

博士論文

薄膜を通過するイオンビームの
小角多重散乱の研究

2015年度

池上 誠治

明星大学大学院
理工学研究科物理学専攻

Abstract

Multiple scattering treated in this study means a sequence of binary collisions of an energetic neutral or ionic projectile with different target atoms, whose distribution is random and homogeneous, in a matter. The verification of the multiple scattering theory through comparison with experimental results are performed by angular distribution of projectiles after passing through a target matter.

We decide first how to represent scattering potential; and then, we derive the formulae of cross section for the single scattering collision; then, we obtain a multiple-scattering function in an acceptable multiple scattering treatment. In the recent treatment of this problem, the scattering potentials are obtained quantum mechanically after construction of quantum mechanics, while the scattered orbit of an incident particle is dictated by classical methods.

Studies of small angle multiple scattering were performed as early as the 1920s by Bothe [1] and Wentzel [2]. In the following decades, many theoretical and experimental investigations of multiple scattering were undertaken; on the theoretical treatment up to 1962, a detailed review article by Scott [3] is available. Recent developments in the multiple scattering theory have been reviewed by Sigmund in 2004 and 2014 [4]. In a large number of theoretical works in this field, the work which is most useful and often referred to may be the Sigmund–Winterbon (SW) model [5].

For convenience, the SW theory and other important theoretical investigations related to the present study are outlined beforehand. The SW theory has used the differential scattering cross section constructed by Lindhard et al. [6]. Hence the Lindhard's theory is described in detail here. Lindhard's cross section formulae was deduced by means of an impulse approximation. In this approximation, scattering collision is assumed to occur in a quite short time, and the influence of potential due to other neighboring atoms can be neglected. The importance of Lindhard's result lies in that the cross sections obtained under the small angle approximation agrees with that obtained in the absence of the small angle treatment. This

agreement is confirmed using a power law potential as the scattering potential in the Lindhard's theory. This has led us to conclude that such limitation as small angle is relatively weak in the SW model.

Subjects which will be reported in the present paper are three, that is, determination of a new screening length, incorporation of nuclear and electronic energy loss effects into the SW model, and switching model that incorporates the nuclear and electronic energy loss effects in one model.

Coulomb interaction between an incident nucleus and a target one is actually screened by bound electrons. This screening effect has been taken in recent improved theoretical studies into account by a parameter called screening length. Determination of a suitable screening length is especially important in surface physics research [7]. Up to the present, theoretical reproduction of experimental results using a single screening length has not yet been accomplished. The subject to be reported first is determination of a new screening length that includes charge state effect of projectile based on the Thomas–Fermi–Moliere potential. This is realized in accordance with the derivation of the Kaneko's screening length between two isolated neutral atoms [8]. Using the new screening length formulae, screening length values have been evaluated for several Li^+ –atom combinations. The results are in general agreement with experimental ones for relatively heavy targets. Also, numerical calculations of the angular distribution using the new screening lengths have been performed for some combinations of ionic projectile and target atom. The results have shown that substantial agreement is obtained on combinations of a light projectile and a heavy target atom.

The second subject to be reported is incorporation of the nuclear energy loss effect into the SW model and its verification by numerical calculations. Valdes and Arista (VA) have made a pioneering work where energy loss effect was incorporated in the SW treatment [9]. In the VA model, however, only electronic energy loss was treated, and the energy loss effect and the target thickness were treated independently. In the present model, both of the nuclear energy loss and the electronic one are considered, and the energy loss is represented as a function of target thickness. The Kaneko model [10] is employed for describing the electronic energy loss effect and the Lindhard

method [6] for describing the nuclear one. The electronic energy loss is obtained exactly as a function of target thickness. The nuclear energy loss is obtained as a function of the target thickness in a rough approximation that the difference between the incident energy and the outgoing one is assumed to be quite small. From numerical results obtained for low incident particle energy of 27 keV using this model, it was found that the energy loss effect caused by nuclear stopping cannot be neglected in the low projectile energy regime because the nuclear stopping is almost the same as electronic stopping. It can thus be concluded that the present approach has an improvement over the VA model.

Finally, we constructed a switching model that includes the nuclear and electronic energy loss effects in one formula. While the model is based on a very rough approximation, its solution can be obtained exactly. One weakness of the present model is the separation of the nuclear and electronic regimes. The regime where nuclear effects dominate corresponds to very thin target thicknesses. The present switching model would have a problem on the numerical calculation when foil thickness is very thin. However, from a theoretical point of view, a model that can be solved exactly would be beneficial.

References

- [1] W. Bothe, Z. Physik 4 (1921) 161;
W. Bothe, Z. Physik 4 (1921) 300;
W. Bothe, Z. Physik 5 (1921) 63.
- [2] G. Wentzel, Ann. Physik 69 (1922) 335.
- [3] W.T. Scott, Rev. Mod. Phys. 35 (1963) 231.
- [4] P. Sigmund, Stopping of Heavy Ions, Springer, Berlin/Heidelberg, 2004 pp.121-124;
P. Sigmund, Particle Penetration and Radiation Effects Vol. 2, Springer Cham Heidelberg New York Dordrecht London, 2014 pp.281-339.
- [5] P. Sigmund, K. B. Winterbon, Nucl. Instr. Meth. 119 (1974) 541.
- [6] J. Linhard, V. Nielsen, M. Scharff, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 36 (10) (1968).

- [7] R.P. Walker, D.J. Martin, Surf. Sci. 118 (1982) 659.
- [8] T. Kaneko, Phys. Rev. A 66 (2002) 052901.
T. Kaneko, S. Ikegami, Nucl. Instr. Meth. B 258 (2007) 57.
- [9] J. E. Valdes, N. R. Arista, Phys. Rev. A 49 (1994) 2690.
- [10] T. Kaneko, Phys. Rev. A 41 (1990) 4889.

