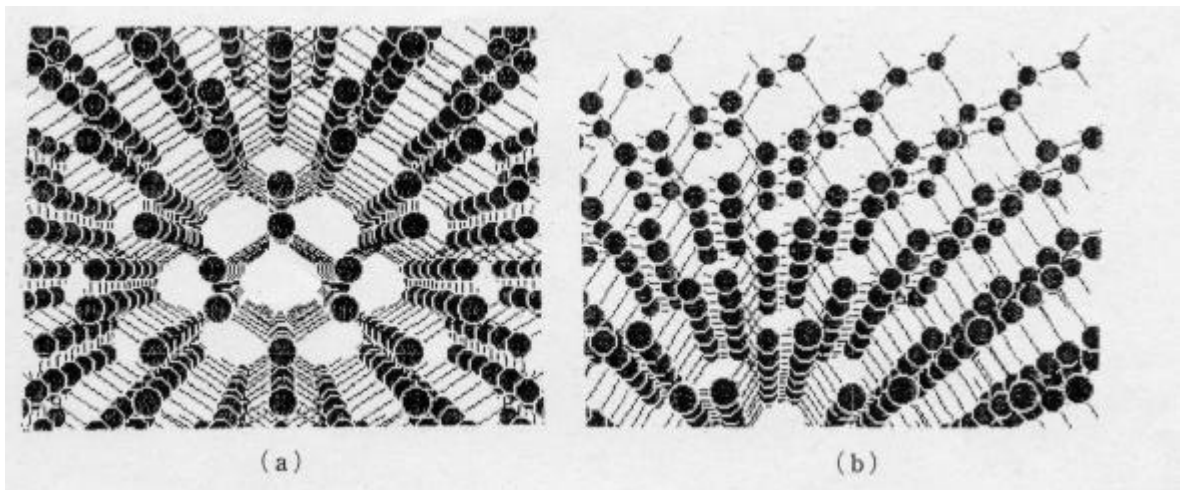


図 2.4

ダイヤモンド型結晶の原子配列

(a)  $\langle 110 \rangle$  方向から見たもので、チャネルが見られる。

(b)  $\langle 110 \rangle$  方向から約  $10^\circ$  ずれた方向から見たもの (random 方向)。チャネルがなくなる。

## 2. チャンネル内でのイオン

ここで、結晶のチャンネル方向にほぼ平行に高速の正の荷電粒子、例えば 1MeV のエネルギーをもった陽子（速度  $v = 1.35 \times 10^7 \text{m/sec}$ ）が入射すると、図 2.5 に示されるように、ごく一部の粒子は B のように表面原子と衝突し、入射方向に対して大きな角度で散乱されるが、大部分の粒子は A のように、電子密度の小さいチャンネルの中を結晶原子と近接衝突することなく、また平行に入射したビームは、結晶通過によりほとんどビームの広がりが大きくなることなく進行していく。結晶チャンネル中を進行するイオンをチャンネル粒子という。

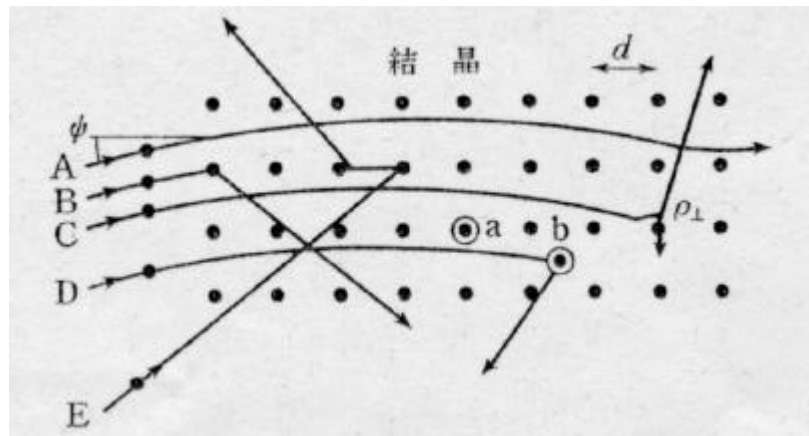


図 2.5

チャンネルリング・ブロッキング

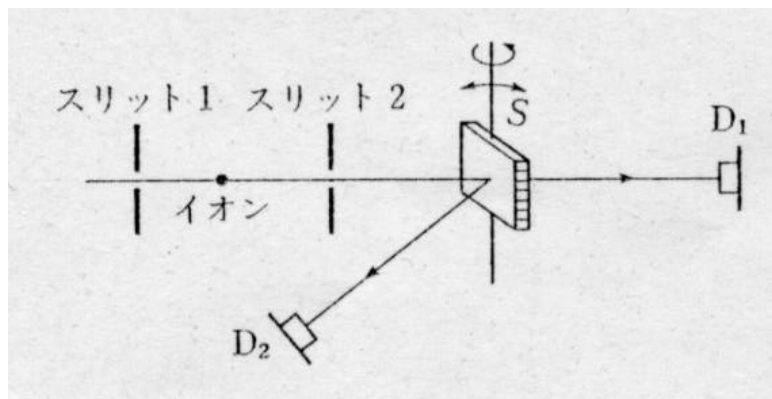
## 3. aligned 方向と random 方向

イオンビームを結晶軸方向に入射させ散乱収量が最も減少した場合の方向を aligned 方向といい、結晶軸から傾け収量が増加し、飽和して落ち着く方向を random 方向という。

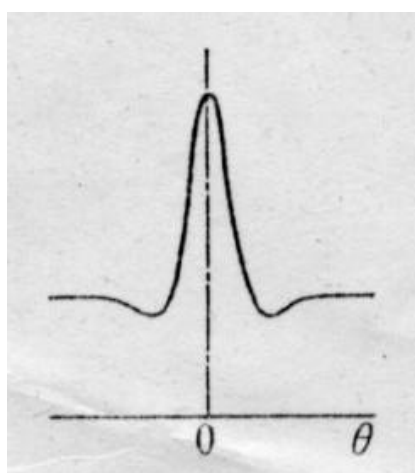
## 4. チャンネリング効果測定

図 2.6 の (a) のように、薄い結晶版 S をゴニオメーターに置き、平行度のよいイオンビームを結晶に照射し、通過したイオンを検出器  $D_1$ 、入射面から反射してきたイオンを検出器  $D_2$  で検出する。結晶をある結晶軸のまわりに回転させると入射方向が結晶軸と一致したところ ( $\theta = 0$ ) で、検出器  $D_1$  では、 $I_{\text{chan}}$  が大きい場合 (random

