

用語解説(33)

『基礎理論(10)』

— イオン散乱の理論 —

荒谷美智

理化学研究所 核化学研究室 〒851-01 和光市広沢 2-1

ラザフォード散乱

たとえば α 粒子のような運動する正の荷電粒子が、他の原子核に近づいてきた場合、幾何学的な点と考えた原子核の正電荷の影響で、運動する粒子が押し返されたり、それたりして進行方向が変化する現象。

低圧気体放電で Goldstein が陽極線という名で正イオンビームを発見し、J. J. Thomson が電子ビームとして、陰極線の実体を解明するに及んで、1903年正負の等電荷からなる、いわゆるトムソンの原子模型が提案された。放射性壊変現象はすでに知られていたが、まだ、核という概念はなく、正電荷は原子空間に一樣に分布するものとされた。しかしながら 1909 年に見いだされた α 粒子の 90° 以上の大角度散乱は、このようなモデルでは説明できない。大角度散乱の頻度は、正電荷が一点に集中して存在するとして計算すると定量的に説明できた。原子正電荷についての一様モデルから Rutherford による有核モデルへの発展という形で、ヘリウム原子核 (α 粒子)、ひいては原子核一般の発見の端緒となったことから、この散乱をラザフォード散乱と呼んでいる。

90° 以上の大角度散乱を後方散乱という場合もある。これは、 α 粒子の進行方向を前方とした見方であり、 90° 以下の小角度散乱が前方散乱である。要するにラザフォード散乱は、有核モデルに基づく全方向散乱現象の古典力学的描像である。

散乱微分面積

ポロニウム の α 粒子を用いた 90° 以上の大角度散乱が、たとえば金のような重い元素の箔で予想以上に顕著であったことから、Rutherford はさらに種々の元素を標的核として散乱実験を行い、散乱の頻度を予知する散乱公式を導いた。

原子番号 Z_1 、質量 M_1 、初速度 V_0 の入射粒子が、原子番号 Z_2 、質量 M_2 の標的核により θ 方向の単位立体角内に散乱されるための原子 1 個あたりの面積 $d\sigma/d\Omega$ は、散乱の単位立体角あたりの微分面積といわれ、次の式であたえられる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\frac{1}{2} M_1 V_0^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

これは Rutherford の散乱公式といわれ、 α 粒子の散乱についてよく合うことが知られている。この式は、たとえば金による散乱のような $M_1 \ll M_2$ の場合について導かれたものであるが、軽い核による α 粒子の散乱や、より重い入射粒子の散乱等、一般の場合については、次の式が Darwin により導かれている。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\frac{1}{2} M_1 V_0^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta} \frac{\left\{ \cos \theta \pm \sqrt{1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^2 \sin^2 \theta} \right\}^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^2 \sin^2 \theta}}$$

ただし、 \pm については $M_2 > M_1$ の場合は $+$ をとり、逆の場合には $+$ と $-$ のそれぞれの値を求め結果を加算するものとする。

さらに、入射粒子と標的核のスピンを考慮に入れた式や、入射粒子のエネルギーが大きい場合の相対論的補正を加えた式が Mott により計算されている。

カイネマティック因子

入射粒子は標的核による散乱の後、進行方向が変えられているが、この系での運動量とエネルギーの保存により、散乱粒子の運動エネルギーは入射時の運動エネルギーと異なっている。エネルギー E_0 、質量 M_1 の入射粒子が標的核 M_2 により θ 方向に散乱され、エネルギーが E_1 となった場合のカイネマティック因子は

$$\frac{E_1}{E_0} = \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \left\{ \cos \theta \pm \sqrt{\left(\frac{M_2}{M_1} \right)^2 - \sin^2 \theta} \right\}^2$$

である。 $M_1 \leq M_2$ の場合は $+$ を用い、 $M_1 > M_2$ の場合は最大散乱角 $\theta_{\max} = \sin^{-1}(M_2/M_1)$ が存在する。