要旨

本研究における多重散乱とは、エネルギーを持った入射粒子（中性原子またはイオン）が標的物質内にランダムに存在する原子と次々と二体の散乱衝突を繰り返しながら進んで行く現象を言う。多重散乱理論の実験との比較による検証は、主として入射ビームの標的物質通過後の散乱角分布を通して行われる。理論の基本的構造は、まず散乱ポテンシャルをどう表わすかを決め、これから一回衝突での散乱断面積の式を導き、それを使って多重散乱の角度分布を表す式（多重散乱関数）を計算する、となっている。この問題では、初期の研究を除いて、散乱ポテンシャルを量子力学的に扱い、入射粒子の標的原子による散乱は古典的に扱っている。

散乱角は小さいと仮定する小角多重散乱理論の研究は 1920 年代の Bothe [1] や Wentzel [2] までさかのぼる。以後、多くの理論的および実験的研究がなされてきた。1962 年までの理論的研究に関しては、Scott のレビューがある [3]。また、最近のレビューとしては Sigmund によるものがある [4]。よく使われている多重散乱理論は、Sigmund-Winterbon (SW) の小角多重散乱理論 [5] であろう。

本研究の理解を助けるため、まず SW 理論およびこれと密接に関係するいくつかの理論的研究の概要を述べた。とりわけ SW 理論で使用されている Lindhard らの微分散乱断面積に関して、詳しい検討を行った。Lindhard らはインパルス近似（散乱ポテンシャルの影響を受ける時間が非常に短いという近似）を用いて微分散乱断面積を求めている [6]。この Lindhard らの理論の中で

ベキ乗ポテンシャルを用いた場合、小角近似での微分散乱断面積と小角近似を使っていないときの断面積が一致するという結果が得られた。このことから、SW 理論の小角近似という制限はそれほど強くはないという結論に達した。

入射原子（イオン）の核と標的原子の核とのクーロン力は、実際には周囲の電子によって遮蔽されて弱められる。この効果が遮蔽定数として理論の中で考慮されている。表面研究においては、適切な遮蔽定数を得ることが特に重要とされている [7]。今のところ、1 つの遮蔽定数で多くの実験結果を説明することはできていない。本研究では最初に入射粒子の電荷状態を考慮した新しい遮蔽定数を報告する。この遮蔽定数は、Thomas-Fermi-Moliere ポテンシャルから、Kaneko [8] による孤立中性原子間の遮蔽定数の導出に準じて導いた。得られた遮蔽定数の数値計算をいくつかの標的原子種に対して行った結果、原子種が重くなるほど実験値に近づくことがわかった。また、この新しい遮蔽定数を用いていくつかのイオン-中性原子系に対して計算した多重散乱角分布は、軽い入射イオンと比較的重い標的原子の組合せに対して良い一致を示した。

本論文で述べる第二の研究は、核的エネルギー損失の効果を考慮する核的阻止能の多重散乱理論への導入、および得られた結果の数値計算による検証である。先駆的研究として Valdes-Arista (VA) の理論がある [9]。しかしながら、VA 理論は電子的阻止能のみを扱い、またエネルギー損失と膜厚とを独立に取り扱っている。本研究では Kaneko の電子的エネルギー損失理論 [10] と Lindhard らの核的エネルギー損失理論 [6] とを用いてエネルギー損失と標的膜厚とを関係づける理論を展開した。電子的エネルギー損失は、正確に膜厚の関数として求まった。さらに、核的エネルギー損失に関しては、入射エネルギーと出射エネルギーとがほとんど差がないという近似の元で膜厚の関数として求めることができた。結論として、低エネルギーになると、核的阻止能によるエネルギー損失を無視することはできない、ということがわかった。なぜなら、低エネルギーでは、核的阻止能と電子的阻止能は殆んど同程度だからである。上記は、入射エネルギーが 27keV での計算結果である。したがって、本研究で提案した手法は、VA 理論の改良になっているといえる。

第三の研究として、1 つの式で核的エネルギー損失と電子的エネルギー損失を含む Switching モデルを提案した。このモデルは、荒い近似を元になっているが、正確に解くことができる。核的阻止能が優勢である領域と電子的阻止能が優勢な領域との 2 つに分けていることが、このモデルの特徴である。また、同時に

このことが欠点でもある。その理由は、核的阻止能が優勢である領域は、非常に膜厚が薄いことに対応していること、そして膜厚が薄いところでの数値計算に困難さがあるためである。しかしながら、正確に解けるモデルという点においては利点があると思われる。

参考文献

- [1] W. Bothe, Z. Physik 4 (1921) 161;
W. Bothe, Z. Physik 4 (1921) 300;
W. Bothe, Z. Physik 5 (1921) 63.
- [2] G. Wentzel, Ann. Physik 69 (1922) 335.
- [3] W.T. Scott, Rev. Mod. Phys. 35 (1963) 231.
- [4] P. Sigmund, Stopping of Heavy Ions, Springer, Berlin/Heidelberg, 2004 pp.121-124;
P. Sigmund, Particle Penetration and Radiation Effects Vol. 2, Springer Cham
Heidelberg New York Dordrecht London, 2014 pp.281-339.
- [5] P. Sigmund, K. B. Winterbon, Nucl. Instr. Meth. 119 (1974) 541.
- [6] J. Linhard, V. Nielsen, M. Scharff, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 36 (10) (1968).
- [7] R.P. Walker, D.J. Martin, Surf. Sci. 118 (1982) 659.
- [8] T. Kaneko, Phys. Rev. A 66 (2002) 052901.
T. Kaneko, S. Ikegami, Nucl. Instr. Meth. B 258 (2007) 57.
- [9] J. E. Valdes, N. R. Arista, Phys. Rev. A 49 (1994) 2690.
- [10] T. Kaneko, Phys. Rev. A 41 (1990) 4889.

