

用語解説(43)

『モンテカルロ法 (2)』

竹内 渉

岡山理科大学教養部

〒700 岡山市理大町 1-1

イオン-原子間ポテンシャル (Interatomic Potential)

ISS, 特に ICISS によって結晶表面構造解析を行う際, シェドローコーンの形状を定量的に求める必要があり, その形状はイオン-原子間相互作用ポテンシャル¹⁾により決定される。

イオンと原子が裸の原子核同士で相互作用する高いエネルギー領域では, 両粒子間の相互作用ポテンシャルを両粒子の原子核間に働くクーロンポテンシャル, つまり $V(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r$ として取り扱える。ただし, Z_1 と Z_2 はそれぞれイオンと原子の原子番号, e は電子の電荷, r はイオンと原子間の距離である。しかし, ISS のような低エネルギーの入射イオンが原子と衝突する際, 原子核にそれほど接近できないために核間距離が大きくなり, 核の電荷は核外電子によって遮蔽され, 相互作用は距離と共に急激に弱くなる。したがって, 低エネルギー領域でのイオンと原子との相互作用ポテンシャルは $V(r) = Z_1 Z_2 e^2 \Phi(r/a) / r$ として遮蔽されたクーロンポテンシャルで表される。ここで, a は遮蔽距離と呼ばれ, 遮蔽効果が強くなる核間距離の目安を与える。また, $\Phi(r/a)$ は遮蔽関数で, $\Phi(r/a)$ の選び方には, Bohr, Born-Mayer, Thomas-Fermi, Ziegler-Biersack-Littmark ポテンシャルなどがある²⁾。

- 1) I. M. Torrens: "Interatomic Potentials" (Academic Press, New York, 1972).
- 2) 志水隆一: 応用物理, 54, 876 (1985).

表面ポテンシャル (Surface Potential)

固体の多くの電子的性質はバルクのポテンシャルの3次元の周期性に依存するが, 表面においてポテンシャルの1次元の周期性が失われて2次元の周期性のポテンシャル (これを表面ポテンシャルという) をもち, 表面および表面近傍の電子状態に変化を生じて, 表面の電子的性質がバルクのものとは異なる¹⁾。表面において, 面に垂直な方向の原子配列に周期性がないことと真空側から表面の内側に向かう急激なポテンシャルの変化を self-consistent に決定しなければならないために, 表面電子状態の計算はバルクの場合と比べて難しい。表面状態は表面近傍に局在した電子状態であり, 表面ポテンシャルや表面近傍の原子配列に敏感で, 表面の構造や物性および化学反応過程と深く関係している。表面電子状態

は表面構造の変化によって顕著に影響されるために, 表面における系の全エネルギーを最も安定化するような表面構造が形成される。結晶表面第1原子層から第2或いは第3原子層までの領域では, バルクとはかなり異なる電子構造を示す。このことより, 表面ではバルクとは相違するポテンシャル, すなわち表面ポテンシャルをもつ。

- 1) 小間, 八木, 塚田, 青野編: "表面物性工学ハンドブック" (丸善, 1987) 第1章。

BCA, 2体衝突近似 (Binary Collision Approximation)

比較の高いエネルギー領域の入射イオンと標的原子との原子衝突を理論的に取り扱う際に, イオンと標的中の1つの原子との2粒子のみの相互作用を考慮し, この2粒子による衝突を独立に次々と起こして入射イオンの軌道を追跡する近似を2体衝突近似という。この近似法に対して, 低いエネルギーの領域では, 入射イオンと標的中の1つの原子のみではなくてイオンの周囲の多数の原子との相互作用, さらにイオンとの相互作用に関与する多数の原子同士の相互作用を同時に考慮する必要があり, この方法による原子衝突理論を分子力学的法 (Molecular Dynamics) という。分子力学的法では, イオンとの衝突に関与する多数の原子の位置を非常に短い時間ごとにニュートンの運動方程式を解くことによって時間的に追跡するために, 計算機シミュレーションにおいてかなり多くの計算時間を要する。2体衝突近似による計算機シミュレーション¹⁾ は分子力学的法によるそれに比べて, 比較的わずかな時間で原子衝突を取り扱える点で便利である。しかし, 入射エネルギーがおよそ 0.1 keV 以下である低エネルギー領域において, 2体衝突近似に基づいて原子衝突を取り扱う際, 2体衝突の近似の精度が悪くなる危険性がある。

- 1) Y. Yamamura and W. Takeuchi: Nucl. Instrum. Methods B 29, 461 (1987).