$M_1 > M_2$ の場合、軽い標的核の方が、重い入射粒子により運動状態に入ることがある。この現象を反跳という。エネルギー E_0 、質量 M_1 の入射粒子が標的核 M_2 を θ 方向にエネルギー E_2 で反跳させた場合、反跳について

$$\frac{E_2}{E_0} = 1 - \frac{E_1}{E_0} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cos^2 \theta \quad \theta \leq 90^\circ$$

の関係がある。

阻止能

荷電粒子が物質中を距離 dx 進むとき、運動エネルギーを dE だけ失うものとすれば、阻止能は $-(dE/dx)$ として定義される。阻止能は一般には運動する荷電粒子のエネルギーの関数である。阻止能を単位体積あたりの原子数で割った量、すなわち原子 1 個あたりの阻止能を阻止断面積という。実用的には $\text{MeV}/(\text{mg}/\text{cm}^2)$ のような単位で用いられることが多い。阻止能は、加成的であり、合金、分子等の複合系の阻止能は、その系を構成する原子の阻止能の和として与えられる。

阻止能は、運動する荷電粒子と物質を構成する原子との相互作用に原因があり、核的阻止能と電子的阻止能にわけて考えることができる。入射粒子のエネルギーが低い場合には弾性散乱がエネルギー損失で主要な過程であり、阻止能はエネルギーが低くなるにつれて増大する。核的阻止能は J. Lindhart, M. Scharff, H. E. Schiott に

よる LSS 理論がよく知られている。イオン照射による損傷解析、粒子トラック解析などの問題には有用である。入射粒子のエネルギーが中程度になると非弾性散乱がエネルギー損失過程で支配的となり、電子の励起、電離、電子密度の集団モードの励起による電子の阻止能が重要である。このエネルギー領域で有効なのはベータ・ブロッホの式であり、入射粒子の速度に応じて内殻または外殻補正が必要な場合も生ずる。入射粒子のエネルギーが高くなると、阻止能は減少しほぼ一定となる。

阻止能については、多くの数値表や図表¹⁾が出版されている。

- 1) J. F. Ziegler: "Handbook of Stopping Cross-Sections for Energetic Ions in All Elements", Vol. 5 of "The Stopping and Ranges of Ions in Matter" (Pergamon Press, 1980).

ラザフォード後方散乱分析 (RBS)

核子あたり MeV 程度の軽元素イオンを種々の加速器でイオンビームとして用い、通常はビームに対して直角の位置に試料を置き、試料表面層から後方散乱してくる粒子のエネルギー分析により、試料を構成する原子の種類と量およびその深さ方向の分布を知る分光法。検出器としては表面障壁型シリコン半導体検出器を用いることが多い。検出器に入った後方散乱イオンは、そのエネルギーに応じたパルスとして、波高分析器によりエネルギースペクトルをあたえる。観測された任意のチャンネルを E_{obs} とすれば、その値で検知された粒子の試料内での深さ x は

$$x = \frac{K(\theta)E_0 - E_{obs}}{\{K(\theta) + 1/\sin(\theta - 90^\circ)\} dE/dx}$$

であたえられる。ここで $K(\theta)$ は検出角におけるカイネマティック因子、 dE/dx は入射粒子の試料に対する阻止能、 E_0 は入射粒子のエネルギーである。入射粒子が決まり、検出角も決まれば、カイネマティック因子は M_2 、すなわち試料の質量だけの関数であるから、元素分析が場合によっては同位体分析も可能である。この意味で、散乱分析は、より拡張された質量分析といえる。

近年、比較的小型の加速器の急速な普及により、この方法は材料科学研究において、不可欠のものとなっている。

実験室的には ^{241}Am のような長半減期の線源を用い、より簡便に行うことができるが、それは放射線管理区域内であることを要する。

弾性反跳検出分析 (ERDA)