目次

1. 緒言

1. 1. 小角多重散乱理論とその応用	11
---------------------	----

1. 2. 参考文献	14
------------	----

2. 理論的背景

2. 1. Lindhardらの弾性散乱の微分散乱断面積と核的阻止能	15
------------------------------------	----

2. 2. SigmundおよびWinterbonの多重散乱理論によるビームの角度広がり	22
--	----

2. 3. MarwickおよびSigmundの多重散乱理論によるビームの横広がり	27
---	----

2. 4. Sigmundらのビームの角度広がりおよび横広がりに関するCombinedモデル	31
--	----

2. 5. ValdesおよびAristaのエネルギー損失を考慮した多重散乱理論	37
--	----

2. 6. Kanekoの低速重イオンに対する電子的エネルギー損失理論	39
-------------------------------------	----

2. 7. まとめ	42
-----------	----

2. 8. 参考文献	43
------------	----

3. 理論

3. 1. イオン-中性原子間のポテンシャルより導いた遮蔽定数	44
---------------------------------	----

3. 2. 標的の膜厚と電子的エネルギー損失の関係	52
---------------------------	----

3. 3. 標的の膜厚と核的エネルギー損失の関係	54
3. 4. 小角多重散乱理論におけるビームの角度広がり、横広がりおよび Combinndモデルへの、エネルギー損失の導入	57
3. 5. Switching モデル	59
3. 6. まとめ	63
3. 7. 参考文献	63
4. 結果および考察	
4. 1. Lindhardらの $f_L(t^{1/2})$ に関して	64
4. 2. Thomas-Fermi-MoliereポテンシャルとLindhardの遮蔽定数とを用いた 場合の、小角多重散乱理論と実験との比較	66
4. 3. 遮蔽定数 a_{K-in} の入射体電荷効果およびこれで計算した散乱角分布 の実験との比較	71
4. 4. 遮蔽定数 a_{K-in} と良く知られた遮蔽定数との比較	77
4. 5. 多重散乱理論における電子的エネルギー損失と、核的エネルギー 損失との比較	81
4. 6. Switchingモデルの利点と欠点	92
4. 7. まとめ	94
4. 8. 参考文献	95
5. 結論	
5. 1. 本研究のまとめと今後の課題	98
5. 2. 参考文献	98

6. 付録	
6. 1. Lindhardらの微分散乱断面積に関して	100
6. 2. Meyerの小角多重散乱理論に関して	107
6. 3. Kaneko の孤立原子の遮蔽定数について	112
6. 4. Kaneko のイオンの形状因子	116
6. 5. Kaneko の低速重イオンの阻止能公式	120
6. 6. 参考文献	123
7. 謝辞	124
8. 業績一覧	125

第1章 緒言

1. 1. 小角多重散乱理論とその応用

本研究における多重散乱 (multiple scattering) とは、運動エネルギーをもった粒子 (中性粒子またはイオン) が標的物質へ入射し、その物質内にランダムに分布する原子と次々と二体衝突を繰り返しながら進んで行く過程を言う。ビーム・フォイル相互作用はこの多重散乱の基本的な実験的および理論的研究の対象であり、1920年代から研究されてきた。応用的にはイオン注入、イオン散乱を使った固体表面の研究などに関係して大変重要である。また医学、生物分野とも関係が深く、それらの中には nuclear microscopy を用いた細胞の構造画像を得るとか [1, 2]、がん細胞や繊維細胞などの映像を撮影とか、あるいは重粒子線を用いたがん治療がある [3, 4]。

多重散乱理論の研究は、1920年代初期の Bothe の研究 [5] および Wentzel の研究 [6] までさかのぼる。それ以降、現在に至るまで多くの理論的研究が実験的研究と共に行われてきた。初期の理論的研究に関しては、Scott の優れた総説 (1963) がある [7]。これらの理論では、そしてその後の理論でも、散乱ポテンシャルは量子力学的に取り扱われ、入射粒子の標的原子による散乱は古典的に取り扱われている。

この種の理論的研究の妥当性は、他の分野の理論的研究と同様に、実験結果との比較を通して行われる。本研究分野の場合、実験との詳細な比較は「入射体が薄膜を通過したあとの散乱角分布」および「入射体のエネルギー損失の散乱角依存性」を通じて行われてきた。例えば散乱角分布の場合、仮定された相互作用ポテンシャルから散乱の微分断面積を計算し、これを使って散乱角分布を計算するという流れになる。その流れに沿った基本式は1970年代までに確立されたと言ってよいであろう。現在は実験結果をにらみながら計算を精密化する段階にある。その場合のポイントは相互作用ポテンシャルをどう表すか、入射体のエネルギー損失過程をどう組み入れるか、となっている。後で出てくるように、前者では遮蔽関数、遮蔽定数などの概念が、また後者では電子的エネルギー損失、核的エネルギー損失、阻止能などの概念が入ってくる。

多重散乱の研究は Scott の Review 以降も引き続き行われてきて現在に至っている。高エネルギー領域 (MeV および 1 MeV に近い keV 領域) では、多重散乱問題の解を得るための基本的な方程式や方法は、Scott の総説が出版された時点で確立されたと言ってよい。核の周りの電子による遮蔽効果が考慮され、主

