

用語解説(42)

『モンテカルロ法 (1)』

一様乱数 (Uniform Random Numbers)

乱数は、シミュレーションによる、現象の説明において最も重要な数学的道具である。以下、乱数の定義から話を始めよう。 M は1つの、実数の集まりである。いろいろな M のうちで、0と1とから成る $M[2], 0, 1, 2, \dots, 9$ から成る $M[10], 0 \leq u \leq 1$ なるすべての実数 u からなる $M[u]$ が主として登場する。 M からその要素を次々と互に独立に、同じ確率 p でとり出して一列にならべたものを一様乱数という。 $M[2]$ では0と1とが $p=1/2$ で選出され、 $M[10]$ では $p=1/10$ 、 $M[u]$ では、 u が、区間 $[0, 1]$ にある小間隔 du から選出される確率 $p=du$ である。 $M[2], M[10]$ からえられる一様乱数を $\{i_n\}$ 、 $M[u]$ からのものを $\{u_n\}$ とかく。 $\{u_n\}$ はとくに実数乱数とよばれ、実用上、最も頻繁に使われる。 $\{i_n\}$ 、 $\{u_n\}$ のいずれか1つが得られると、残りはそれから作られる。乱数はそれが生成される方法によって算術乱数と物理乱数とに分けられる。算術乱数は主として数式 $I_{n+1} \equiv kI_n + b \pmod{M}$ 、 $u_n = I_n/M$ で計算機によって迅速に生成される。整数 k, b, M 及び初期値 I_0 の決め方は色々ある¹⁾。しかし、何れにしても安心して使用できるような算術乱数は皆無である。データメタ数列 $\{u_n\}$ を1つの規則でつくることは不可能である。これに対して物理乱数は、放射線など自然界の確率現象をつかって生成されるので生成された $\{u_n\}$ は安心して使用できる^{2), 3)}。

(大府大・宮武修)

- 1) 宮武, 脇本: 「乱数とモンテカルロ法」 森北出版 (1978)
- 2) 吉沢, 井上, 宮武: 日本物理学会誌, 36, No. 12 (1981)
- 3) Inoue, et al.: Journ. Royal. Stat. Soc. Series C, 32 (1983), pp. 115-120

電子イオン化断面積 (Electron Ionization Cross-section)

運動エネルギーを持った電子が原子に衝突して内殻電子を解き放って原子をイオン化する場合の確率を面積の単位で表したものを電子イオン化断面積という。内殻に空席が生じると上位の準位から電子が落ちてきて準位間のエネルギー差に対応するX線やオージェ電子が発生する。通常この断面積 σ_n は、エネルギー E 、あるいは $U = E/E_n$ (E_n : n 殻の電子束縛エネルギー) の関数として与えられ、Bethe による理論式:

$$\sigma_n \cdot E_n^2 = 6.51 \times 10^{-14} b_n \cdot \ln(c_n \cdot U) / U$$

をはじめ、経験式など多くの表式が提案されてきた。しかし、未だ定まった式はない。モンテカルロ法を用いたEPMAによる薄膜の定量分析では式によって定量結果に20~30%の差異が生ずる。 σ_n は内殻の種類 ($K, L,$

M, \dots) によっても異なってくるので、実験値¹⁾や量子力学に基づいた数値解法の結果²⁾との比較によって Bethe 式中の b_n, c_n の値を、 U の適用領域を指定して求めたりしている。精度の向上を計るために実験的な検証が望まれる。特に M 数等に対する測定値の報告例³⁾は少ない。(大府大工・村田顕二)

- 1) C. J. Powell: "Electron Beam Interactions with Solids", ed. by D. F. Kyser, D. E. Newbury, H. Niedrig and R. Shimizu (SEM Inc., Chicago, 1984) p. 19.
- 2) P. Rez: X-ray Spectrometry, 13, 55 (1984).
- 3) K. Murata and K. Sugiyama: J. Appl. Phys. 66, 4456 (1989).