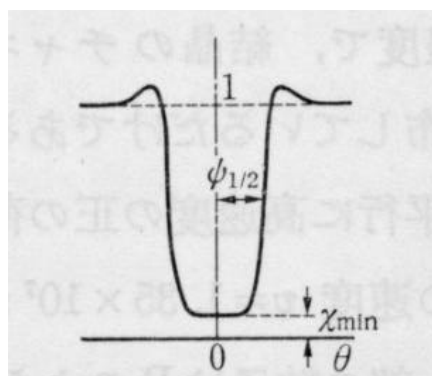
入射)に比べて強度が非常に大きくなり、検出器  $D_2$  では著しく減少する。この結果により、イオンビームが結晶軸もしくは面に平行に入射したとき、結晶チャンネルの中を図 2.5A のチャンネル粒子のように通過していくということが分かる。



(a)



(b)



(c)

図 2.6

## 5. チャネリング効果によるチャネル粒子のエネルギー損失

チャネリング効果が起こると、チャネル粒子は電子密度が小さいチャネルの中を進むため、ランダム方向に入射した場合に比べてイオンのエネルギー損失が小さい。例をあげる。

例.  $\text{He}^+$ , Si 原子の場合

ヘリウムイオンのシリコン結晶の  $\langle 110 \rangle$  軸、(111) 面チャネリングの場合のエネルギー損失は、ランダム方向に入射した場合の半分であり、重い結晶の大きなチャネルの方向に入射したときのエネルギー損失はランダム入射の 30% にすぎない場合もある。

## 6. ブロッキング現象

正の荷電粒子が、結晶の格子点上の原子から結晶軸あるいは面の方向に放出されるか、あるいはランダム方向から入射したイオンが原子により軸や面の方向に散乱されると、その方向には図 2.5 の E の粒子に見られるように、すぐ隣に原子があり、粒子はその原子によって散乱される。したがって、このような荷電粒子は結晶軸および面の方向には進行できない。

過去に行われた実験で出てきた結果について図 2.6 を参照に述べる。一定のエネルギーをもった荷電粒子がすべての方向に一樣な強度で格子点原子から放出あるいは散乱されると、結晶軸および面方向を中心に図 2.6 (c) と同じような角度分布を示す。ここで粒子検出器の変わりに写真フィルムを置くと、結晶の軸や面の方向に散乱強度が弱い点や線による像が現れる。

このようにブロッキング現象とは、固体にランダム方向からイオンビームを入射すると結晶軸および面の方向に進行しようとしても、原子などが邪魔して進行できないという現象のことをブロッキング現象という。

## 6. チャネリング現象

単結晶にイオンビームを原子の結合方向に平行に入射したとき、チャネル内の周りの原子と小角散乱を繰り返しながら、結晶中に深く侵入してその結果、広角散乱の確率が低下する現象のことである。

## 7. チャネリング現象における臨界角と最小値

臨界角とは、入射粒子が連続近似の条件を満たす最大の角（これ以上傾けなければ連続近似を満たさなくなる角度）である。結晶チャンネルの中央で、そのチャンネルに平行な原子番号  $Z_2$  の原子の原子列に対し小さな  $\theta$  の角度で  $E$  のエネルギーをもった原子番号  $Z_1$  のイオンが原子列に接近していくとき、粒子がチャネリング状態にあるならば、個々の原子と順次衝突してその軌道を曲げ、原子列から離れていき原子列を横切るようなことはあり得ない。

この場合の軌道は、むしろ原子列を一つの平均ポテンシャルから受ける力によって決められる。 $\theta$  が大きくなり、ある臨界角  $\theta_c$  を超えると、粒子は原子列で反射されることなく横切ることになる。そして、粒子は原子と近接衝突することになり、その軌道は連続ポテンシャルで述べるが出来なくなる。このことを踏まえて臨界角を求める式を導く。

(a) 臨界角  $\theta_c$

$\theta_c$  を粒子との衝突ポテンシャル  $V(r)$  である原子の原子列の連続ポテンシャル  $U(\theta)$  は、

$$U(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{z^2 + d^2 \sin^2 \theta}) dz \quad (2 \cdot 1)$$

として、 $\theta_c$  =  $\theta_{TF}$  付近でトーマスフェルミポテンシャルのよい近似である

$$U(\theta) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \ln \left[ \left( \frac{C \theta_{TF}}{\theta} \right)^2 + 1 \right] \quad (2 \cdot 2)$$

を用いて

$$E > E_c = \frac{2 Z_1 Z_2 e^2}{d} \quad (2 \cdot 3)$$

では

$$\theta_c \sim \theta_1 = \left( \frac{2 Z_1 Z_2 e^2}{Ed} \right)^{1/2}$$

また

$$E < E_c$$



では

$$r_c \sim (C a_{TF} / E)^{1/2} d \quad (2 \cdot 5)$$

となる。

ここでCはほぼ  $3^{1/2}$  に等しい定数である。シリコンの  $\langle 110 \rangle$  軸について陽子の場合、Eの値は約 40KeV である。

このように決められた  $r_c$  は、チャンネル粒子がもつ運動エネルギーの原子列に対して垂直な方向の成分が  $E \sin^2 \theta$  以下であることを示している。原子列からの距離を、原子列に対して  $\theta$  の角で進んでいるチャンネル粒子の進行方向のエネルギー  $E_1$  (横方向のエネルギー) は、ポテンシャルエネルギー  $U(r)$  と、その方向の運動エネルギー成分  $E \cos^2 \theta$  の和は

$$E \cos^2 \theta = U(r) + E \sin^2 \theta \quad (2 \cdot 6)$$

であり、一つのチャンネル粒子については  $E \cos^2 \theta$  は一定である。したがって  $E \sin^2 \theta = E - E \cos^2 \theta$  である粒子の原子列への最接近距離  $r_c$  は  $U(r_c) = E - E \cos^2 \theta$  で与えられる。 $r_c = r_1$  のとき  $r_c$  の大きさは、式 (2・2) から  $r_c \sim a_{TF}$  である。

面チャネリングの場合は、式 (2・1) に対応する連続ポテンシャルは

$$U_p(r) = 2 N d_p Z_1 Z_2 e^2 [ (r^2 + C^2 a_{TF}^2)^{-1/2} - 1 ] \quad (2 \cdot 7)$$