に小角散乱近似が使用されている。しかし、keV の低エネルギー領域および入射ビームが重イオンの場合に対しては実験と理論の一致は十分でなく、その後の研究に残されている。

Scott の総説以降の理論的研究は、Lindhard et al. (1968) [8] が Thomas-Fermi 型遮蔽関数を使用し、遮蔽定数、換算エネルギー (reduced energy)、散乱関数などの概念を導入して導いた散乱の微分断面積の式が基本になっていると言ってよい (2 章の 2.1 参照)。この微分断面積の式から散乱角分布の式を導いたのが Meyer (1971) [9] および Sigmund-Winterbon (1974) [10] (以後 SW と記す) である。Meyer は換算散乱角 (reduced scattering angle) および換算標的厚 (reduced target thickness) を定義して散乱の角分布の式を導き、いろいろな入射体一標的原子の組み合わせに対する計算結果を 1 つのグラフの中で比較できるようにした。ただし、散乱過程におけるエネルギー損失は考慮されていない。Sigmund と Winterbon (1974) は Meyer の理論における一貫性に欠けるところを修正し、小角散乱近似で計算した角分布の式を導いた (2-2 節参照)。彼等の理論は SW の多重散乱理論としてその後よく使われている。ただし、Meyer の理論と同様にエネルギー損失は考慮されていない。上記の 2 つの換算物理量と電子的エネルギー損失を考慮した理論を展開したのは Meyer et al. (1977) [11] および Valdes-Avista (1994) [12] である (以後 VA と記す)。これによって入射体と標的の組合せに依存しない多重散乱問題の一般解を得ることが可能になった (2-5 節参照)。本研究と関係が深い研究の 1 つに Marvick と Sigmund の理論的研究がある [13]。彼らは標的箔の射出面でのビームの広がり の式を導き、さらに換算横広がり の式を導いて異なる入射体一標的の組み合わせの比較を可能にした (2-3 節参照)。横広がり は実験と比較できる物理量ではないが、平行粒子ビームが物質内へ入射したとき、粒子がどれくらいの深さまで、どれくらいの広がり で分布するかを予測するときに役に立つ。最近の研究のレビューとしては、Sigmund によるものがあり、大変参考になる [14]。

本研究は 3 つの部分から構成されている。最初に、イオンの電荷を考慮した遮蔽定数に関する報告を行う (3-1 節)。過去の研究を調べて気が付くことの 1 つは、入射体をイオンと表現しつつも、理論の中に電荷をもつイオンであることが具体的に入っていないことである。表面研究においては、最適な遮蔽定数を得ることが特に重要である [15]。また今までの研究では 1 つの遮蔽定数で実験を説明することはまだできていない。本研究では、簡単なモデルからあ

る 1 つの遮蔽定数を導出した。この遮蔽定数で、いくつかの実験を説明することに成功した。第二の研究として、多重散乱理論への核的および電子的エネルギー損失の導入を述べる (3-2 節)。これは、先駆的研究としては VA 理論がある [12]。しかしながら、VA モデルでは、電子的阻止能のみを取り扱っている。また、エネルギー損失と膜厚とを独立に取り扱っている。本研究では、核的阻止能も考慮し、またエネルギー損失と標的膜厚とを関連づけた。第三の研究として、1 つの式で核的エネルギー損失と電子的エネルギー損失を含む Switching モデルを提案した。

第 2 章では本研究が基礎を置くいくつかの先駆的研究の概要を述べる。第 3 章で本研究の理論的展開を上で述べた順番で行う。これらの理論の数値計算結果の実験や他の理論との比較を第 4 章で示す。最後に本研究のまとめを第 5 章で行う。

1. 2. 参考文献

- [1] R. Norarat, H. J. Whitlow, M. Ren, T. Osipowicz, J. A. Kan, J. Timonen, F. Watt, *Microelectronic Engineering* 102 (2013) 6.
- [2] R. Minqin, J. A. Kan, A. A. Bettiol, L. Daina, C.Y. Gek, B. B. Huat, H. J. Whitlow, T. Osipowicz, F. Watt, *Nucl. Instr. Meth. B* 260 (2007) 124.
- [3] K. Noda, T. Furukawa, T. Fujimoto, Y. Hara, T. Inaniwa, Y. Iwata, K. Katagiri, N. Kanematsu, K. Mizushima, S. Mori, T. Murakami, Y. Sano, S. Sato, T. Shirai, E. Takada, Y. Takei, *Nucl. Instr. Meth.* 331 (2014) 6.
- [4] T. Miyamoto, M. Baba, N Yamamoto, M. Koto, T. Sugawara, T. Yashiro, K. Kadono, H. Ezawa, H. Tsujii, J. Mizoe, K. Yoshikawa, S. Kandatsu, T. Fujisawa, *Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.* 64 (2007) 750.
- [5] W. Bothe, *Z. Physik* 4 (1921) 161;
W. Bothe, *Z. Physik* 4 (1921) 300;
W. Bothe, *Z. Physik* 5 (1921) 63.
- [6] G. Wentzel, *Ann. Physik* 69 (1922) 335.
- [7] W.T. Scott, *Rev. Mod. Phys.* 35 (1963) 231.
- [8] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 36 (10) (1968).
- [9] L. Meyer, *Phys. Stat. Sol. (b)* 44 (1971) 253.
- [10] P. Sigmund, K. B. Winterbon, *Nucl. Instr. Meth.* 119 (1974) 541.
- [11] L. Meyer, M. Klein, R. Wedell, *Phys. Stat. Sol. (b)* 83 (1977) 451.
- [12] J. E. Valdes, N. R. Arista, *Phys. Rev. A* 49 (1994) 2690.
- [13] A. D. Marwick, P. Sigmund, *Nucl. Instr. Meth.* 126 (1975) 317.
- [14] P. Sigmund, *Stopping of Heavy Ions*, Springer, Berlin/Heidelberg, 2004 pp.121-124; P. Sigmund, *Particle Penetration and Radiation Effects Vol. 2*, Springer Cham Heidelberg New York Dordrecht London, 2014 pp.281-339.
- [15] R.P. Walker, D.J. Martin, *Surf. Sci.* 118 (1982) 659.