LSS 理論 (LSS Theory)

阻止能と飛程に関するイオンと原子系の衝突は理論的に Lindhard, Scharff および Schiøtt により解明され, 彼等のイニシャルから LSS 理論¹⁾ と呼ばれる。Lindhard 等による原子の阻止能理論は自由電子ガスの阻止能を原子の Thomas-Fermi 模型に適用したものである。入射粒子のエネルギーが高い領域では, 電子的衝突による阻止能, すなわち電子的阻止能は核的阻止能に比べてはるかに大きい。電子的阻止能は入射粒子の速度 v が小さくなると v^2 に比例して零に近づくために, 入射粒子の速度が小さい場合には, 核的阻止能の寄与を無視できなくなる。無次元に還元されたエネルギーと距離を用いると, ディメンションをもたない還元された核的阻止能と電子的阻止能を定義することができる。還元された核的阻止能は入射粒子および標的原子の種類に依存しないユニバーサルな阻止能であるが, 還元された電子的阻止能は入射粒子と標的原子の種類に依存する。イオンを標的表面から入射した場合, 衝突におけるエネルギー損失のばらつきのため, 粒子の飛程は一定の値をとることなく平均

TECHNICAL TERMS (43)

値のまわりに分布する。この飛程のばらつきを取り扱うために、Lindhard 等はエネルギー E の入射粒子が飛程 R をもつ確率 $p(R, E)$ を導入し、実際に観測する平均投影飛程を求める式を導出した。

- 1) J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiøtt: Kgl. Danske Videnskab. Selskab Mat.-Fys. Medd. **33** (1963) No. 14.

シルスベチェーン (Silsbee Chain)

結晶における特定方向へのスパッタリングを剛体球衝突に基づいたフォーカシング現象として Silsbee¹⁾ により説明された。等しい直径 r_0 の剛体球が x 軸の直線上を等間隔 d で並んでいる配列を考える。この配列を Silsbee チェーンという。第 i 番目の球が直線に対して角 β_i で進み第 $i+1$ 番目の球と衝突し、以後剛体球は y 軸を x 軸に対して垂直にとった場合の xy 平面のみで運動すると仮定する。この衝突により、第 $i+1$ 番目の球の運動方向と直線との角 β_{i+1} は $\alpha=d/r_0$ と定義した α を用いて、 β_i と

$$\sin \beta_{i+1} / \sin \beta_i = \alpha \cos \beta_i - (1 - \alpha^2 \sin^2 \beta_i)^{1/2}$$

の関係がある。 $\beta_{i+1} < \beta_i$ 、つまり衝突することに球の運動方向が剛体球配列の直線に対して平行に近づく条件を上式から求めると、 $d/r_0 < 2 \cos \beta_i$ が得られる。この条件がフォーカシングの判定基準である。原子のランダムな運動が特定の稠密方向へのスパッタリングを生じ易いということを説明するために、Silsbee の理論は一応評価される。しかし、50~150 eV の低エネルギー領域で W や Ag 結晶の特定方向に、また zinc-blende や diamond 構造をもつ結晶で原子配列が等間隔でない $\langle 111 \rangle$ 方向にスパッタされ易いという報告がある。これらの場合、フォーカシングが起こる可能性は小さいのでスパッタリングを説明するために、Silsbee の理論を Lehmann

と Sigmund²⁾ によって修正されている。

- 1) R. H. Silsbee: J. Appl. Phys. **28**, 1246 (1957).
- 2) C. Lehmann and P. Sigmund: Phys. Status Solidi **16**, 507 (1966).

MARLOWE コード (MARLOWE Code)

2体衝突近似に基づいて Robinson と Torrens¹⁾ (1974) によって開発された MARLOWE コードは、元来、単結晶における原子衝突をシミュレートする計算機コードであり、その後、何度も改良されている。実験室系において、粒子は1つの偏向点から次の偏向点まで粒子の軌道の漸近線である直線に沿ってのみ運動すると仮定されている。このコードでは、結晶における幾つかの原子の位置から構成されているリスト（ブロックのこと）が用いられており、カスケードで任意に運動する原子に接近している格子点の位置に関連して、結晶に必要な原子の位置はこのリストを使って随意に決められることができる。原子間ポテンシャルとして、遮蔽クーロンポテンシャルである Thomas-Fermi ポテンシャルの Molière 近似を採用している。原子の熱振動はガウス分布であると仮定し、1次元の rms 変位は Debye モデルを用いて求められている。また、多体同時衝突 (simultaneous collisions) の寄与を考慮している。電子的エネルギー損失として、初期には Firsov モデルのみが用いられていたが、さらに LSS や Oen-Robinson モデルがコードに組み込まれている。その後、MARLOWE コードをランダム標的における原子衝突のシミュレーションに応用するために、結晶標的において結晶軸を個々の衝突前にランダムに回転させている。

- 1) M. T. Robinson and I. M. Torrens: Phys. Rev. **B 9**, 5008 (1974).