で、ここで N は結晶中の原子密度、 $d_p$  は原子面の間隔である。前と同じように原子面への最近接距離  $r_c$  がほぼ  $a_{TF}$  であることから、臨界角  $\theta_p$  は

$$\theta_p = (2 N d_p Z_1 Z_2 e^2 a_{TF} / E)^{1/2} \quad (2 \cdot 8)$$

で与えられる。

#### (b) 臨界角 $\theta_p$ と半値角 $\theta_{1/2}$ の関係

イオン束が結晶ノチャンネルに入射するとき、チャンネルのどの部分から入射したかによって E の値は個々のイオンについて異なる。これらイオンの半数がチャンネル粒子となるような入射角が  $\theta_{1/2}$  と考える。 $\theta_{1/2}$  を求めるには、チャネリングディップと同等であるプロッキングディップを計算して求める。

図 2.7 のモデルで考える。

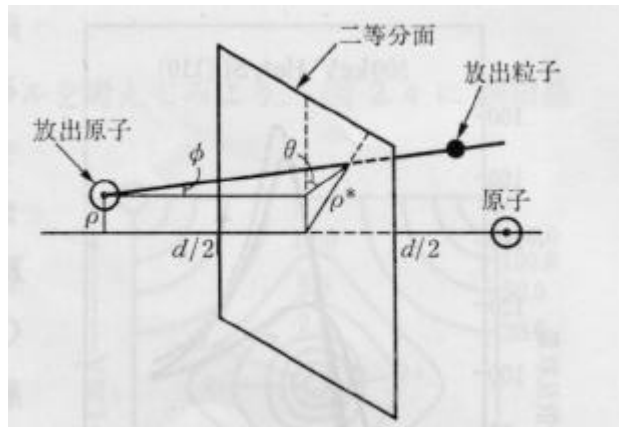


図 2.7

二等分面法によるブロッキングディップ計算法

原子列から格子の熱振動により だけ離れた原子 A から粒子が原子列に対して の角度で放出されたとする。粒子は隣の原子との中間面まで直線で進み、中間面からは式 ( 2 ・ 6 ) の原子列のポテンシャルの場を進もうとする。このとき、この粒子のもつ横向きエネルギー E は

$$E = E^2 + U( \ast ) \quad ( 2 \cdot 9 )$$

である。 は

$$R( ) = ( 2 / \quad ) \exp( - \quad / \quad ) \quad ( 2 \cdot 10 )$$

のようなガウス分布をしているとして、原子列から遠く離れていくときの原子列に対する角 分布を図 2.8 の角 と についての平均をとって求める。ここで、 は格子の熱振動の二次元振幅で一次元振幅 0 の 2<sup>1/2</sup> 倍である。以上より 1/2 と 1 との比は

$$= 1/2 / \quad 1 \quad ( 2 \cdot 11 )$$

は格子の熱振動の振幅 Z<sub>1</sub>, Z<sub>2</sub> 等により変化するが、ほぼ 0.8 ~ 1.5 程度の値をもつ。したがって、実際問題として 1/2 ほぼ 1 と等しいとみなしてもよい。

8. ディチャネリング

今までは、結晶の原子は静止しており、チャンネル粒子はその横向きエネルギー E が不変で常にチャネリング状態にあると考えてきた。しかし実際には、チャンネル粒子は結晶チャンネル中の電子と衝突を繰り返し、特にチャンネル粒子が原子列や原子

面に接近したとき、図 2.6C の粒子のように結晶原子の熱振動のため横に力を受ける。そして  $E$  が、7 で述べたチャネリングの臨界の横向きエネルギー  $E_c$  を超えると、チャネル粒子はランダム粒子となる。このようにして結晶表面から深く侵入するに従ってチャネル粒子の数が減少していく。このような現象をディチャネリングという。

#### 9. スパッタリングにおけるチャネリング効果

スパッタリングとは、標的固体が単結晶でイオンの入射方向がチャネリング方向であるとき、イオンを固体に照射し固体構成原子が固体外に飛び出す現象のことをいう。

スパッタリングによる固体原子の入射イオン 1 個あたりの収量が減少する。

イオンをさらに長時間照射するとき、照射前は平面であったものが針状の山の集まりのような凹凸の激しいものになる。注目すべきことは針の先端の角度は入射イオンのその結晶軸のチャネリング臨界角にほぼ等しいということである。

#### 10. 表面チャネリング

これまでに述べてきたチャネリング現象は、入射イオンの結晶の軸もしくは面に沿って結晶内部へと深厚したときに現れる諸現象であった。結晶表面が低指数の結晶面に平行で、イオンビームが表面に平行な結晶軸に平行にその結晶軸に対するチャネリングの臨界角より小さい角度  $\theta$  で表面にすれすれに入射したとき、散乱角  $2\theta$ 、すなわち結晶表面が鏡面とかがえたときとおなじように鏡面反射の方向に非常に強いスポットが観測される。

この場合、鏡面反射スポットのまわりに現れるブロッキング像から、イオンは結晶表面からせいぜい内部へ二ないし三原子層しか侵入しておらず、大部分は表面の第一原子層の結晶チャネルを通過し、外部に散乱している。これは表面チャネリングと呼ばれ、鏡面反射スポットは表面状態により敏感に変化する。またそのまわりのブロッキング像を解析することによって表面第一原子層と、第二原子層との相対的な原子の配列等に関する情報が得られる。

#### 11. チャネリング効果の応用

チャネリング条件において後方散乱を行うことは、表面ピークの大きさを知ることができる。この瀬質の応用により表面構造のいろいろなことが分かる。それを下に述べる。

(a) 表面ピークの大きさ

結晶表面の原子配列は一般には固体内部における原子配列と異なっている。最も基本表面原子配列の固体内部の原子配列からのずれは、表面緩和および表面再配列である。図 2. に示すように、前者は表面にたいして垂直な原子のずれであり後者は表面に対して平行な原子である。表面緩和、表面再配列ともに、必ずしも表面第一層も原子のみがずれているわけではなく、その影響はいくらか固体内部におよんでいる。