第2章. 理論的背景

第2章では、本研究と関係する過去の論文の概要を説明する。いくつかの理論式に関しては、付録で導出の詳細を示す。なお、本論文は特に断りがない限りMKS単位系を使用している。

2.2. 節で述べる、Sigmund–Winterbon理論は、2.3. 節（Marwick–Sigmundモデル）、2.4. 節（Combinedモデル）、2.5. 節（Valdes–Arista理論）での大切な基礎理論である。

また、2.1. 節で述べるLindhardらの弾性散乱の微分散乱断面積は、Sigmund–Winterbon理論、Marwick–Sigmundモデル、Combinedモデル、Valdes–Arista理論で用いられている。このLindhardらの微分散乱断面積に関しては、逆べき乗のポテンシャルを用いて評価すると興味深い結果が得られる。この事に関しては、付録6.1. 節および4章で詳述する。

2.1. Lindhardらの弾性散乱の微分散乱断面積

Lindhard（1968）らはインパルス近似を用いて、二体衝突の微分散乱断面積 $d\sigma$ を導出し、さらに核的阻止断面積の理論式を導いた [1]。この二体衝突の微分散乱断面積 $d\sigma$ は、この後で説明をする小角多重散乱理論で用いられている。Lindhardらの理論は、半古典論である。すなわち衝突は古典的に扱い、散乱ポテンシャルとして量子力学におけるThomas-Fermi (TF) ポテンシャルを用いている。

まず、y-z平面での粒子の散乱を考える（図1参照）。重心系での散乱角を考える。入射粒子が散乱ポテンシャルの影響を受けないくらい十分遠くから、z軸に沿って進んでいるとする。ここで、衝突係数 p は、十分大きいとする。このような条件ではインパルス近似が適用できる。これは、多粒子系を標的とする衝突過程において、入射粒子のエネルギーが十分高い場合には、相互作用の時間が非常に短いので、入射粒子と個々の標的構成粒子とが1回だけ相互作用し、そのときは他の標的内粒子の相互作用の影響を受けないという近似である。こ

の近似の下では、多粒子系との衝突を、個々の粒子との相互作用による素過程の重ね合わせとして記述できる。

入射速度は v_0 、換算質量は μ とする。散乱角は小さいとして θ とおく。入射粒子が、散乱ポテンシャルの影響を受けて、 y 方向の運動量を得る。こうして小さな角度 θ で散乱されるとする。TFポテンシャルを $V(r)$ とする。変数 r は、入射粒子とポテンシャルの中心との間の距離である。この時の散乱角 θ (重心系) は $z = v_0 t$ に注意して、

$$\theta = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\partial}{\partial y} V((y^2 + z^2)^{1/2}) dt}{\mu v_0} = -\frac{1}{\mu v_0^2} \frac{\partial}{\partial y} \int_{-\infty}^{\infty} V((y^2 + z^2)^{1/2}) dz \quad (2-1-1)$$

で表せる。上式において t は、時間を表している。ポテンシャル $V(r)$ と、遮蔽定数 a は、以下の通りである。

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} u\left(\frac{r}{a}\right) \quad (2-1-2)$$

$$a = \frac{0.8853 a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (2-1-3)$$

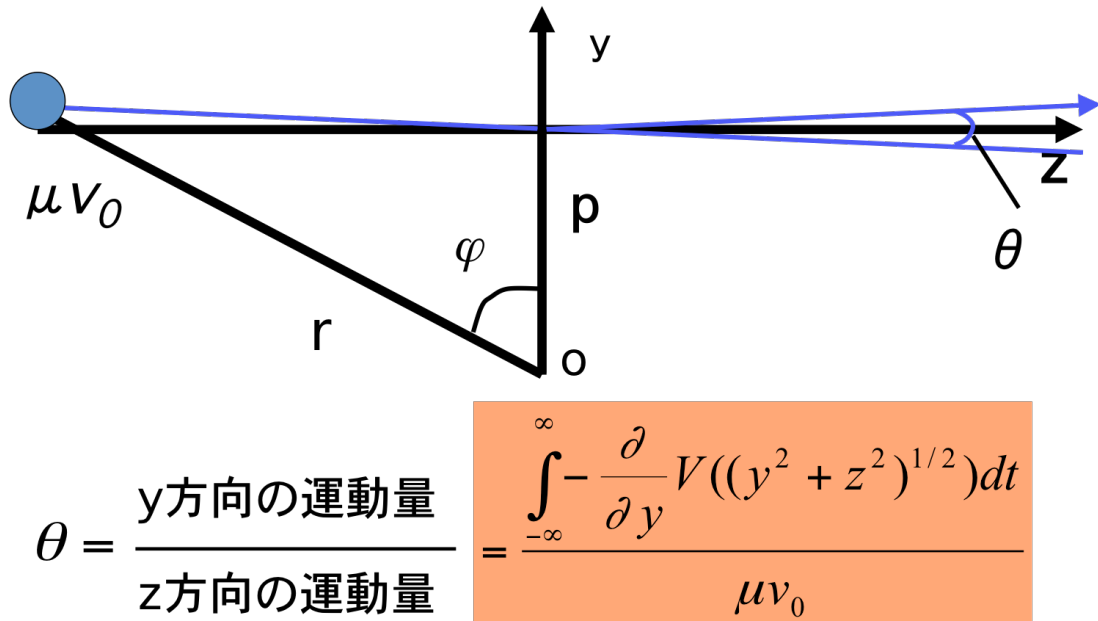


図 1: インパルス近似の概念図。この図では、粒子は y - z 平面を運動している。運動量は μv_0 、衝突係数は p 、ポテンシャル中心から粒子までの距離を r 、微少散乱角を θ としている。