光イオン化断面積 (Photoionization Cross-section)

光やX線を原子や分子に照射する時、光子エネルギーが殻電子の束縛エネルギーよりも大きければ電子が束縛から解放されて原子や分子はイオン化する。このような現象の起きる確率を面積の単位で表したものが光イオン化断面積である。ESCA では軟X線を固体表面に照射して内殻電子をイオン化する。原子・分子が固体を形成しても内殻電子の電子状態は大きく変化しないので、固体内部での光電子の発生を考察するときには孤立原子・分子の光イオン化断面積を用いることができる。ESCA で用いられるX線のエネルギー領域では光イオン化断面積は実験的にも理論的にも求められている¹⁻⁴⁾。断面積は光子エネルギー、原子・分子の種類、原子軌道の関数となる。

文献4には発生した光電子の角度分布を与える式に現われる非対称パラメータも示されている。

(大府大工・村田顕二)

- 1) W.M. J. Veigle: Atomic Data 5, 51 (1973).
- 2) J. H. Scofield: J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 8, 129 (1976).
- 3) 相原惇一, 井口洋夫, 里子允敏, 菅野 誠, 中村正年, 石井武比古, 原田義也, 関 一彦: "電子の分光"(共立出版, 1978).
- 4) I. M. Band, Yu. I. Kharitonov and M. B. Trzhaskovskaya: Atomic Data and Nuclear Data Tables, 23, 443 (1979).

EPES, 弾性ピーク電子分光法 (Elastic Peak Electron Spectroscopy)

非晶質固体表面に電子線を照射すると、種々のエネルギーを持った電子が反射されてくる。それらを分光して、理想的にはエネルギー損失を全く受けていない弾性反射電子のみを検出して表面の情報を得る手法が弾性ピーク電子分光法である。分光器としては阻止電界型、円筒ミラー型などが用いられている。扱うエネルギーは数keV以下である。弾性反射率の原子番号依存性が大きく、SEMにおける通常の反射電子像に比べて数倍以上の高いコントラストが得られる¹⁾。

固体中で入射電子が一回だけ後方散乱されているという簡単な解析モデルによれば非弾性平均自由行程 λ_n を用いて、弾性反射電子として出てくる確率 P_{el} は

$$P_{el} = N_A \sigma_{eff} \lambda_n$$

で与えられる。ここで N_A は原子密度、 σ_{eff} は有効弾性散乱断面積である。 σ_{eff} が知られば、 P_{el} の測定値を用いて、 λ_{in} が求められるので、オージェ電子分光分析などに有用である。上記解析モデルで電子の走行中一回の非弾性衝突が起これば、EELS、プラズモン損失分光、イオン化損失分光等における電子衝突のモデルとなり、これらの測定値との間にある関係式が得られるので、定量的解釈や種々の物理量を求めるのに利用されている²⁾。

(大府大工・村田顕二)

- 1) R. Schmid, K. H. Gaukler and H. Seiler: Scanning Electron Microscopy 1983/II (SEM Inc., Chicago, 1983) p. 501.
- 2) G. Gergely: Scanning 8, 203 (1986).

誘電関数 (Dielectric Function)

多粒子系の解析において、個々の粒子間にクーロン力が働くものとして外部から与えられた擾乱に対する応答関数を表すものであり、 $\epsilon(\mathbf{K}, \omega)$ 等で表現される。ここで、 \mathbf{K} は粒子密度ゆらぎの波数、 ω は振動数である。誘

電関数の中で基本とされるものに Lindhard の誘電関数がある。これは乱雑位相近似に基づくといわれ、密度ゆらぎの振幅が十分に小さい場合を仮定し、運動方程式をゆらぎについて線型化した扱いにより得られたものと考えられる¹⁾。より正確な扱いとしては、Lindhard の誘電関数に交換効果や相関効果を考慮することや、さらに、バンド間、バンド内遷移の影響を含めること等の補正が加えられる。金属中における伝導電子は自由電子ガスを形成していると考えられ、上記の解析の密度ゆらぎはプラズマ振動またはプラズモンに相当する。金属に入射した電子等はこの自由電子ガス中の個々の伝導電子と、あるいはガス全体と相互作用し、それぞれ、個々の伝導電子を電離するか、プラズモンを励起するかを定量的に求めることができる。誘電関数を用いるとこのように金属に打ち込まれた電子やイオンのエネルギー損失や散乱角度を正確に求めることができ、電子エネルギー損失スペクトル (EELS) の実験値をよく説明することができる。

(大阪工大工・小寺正敏)

- 1) 一丸節夫: プラズマの物理, 産業図書, 1981.