(b) 表面ピークの依存性

表面ピークの大きさの絶対値のみでなく、その角度依存性を求めることにより、表面緩和や表面再配列のおおきさを求めることができる。

## 2.8 二原子モデル ( 2 atom · model )

チャネリング条件下でのある固体の表面にイオンビームを照射しその散乱のエネルギースペクトルを計測するのが物質解析である。しかし、普通の固体の場合を考えると、物質というものは、原子同士が多数結合しておりそれに、イオンビームを入射した場合について考えると非常に複雑な散乱が生じるため、この卒業論文においては一番単純な原子を結晶軸に 2 つ並べた場合についてのイオンビームの散乱確率について考えることにする。下に二原子の模式図を示す。

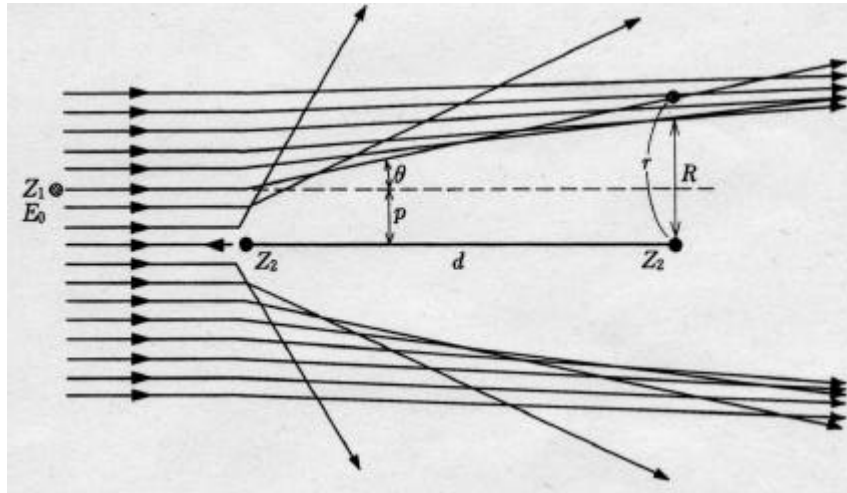


図 2.8

2 個の原子が並ぶ方向に平行にイオンビームが入射したときの散乱模式図

図 1 . 4 に示したものが、この卒業論文において考えるモデルである。この二原子モデルにイオンビームを照射した場合についての散乱確率についての研究が目的である。

まず、二原子モデルとは、ある距離  $d$  だけ離れて結合している二つの原子に、結合方向に平行にイオンビームを入射する。第 1 原子と第 2 原子についてイオンビームの衝突する確率をそれぞれ考える。なお、この衝突という表現だがこれは説明を簡単にするために使っているのだが、実際の意味は原子にイオンビームが近づいてきたとき原子核間で働くクーロン力によって反発されイオンビームの方向を変えてしまうという意味であり、決して直接原子に衝突するわけではない。このことに注意してほしい。

## 2.9 二原子モデルにおける高エネルギーイオンの散乱

1.8 で示したようなモデルに具体的な使用する原子、イオンビームについて述べる。

原子：Si 原子

イオン：He<sup>+</sup> (ヘリウムイオンビーム)

単純に言うなら以上の 2 つを用いて考える。まず、二原子モデルとは、ある距離  $d$  だけ離れて結合している二つの原子に、結合方向に平行にイオンビームを入射する。第 1 原子と第 2 原子についてイオンビームが衝突する場合についてそれぞれ考える。以下にそれについて説明する。

まず上図に示したモデルにヘリウムイオンビームを照射する。第一原子は熱振動をしている。すると第一原子は熱振動しているのであるから、当然第一原子の位置とイオンビームの速度によりヘリウムイオンビームが第一原子に衝突する場合と衝突しない場合がでてくる。第二原子についても同じようなことが言える。

しかし、この卒業研究においては、第一原子による散乱の確率を 1 と規格化し、第二原子でヘリウムイオンビームが散乱する確率を考える。なお、第一原子と第二原子にヘリウムイオンビームが衝突するとき、それぞれいくつかの場合について考えられる。

#### 1. 第一原子の場合

図 2.4 に示した一個目の原子に衝突する場合を考える。

##### a. イオンビームが後方散乱する場合

ヘリウムイオンビームが第一原子に衝突するときに、その衝突位置が第一原子の水平方向に平行な中心軸に衝突する場合。このときは、ヘリウムイオンビームが入射してきた方向に  $180^\circ$  方向転換してヘリウムイオンビームが出射していく。つまり第一原子において起こる後方散乱は第二原子においての散乱に寄与しないため確率的にみて散乱確率は非常に低くなる。

##### b. 広角散乱の場合

ヘリウムイオンビームが第二原子の中心軸からそれた位置に衝突した場合。このときは、ヘリウムイオンビームはその衝突位置によって様々な方向に散乱していく。散乱方向の条件分けで広角散乱のときは、ヘリウムイオンビームが第一原子に衝突したとき、入射方向へ  $180^\circ$  より小さい角度で散乱されたら第二原子には寄与しない。しかし、第二原子方向へ散乱された場合はそれに寄与する可能性が出てくる。

##### c. 小角散乱する場合

広角散乱の場合で述べたように、散乱方向の条件で小角散乱のときは、第二原子の熱振動の振幅が決まっているため、広角散乱のときよりも第

二原子に寄与する可能性が高い。

## 2. 第二原子の場合

上で示したように第一原子の散乱のパターンによって第二原子にヘリウムイオンビームが衝突するかもしれないが決まる。そして、第二原子における散乱は下に示した場合である。

### a. 後方散乱の場合

ヘリウムイオンビームの入射方向へ散乱する。

d

### b. 広角散乱する場合

二原子モデルでなく、多数の原子の場合では、第一原子の広角散乱で述べてきたように、第三原子に衝突する可能性がでてくる。しかし二原子モデルなのでここでは考えない。

### c. 小角散乱の場合

広角散乱の場合と同じ考えである。

## 2.10 二原子モデルにおける散乱確率の計算

二原子モデルにおけるイオンビームの散乱の仕組みは理解できた。次に、実際の散乱確率の計算方法について述べる。図 2.5 を参考に考える。

図 2.5 における、記号について説明する。

$Z_1$  : ヘリウムイオンビーム

$Z_2$  : 2 個のシリコン原子

$d$  : 2 個のシリコン原子間の距離[ ]

$\theta$  : ヘリウムイオンビームの散乱角度

$R$  : シャドーコーン半径[ ]

$E_0$  : ヘリウムイオンビームのエネルギー[eV]

$p$  : 衝突パラメータ[ ]

$r$  : シリコン第二原子の熱振動振幅[ ]