ここで、 $u(r/a)$ は、TFの遮蔽関数である。この遮蔽関数は、多くの研究者によって、いろいろの形が提案されている。また、 a_0 は、ボーア半径、 e は、電気素量、 Z_1 、 Z_2 は、それぞれ入射粒子および標的原子の原子番号である。ここで、 r と y 軸との間の角度を φ と置く。また、 $z = y \tan(\varphi)$ 、 $r = y / \cos(\varphi)$ の関係が成り立つ事、および、 $y \approx p$ という近似を用いると、式 (2-1-1) は (積分範囲の変更に注意)、

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{2Z_1Z_2e^2}{\mu v_0^2} \left\{ -\frac{\partial}{\partial p} \int_0^{\infty} \frac{1}{r} u\left(\frac{r}{a}\right) dz \right\} \\ &= b \left\{ -\frac{\partial}{\partial p} \int_0^{\infty} \frac{1}{r} u\left(\frac{r}{a}\right) dz \right\} \end{aligned} \quad (2-1-4)$$

ここで、

$$z = p \tan(\varphi) \quad (2-1-5)$$

なので、

$$dz = \frac{p}{\cos^2(\varphi)} d\varphi \quad (2-1-6)$$

となる。また、

$$\begin{aligned} r &= (p^2 + z^2)^{1/2} \\ &= [p^2 (1 + \tan^2(\varphi))]^{1/2} \\ &= \frac{p}{\cos(\varphi)} \end{aligned} \quad (2-1-7)$$

である。そして、

$$u\left(\frac{(p^2 + z^2)^{1/2}}{a}\right) = u\left(\frac{p}{a \cos(\varphi)}\right) \quad (2-1-8)$$

となる。積分範囲は、 $0 \leq z \leq \infty$ から $0 \leq \varphi \leq \pi/2$ となることに気をつけると、

$$\begin{aligned} \theta &= b \left\{ -\frac{\partial}{\partial p} \int_0^\infty \frac{1}{(p^2 + z^2)^{1/2}} u\left(\frac{(p^2 + z^2)^{1/2}}{a}\right) dz \right\} \\ &= b \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{2} \frac{2p}{(p^2 + z^2)^{3/2}} u - \frac{1}{(p^2 + z^2)^{1/2}} u' \frac{1/2 (p^2 + z^2)^{-1/2} 2p}{a} \right\} dz \\ &= b \int_0^{\pi/2} \left\{ p \frac{\cos^3(\varphi)}{p^3} u\left(\frac{p}{a \cos(\varphi)}\right) - \frac{p}{a} \frac{\cos^2(\varphi)}{p^2} u'\left(\frac{p}{a \cos(\varphi)}\right) \right\} \frac{p}{\cos^2(\varphi)} d\varphi \\ &= \frac{b}{p} \int_0^{\pi/2} \cos(\varphi) d\varphi \left\{ u\left(\frac{p}{a \cos(\varphi)}\right) - \frac{p}{a \cos(\varphi)} u'\left(\frac{p}{a \cos(\varphi)}\right) \right\} \\ &= \frac{b}{p} g_L\left(\frac{p}{a}\right) \end{aligned} \quad (2-1-9)$$

$$g_L\left(\frac{p}{a}\right) = \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos(\varphi) \left\{ u\left(\frac{p}{a \cos(\varphi)}\right) - \frac{p}{a \cos(\varphi)} u'\left(\frac{p}{a \cos(\varphi)}\right) \right\} \quad (2-1-10)$$

となる。上式は、散乱角 θ と衝突係数 p との関係を示している。ここで、 b は Rutherford 散乱における最近接距離である。

Lindhard らは、式 (2-1-9) の左辺を、 $\theta \rightarrow 2\sin(\theta/2)$ という置き換えを行った。インパルス近似によって求めた小角散乱の式を、大角散乱を含むように置き換えたことになる。そして、逆べき乗のポテンシャルを用いて、微分散乱断面積 $d\sigma$ を評価した。すると、 θ も $2\sin(\theta/2)$ も同じ表式を与えることがわかった。この事が、左辺の置き換え、 $\theta \rightarrow 2\sin(\theta/2)$ を行っても良い理由である。逆べき乗のポテンシャルを用いた評価は、付録 (6. 1.) に記述する。

次に、 $t^{1/2} = \varepsilon \sin(\theta/2)$ および $\varepsilon = a/b$ という量を用いると式 (2-1-9) は、

$$2\varepsilon \sin(\theta/2) = \frac{a}{p} g_L\left(\frac{p}{a}\right) \quad (2-1-11)$$