ラザフォード散乱で $M_2 \ll M_1$ となる場合には、入射粒子が標的核に散乱されるよりも、軽い標的核の方が、入射粒子に反跳される現象が目立ってくる。軽い標的核は前方に反跳されるので、前方反跳といわれることもある。前方反跳粒子についてのラザフォード散乱公式は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{V_0^2}\right)^2 \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^2 \frac{1}{\cos^2 \theta}$$

となる。

近年、重イオン加速器の発展により、核子あたり MeV 程度の種々の重イオンビーム、たとえば、炭素、窒素、

酸素、フッ素、ネオン、アルゴンなどのビームが利用できるようになった。これらの重イオンビームに対して試料を傾けて置き、試料表面層から前方反跳してくる粒子のエネルギー分析により、試料中の主として軽元素の量と深さ方向分布を知る分光法が ERDA である。検出器を前方に配置するほかは RBS と同じとよい。ただし、波高分析器で得られるエネルギースペクトルは反跳粒子そのものによるパルスに由来し、 E_{obs} として検知されたその粒子の試料内での深さ x は

$$x = \frac{K(\theta_2)E_0 - E_{obs}}{\frac{K(\theta_2)(dE/dx)_1}{\sin \theta_1} + \frac{(dE/dx)_2}{\sin(\theta_2 - \theta_1)}}$$

であたえられる。ここで $K(\theta_2)$ は検出角における反跳のカイネマティック因子、 E_0 は入射粒子のエネルギー、 θ_1 は試料角、 $(dE/dx)_1$ は入射粒子の試料に対する阻止能、 $(dE/dx)_2$ は反跳粒子の試料に対する阻止能である。反跳のカイネマティック因子で M_1 と θ_2 が決まれば、 M_2 だけの関数となり軽元素分析が、またリチウムまでなら同位体分析が行える。これらは厚さ情報を伴った質量分析として、あらゆる先端技術材料の研究はもとより地球科学や考古学的試料に有力な方法となっている。

$M_2 < M_1$ の場合には、最大散乱角 $\theta_{max} = \sin^{-1}(M_2/M_1)$ が存在するため、検出角によっては、試料中の重い元素による散乱粒子が、反跳粒子と共に検出器に入ってくることもある。このような場合には検出器の前に適当な厚さの薄膜を置いて散乱粒子を吸収し、反跳粒子の通過には影響しないような条件で測定することが多い。また、散乱粒子と反跳粒子を区別するために飛行時間法が行われることもある。

さらに、この前方散乱粒子を除去せず、それに着目して積極的に情報源として利用するラザフォード前方散乱分析も最近行われるようになった。重イオンビームの利用が容易になり、カイネマティック因子における M_1 と θ の選択の自由度が生じ、前方散乱の方が後方散乱より深さ分解能や質量分解能がよい場合があるためである。ラザフォード散乱は、全方向散乱反跳分析へと展開しつつあるというのが現状である。

チャネリング

α 粒子、陽子、 π^+ 中間子、陽電子等、軽い正荷電粒子が結晶性試料に入射するとき、結晶軸または結晶面にほぼ平行に入射すれば、入射粒子は原子と衝突せず、その軸または面に沿って進み、RBS で散乱断面積が顕著に低下する。この現象をチャネリングという。チャネリング現象の起こる最大角度は、 $\theta_{max} = (2Z_1 Z_2 / Ed)^{1/2}$ であたえられる。 Z_1, Z_2 はそれぞれ入射粒子、結晶原子の原子番号、 E は入射エネルギー、 d は軸方向の原子の列での原子間隔である。

チャネリング方向から見て格子間原子が存在すると、入射粒子に対する散乱断面積は増大する。このことは、チャネリングが格子欠陥に敏感ということの意味する。ラザフォード後方散乱で平行度の高いビームをつくり、結晶表面や内部における不純物原子の位置決定、結晶度の評価、照射損傷による原子変位の解析にチャネリングが行われている。