距離  $d$  だけ離れて結合している 2 個のシリコン原子  $Z_2$  に、結合方向に平行に、ヘリウムイオンビーム  $Z_1$  がエネルギー  $E_0$  をもって入射したとする。第一原子と正面衝突したイオンは後方に跳ね返され、衝突パラメータ  $p$  が大きいと散乱角  $\theta$  は小さいから、第一原子の後ろ側にはイオンビームの入り込めない領域が生じる。光と影のアナロジーからこの領域はシャドーコーン (shadow cone) と呼ばれている。コーンというのは形が円錐状だからである。

衝突パラメータ  $p$  で入射してきたイオンの第一原子による散乱角はラザフォード散乱の式より、

$$\tan(\theta/2) = \frac{1}{2} \frac{(Z_1 Z_2 e^2)}{(2 E_0 p)} \quad (2 \cdot 11)$$

$e$ : 電荷

$\theta$  は小さい角とする。

で与えられる。このとき、図 2.5 に示したイオンビームと第二原子との距離  $r$  は、

$$r = p + d \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = p + \frac{(Z_1 Z_2 e^2 d)}{(E_0 p)} \quad (2 \cdot 12)$$

となる。 $r$  の最小を与える  $p$  の値は、 $dr/dp = 0$  より

$$p = (Z_1 Z_2 e^2 d / E_0)^{1/2}$$

と求められる。このときの  $r$  の最小値  $R$  は、

$$R = 2 (Z_1 Z_2 e^2 d / E_0) \quad (2 \cdot 13)$$

となる。この  $R$  (シャドーコーン半径) は、 $E_0 \sim \text{MeV}$ 、 $d \sim 10^{-10} \text{ m}$  に対しては、 $R \sim 0.1 \text{ nm}$  程度となる。

ヘリウムイオンビームは一様な密度をもって入射してくるが、第一原子によって散乱を受けたあとではある分布をもつようになる。第二原子での分布  $f(r)$  は、

$$f(r) 2\pi r dr = f(p) 2\pi p dp$$

の粒子数保存の関係より、



$$\begin{aligned}
 f(r) &= 0, & r < R \\
 &= (1/2) \{ [1 - (R^2/r^2)]^{1/2} + [1 - (R^2/r^2)]^{-1/2} \} & r > R
 \end{aligned}
 \tag{2.14}$$

と求められる。f(p) は入射フラックス分布で1を規格化している。r と p との関係と f(r) と r の関係を図 2.6 に示す。

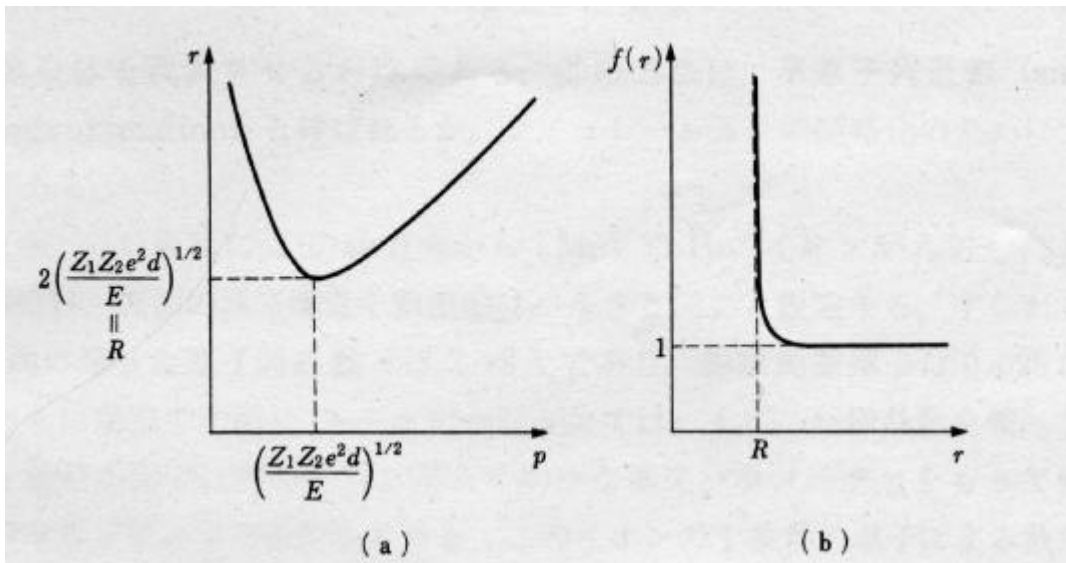


図 2.9

### イオンビームの分布

- (a) 衝突パラメータ (p) と散乱イオン - 第二原子間の距離 (r) の関係
- (b) r の関数として描いたイオンビームのフラックス分布 (f(r))

r = R において f(r) が急激に大きくなる。この現象をフラックスピーキング (flux peaking) という。

二原子モデルでのイオンの広角散乱の確率を求める。第一原子は散乱断面積のいかんにかかわらず、必ず散乱に寄与するのは明らかであるから、その確率を1とする。原子が完全に静止していれば、図 2.5 のように、第二原子の近くにはイオンはこないで、それによる散乱確率は0であるが、原子は熱振動するので単純には考えることは出来ない。熱振動による原子の位置の分布が単純なガウス型であるとする、原子の平衡位置からの距離を r とし、r ~ (r + dr) に原子が存在する確率 dP(r) は、

$$dP(r) = \exp(-r^2/a^2) \cdot 2r dr / a^2 \quad (2 \cdot 15)$$

$a$  : 熱振動の振幅[ ]

である。イオンの散乱確率はこの原子の散乱確率とフラックス分布  $f(r)$  の重なり  
の積分として計算できる。すなわち、

$$\begin{aligned} I &= I_1 + I_2 \\ &= \int f(p) dP(p) + \int f(r) dP(r) \\ &= 1 + \left\{ 1 + R^2 / (2a^2) \right\} \cdot \exp\left\{ -R^2 / (2a^2) \right\} \end{aligned} \quad (2 \cdot 16)$$

$I_1$  : 第一原子の寄与

$I_2$  : 第二原子の寄与

である。この式を見ると、イオンビームと結晶のパラメータは  $R/a$  というひとつのパ  
ラメータとして散乱確率(強度)  $I$  を決定している。 $I$  と  $R/a$  の普遍的な関係を図 2.7  
に示す。