と書いて、上式の左辺は

$$2t^{1/2} = \frac{a}{p} g_L\left(\frac{p}{a}\right) \quad (2-1-12)$$

と書ける。ここで簡単のために $X = p/a$ と置く。すると、

$$\frac{X}{g_L(X)} = \frac{1}{2t^{1/2}} \quad (2-1-13)$$

と書いて、さらに微分すると、

$$\left(\frac{X}{g_L(X)} \right)' dX = -\frac{1}{4} t^{-3/2} dt \quad (2-1-14)$$

となる。そして、

$$XdX = \frac{1}{a^2} p dp \quad (2-1-15)$$

を用いると、微分散乱断面積 $d\sigma = 2\pi p dp$ は、

$$\begin{aligned} d\sigma &= 2\pi p dp \\ &= 2\pi a^2 X dX \\ &= 2\pi a^2 X \left(\frac{-\frac{1}{4} t^{-3/2} dt}{\left(\frac{X}{g_L} \right)'} \right) \end{aligned} \quad (2-1-16)$$

と書ける。

最終的にLindhardらは、次の微分散乱断面積を得た。

$$d\sigma = 2\pi p dp = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f_L(t^{1/2}) \quad (2-1-17)$$

ここで $f_L(t^{1/2})$ は、

$$\begin{aligned} f_L(t^{1/2}) &= X \frac{1}{\frac{d}{dX} \left(\frac{X}{g_L(X)} \right)} \\ &= X \frac{g_L^2(X)}{\left(g_L(X) - X \frac{dg_L}{dX} \right)} \end{aligned} \quad (2-1-18)$$

である。Lindhardらによって導入された関数 $f_L(t^{1/2})$ は散乱関数と呼ばれ、 $t^{1/2} [= \varepsilon \sin(\theta/2)]$ による散乱強度の変化を示している。この関数 $f_L(t^{1/2})$ の数表が、彼らの論文 [1] に示されている。

次に、Lindhardらによって求められた核的阻止断面積について述べる。まず重心系での弾性散乱によるエネルギー輸送の式は、

$$T = T_m \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (2-1-19)$$

$$T_m = \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2} E \quad (2-1-20)$$

$$E = \frac{1}{2} m_1 v^2 \quad (2-1-21)$$

で与えられる [2]。そして阻止断面積は以下のように書かれる。

$$S = \int T d\sigma = T_m \int \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) d\sigma \quad (2-1-22)$$

入射粒子が物質中を進んだ距離を R_{nuc} 、単位体積あたりの標的原子数を n とする。
そして、下記の無次元の値を定義する。

$$\rho = R_{nuc} n m_2 4\pi a^2 \frac{m_1}{(m_1 + m_2)^2} \quad (2-1-23)$$

上記の値を用いて、無次元の阻止断面積を次のように表す。

$$\begin{aligned} s(\varepsilon) &= NS \frac{\varepsilon}{E} \frac{R_{nuc}}{\rho} \\ &= n T_m \int \sin^2(\theta/2) d\sigma \frac{\varepsilon}{E} \frac{R_{nuc}}{\rho} \\ &= n \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{1}{\varepsilon^2} \int_0^\varepsilon dt t \pi a^2 \frac{f_L(t^{1/2})}{2t^{3/2}} \varepsilon R_{nuc} \frac{(m_1 + m_2)^2}{R_{nuc} n m_2 4\pi a^2 m_1} \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \int_0^\varepsilon dt t^{-1/2} \frac{f_L(t^{1/2})}{2} \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \int_0^\varepsilon dt t^{1/2} f_L(t^{1/2}) \end{aligned} \quad (2-1-24)$$

上式が、Lindhard らによって導入された無次元の核的阻止断面積である。

2. 2. SigmundおよびWinterbonの多重散乱理論によるビームの角度広がり

前節 2. 1. でLindhardらが導いたのは1回の散乱衝突に対する式であった。SigmundおよびWinterbon (SW) (1974) は、小角近似を用いて多重散乱理論を構築した [3]。SW理論で使われている仮定は、以下の通りである。

- ① 標的内の原子配列は、ランダムで均質であるとする
- ② 標的内にある原子の原子核との衝突のみを考える
- ③ 二体衝突を仮定する
- ④ 一回衝突での散乱角は小さい
- ⑤ 方位角に対しては対称な散乱
- ⑥ 入射粒子のエネルギー損失を無視する
- ⑦ 入射粒子は中性であるとする。