$R/a$  の値によっては、 $I$  は 1 よりもかなり大きく 2 に近づくことになることもある。

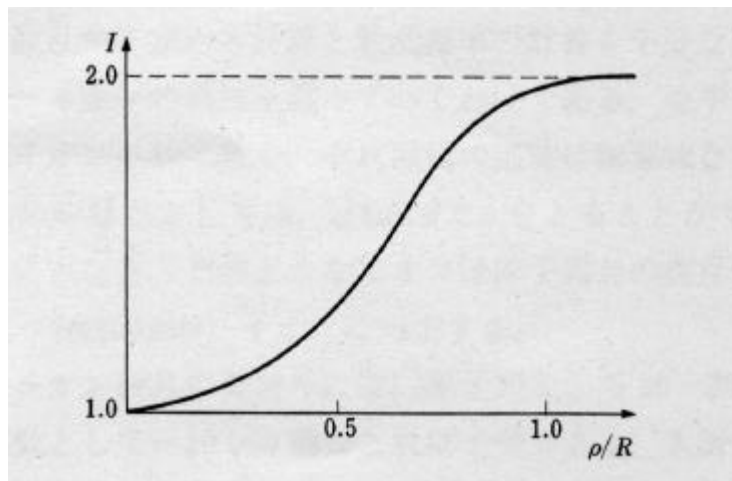


図 2.10

$I$  (散乱確率) と  $R/a$  (イオンビームと結晶のパラメータ)

上で述べたことが一般的な二原子モデルにおける、原子とイオンビームを用いた散乱  
確率の計算である。

## 3. C++を用いた計算プログラム

### 3.1 計算の流れ

高エネルギーイオン散乱法の二原子モデルにおける散乱確率を求める。そのときに使った計算式について述べる。

#### 1. シャドーコーン半径

シリコン原子とヘリウムイオンビームを使う場合、

$$R = 2 ( Z_1 Z_2 e^2 d / E_0 )^{1/2}$$

より、シャドーコーン半径を求める。このときの定数は

$Z_1$  : 2 (ヘリウム原子番号)

$Z_2$  : 14 (シリコン原子)

$E_0$  :  $10^6$  [eV] (ヘリウムイオンビームのエネルギー)

$e^2$  : 14.4 [eV ] (電荷)

$d$  : 2 個のシリコン原子間の距離[ ]

以上のように、原子間距離  $d$  以外は既知の数なので  $d$  を変化させることによりシャドーコーン半径  $R$  が求まる。

#### 2. 散乱確率

$$\begin{aligned} I &= I_1 + I_2 \\ &= f(p)dP(p) + f(r)dP(r) \\ &= 1 + \{ 1 + R^2 / ( 2 \quad ) \} \cdot \exp \{ - R^2 / ( 2 \quad ) \} \end{aligned}$$

$R$  : シャドーコーン半径 [ ]

: 0.078[ ] (熱振動振幅)

は Si 原子の室温における熱振動振幅の値である。

#### 3. プログラムのフローチャート

この二式を用いての計算プログラムのフローチャートを示す。

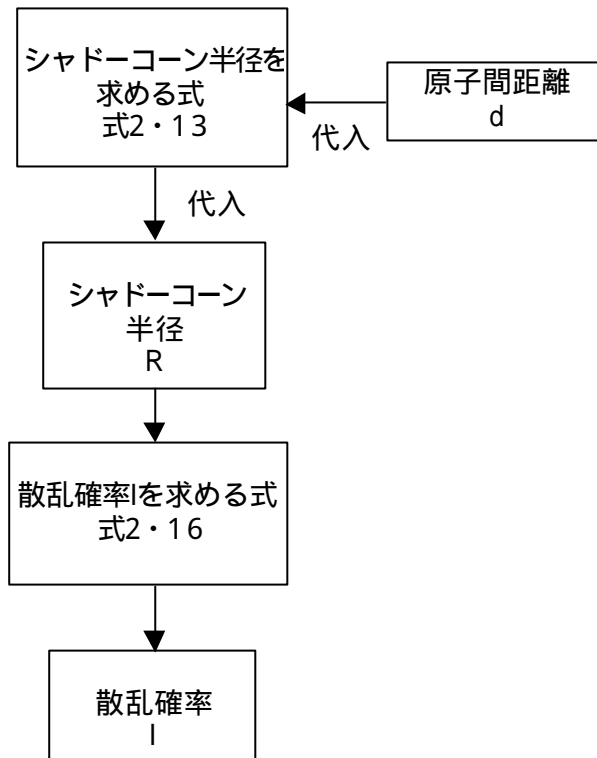


表 1 . 計算過程のフローチャート

## 3.2 計算プログラム

実際に C++ でつくったプログラムのソースコードを示す。

```
#include<iostream.h>
#include<math.h>

int main()
{
    double d,x,y,p,x1,y1;

    cout<<"シャドーコーン半径を求めます。"<<endl;
    cout<<"R=2(Z1*Z2*e^2*d/E)^1/2"<<endl;
    cout<<"上の式に距離 d を代入して下さい。"<<endl;
    cout<<"d=?";
    cin>>d;

    x=((2*14*14.4*d)/pow(10,6));
    y=2*pow(x,0.5);

    cout<<"シャドーコーン半径 R = "<<y<<"です。"<<endl;
    cout<<"次に、散乱確率を求めます。"<<endl;
    cout<<"I = 1+{1+R^2/(2?^2)}*exp{-R^2/(2?^2)}"<<endl;
    cout<<"上の式に R と  を代入して下さい。"<<endl;
    cout<<"?=?"";
    cin>>p;

    x1=-pow(y,2)/(2*pow(p,2));
    y1=1+(1+(pow(y,2)/2*pow(p,2)))*pow(2.718,x1);

    cout<<"散乱確率 I = "<<y1<<"です。"<<endl;
    return 0;
}
```

## 1. ソースコードの説明

まず、関数 pow をプログラム中で使用するためヘッダファイル<math.h>をインクルードする。このプログラムは main 関数のみで構成されており、変数の宣言として double 型変数 d,x,y,p,x1,y1 を宣言する。次に、cout を使いシャドーコーン半径を求める式を表示させ、cin で d に値を入力させる。そして、

$$x = Z_1 Z_2 e^2 d \quad \dots (1)$$

式(1)を求めさせ、

$$y = 2 (Z_1 Z_2 e^2 d / E_0)^{1/2} \quad \dots (2)$$

式(2)に x の値を代入して、シャドーコーン半径を求める。

次に、cout を使い散乱確率を求めさせる式を表示させ、cin で  $\theta$  に値を入力させる。そして、

$$x1 = R^2 / (2 \sin^2 \theta) \quad \dots (3)$$

式(3)を求めさせ、

$$y1 = 1 + \{ 1 + R^2 / (2 \sin^2 \theta) \} \cdot \exp \{ -R^2 / (2 \sin^2 \theta) \} \quad \dots (4)$$

式(4)に x1 の値を代入して、散乱確率を求める。

このような流れで計算する。

## 4. パラメータを振った計算

### 4.1 He<sup>+</sup> と Si 原子における散乱確率の計算

2.10 で述べてきたことは、あくまでも一般的なことである。それを基本とし、実際にこの研究で用いる He イオンビームと Si 原子を使った場合について先に述べた計算プログラムで計算する。

#### 1. 三方向についてのシャドーコーン半径

三方向とは<100>,<110>,<111>方向のことであり、それぞれ原子間距離 d は 5.43 Å, 3.84 Å, 1.36 Å の距離でありそれを (2 · 1/3) 式に代入することによって次のような結果がでた。

(a) <100>方向の場合

$$d = 5.43$$

$$R = 0.093$$

(b)  $\langle 110 \rangle$ 方向の場合

$$d = 3.84$$

$$R = 0.078$$

(c)  $\langle 111 \rangle$ 方向の場合

$$d = 1.36$$

$$R = 0.046$$

## 2. 三方向についての散乱確率

(a)  $\langle 100 \rangle$ 方向の場合

$$I = 1.493$$

(b)  $\langle 110 \rangle$  方向の場合

$$I = 1.606$$

(c)  $\langle 111 \rangle$ 方向の場合

$$I = 1.840$$

この三方向においての原子間距離  $d$  とシャドーコーン半径  $R$  と散乱確率  $I$  の関係を見ても、原子間距離  $d$  が大きければ大きいほどシャドーコーン半径  $R$  は大きくなり、散乱確率  $I$  は小さくなると思われる。

## 4.2 ランダムな値による散乱確率

4.1 で計算したのは  $\text{He}^+$  と  $\text{Si}$  原子においての場合であって、この三点だけでは一般的な関係は判断できない。よって原子間距離を  $0 \sim 20$  の範囲で  $0.5$  刻みにとり、(熱振動振幅) を  $0.078$  とし、データをとった。

### 1. 原子間距離 $d$ とシャドーコーン半径 $R$ と散乱確率 $I$ の関係の計算

原子間距離 $d$ [ ]	シャドーコーン 半径 $R$ [ ]	散乱確率 $I$
0	0	2
0.5	0.028	1.938

1	0.04	1.877
1.358	0.046	1.841
1.5	0.049	1.821
2	0.056	1.773
2.5	0.063	1.722
3	0.069	1.676
3.5	0.075	1.629
3.84	0.078	1.607
4	0.08	1.591
4.5	0.085	1.552
5	0.089	1.521
5.43	0.093	1.491
5.5	0.094	1.484
6	0.098	1.454
6.5	0.102	1.425
7	0.106	1.397
7.5	0.109	1.369
8	0.113	1.351
8.5	0.117	1.325
9	0.12	1.306
9.5	0.123	1.282
10	0.126	1.266
10.5	0.13	1.249
11	0.133	1.233
11.5	0.136	1.218
12	0.139	1.204
12.5	0.141	1.191
13	0.144	1.177
13.5	0.147	1.165
14	0.15	1.157
14.5	0.152	1.146
15	0.155	1.138
15.5	0.158	1.128
16	0.16	1.118
16.5	0.163	1.112
17	0.165	1.104
17.5	0.168	1.098
18	0.17	1.093
18.5	0.173	1.085
19	0.175	1.081
19.5	0.177	1.076
20	0.179	1.072

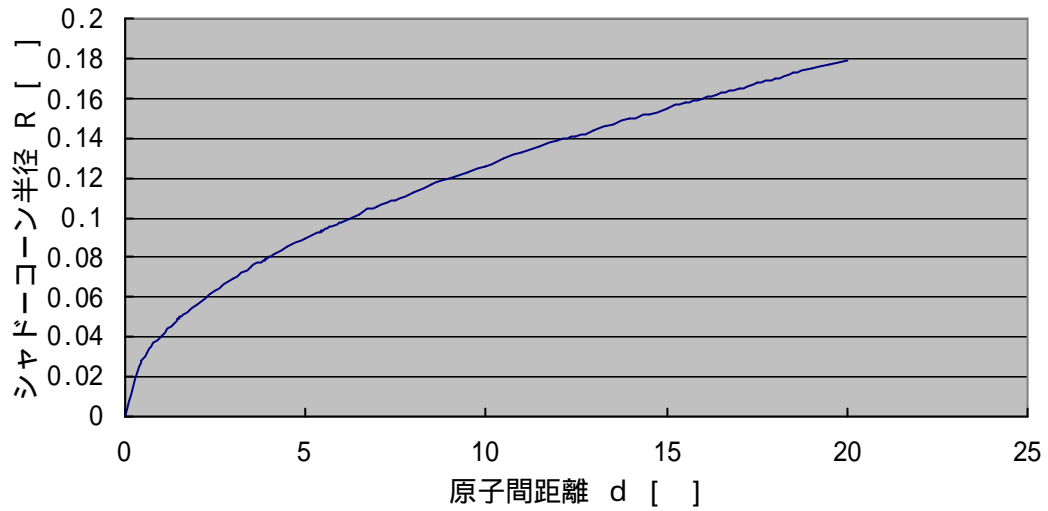
表.2

原子間距離  $d$  とシャドーコーン半径  $R$  と散乱確率  $I$  の関係



2. 原子間距離  $d$  とシャドーコーン半径  $R$  の関係をグラフ化

原子間距離  $d$  とシャドーコーン半径  $R$  の関係のグラフ

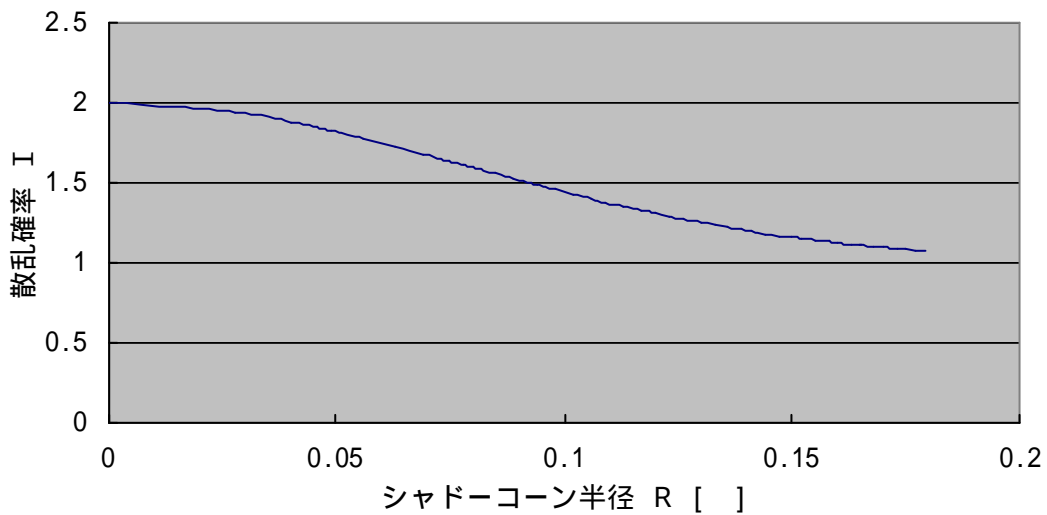


グラフ.1

原子間距離  $d$  とシャドーコーン半径  $R$  のグラフ

3. シャドーコーン半径  $R$  と散乱確率  $I$  の関係をグラフ化

シャドーコーン半径  $d$  と散乱確率  $I$  の関係のグラフ

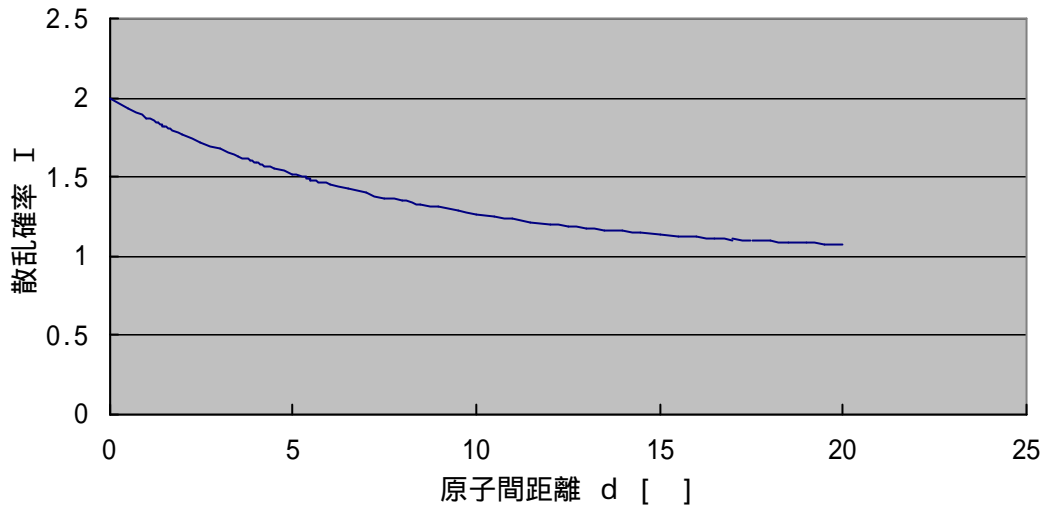


グラフ.2

シャドーコーン半径  $d$  と散乱確率  $I$  のグラフ

#### 4. 原子間距離 $d$ と散乱確率 $I$ の関係をグラフ化

原子間距離  $d$  と散乱確率  $I$  の関係のグラフ



グラフ.3

原子間距離  $d$  と散乱確率  $I$  のグラフ

#### 4.3 データの考察

グラフ.1 より一般的に原子間距離  $d$  が大きくなればなるほどシャドーコーン半径  $R$  は大きくなり、シャドーコーン半径  $R$  が大きくなると散乱確率は下がっていく。ということは当然、原子間距離  $d$  が大きくなれば散乱確率は低下する。これは二原子モデルを学ぶ段階で予想した通りである。

## 5. 結論

高エネルギーイオン散乱法は材料解析という非常に重要な分野であり、この研究で一歩踏み込んだ領域に進んだ。研究を始めるときは期待感と不安感があったが、どんだのめり込んでいった。研究とは日々の努力でありそれが報われるのかどうか分からないという非常に不確定要素の多いものである。しかし、一歩前進することの喜びを学んだ。

材料解析は非常に小さな単位で物事を考えなければならず、緻密で精度の高い結果を導かねばならない。この研究では高エネルギーイオン散乱法をテーマとし行い二原子モデルの場合を考えた。なぜなら、第一原子と第二原子の原子間距離が離れば離れるほどシャドーコーンの影響により、第三原子以降での散乱の寄与は第一原子と第二原子での散乱の寄与よりも非常に小さいので二つの原子のモデルを考えることにより、近似値が得られるからである。実際プログラムを組み散乱確率を計算すると二原子間距離が離れば離れるほど散乱確率が低下していく。今後の課題としては、第三原子以降の散乱の寄与を考慮することにより、正確なデータを取れ、物質の組成や構造をより理解できるので複雑な原子配列の場合を考える余地があり、その計算プログラムを組むという課題がでてきた。

## 6. 謝辞

卒業研究をするにあたり、成沢忠教授、武田光由実験講師に大変お世話になり感謝しております。大変勉強になりました。この苦勞を社会に出ても生かしていきたいと思います。

## 7. 参考文献

- (1) 平木昭夫・成沢忠 共著：表面・界面の分析と評価（オーム社・1994.6.1）
- (2) 山田公 著：イオンビームによる薄膜設計（共立出版・1991.9.10）
- (3) 大槻義彦：物理学最前線（共立出版・1986.9.10）
- (4) 岩澤康裕・小間篤 共著：表面の化学（丸善株式会社・1994.12.26）
- (5) 合志陽一・前田浩五郎・佐藤公隆 共著：イオン励起のスペクトロスコピーとその応用（学会出版センター・1987.4.20）
- (6) 井村健：アモルファス薄膜の評価（共立出版・1989.9.1）
- (7) 伊藤憲昭：放射線物性 1（森北出版株式会社・1981.5.25）
- (8) 塚越一雄：決定版はじめての C++（技術技術評論社・1999.10.10）