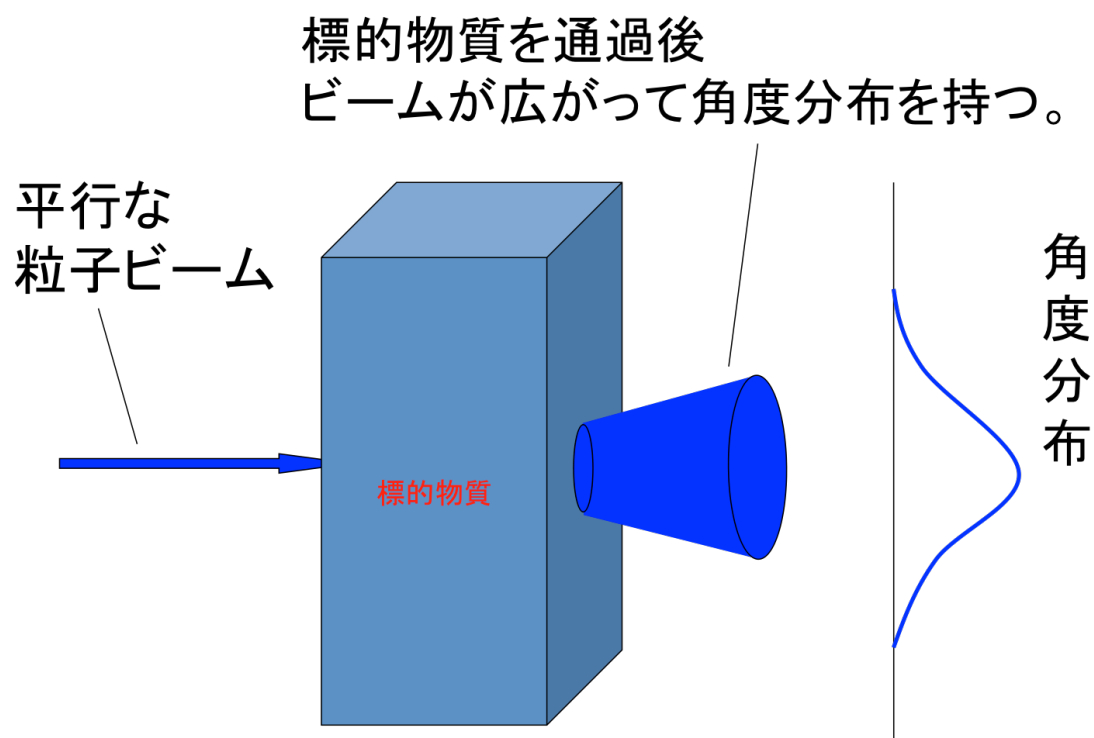


図 2：小角多重散乱の概念図。平行なビームが物質を通過して角度分布を持つ。

次に、SWの小角多重散乱の理論式の導出について述べる。輸送方程式を立て、それをフーリエ変換することによって理論式を導出することができる。ここで、図3のように入射粒子の初期の進行方向を、 x 軸方向にとる。そして、 x 軸に対して垂直なベクトル $\vec{\alpha}$ で粒子の散乱された角度を表す。

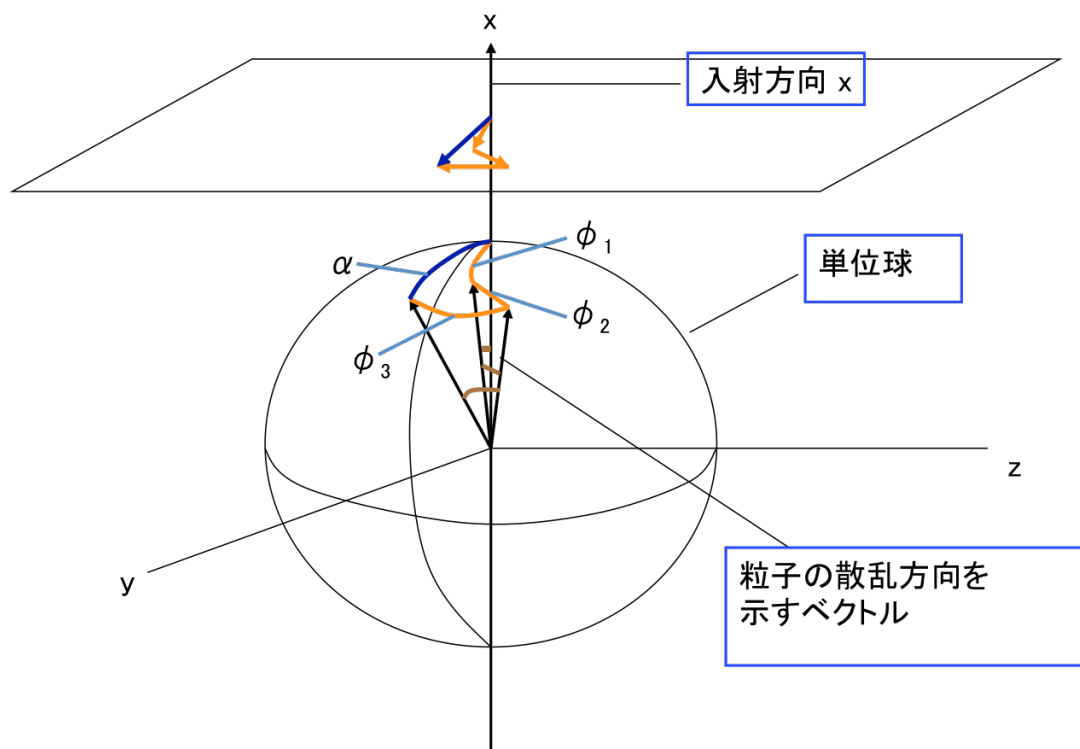


図 3: 小角多重散乱の概念図。 ϕ_1 、 ϕ_2 、 ϕ_3 はそれぞれ1回の衝突による散乱角、 α は全散乱角である。よくコリメートされた入射粒子は、 x 軸に沿って進むとする。

今、標的物質中を進む粒子について考える。物質内での粒子の位置を x 、 x まで進んだときの散乱角を $\vec{\alpha}'$ とする。いま、その粒子が物質内を δx 進んだとする。このような場合、次の二つの現象が考えられる。それは、弾性散乱を受けて、粒子の軌道が $\vec{\alpha}'$ から $\vec{\alpha}$ へ変わる現象。および、散乱を受けずにまっすぐに進む現象である。ゆえに、位置が $x + \delta x$ 、角度が $\vec{\alpha}$ の粒子の分布関数 $f(x + \delta x, \vec{\alpha})$ は次の輸送方程式で表せられる。

$$f(x+\delta x, \vec{\alpha}) = N\delta x \int d\sigma (\vec{\alpha}' \rightarrow \vec{\alpha}) f(x, \vec{\alpha}') + [1 - N\delta x \int d\sigma (\vec{\alpha} \rightarrow \vec{\alpha}')] f(x, \vec{\alpha}) \quad (2-2-1)$$

ここで、 N は、標的原子の数密度である。さらに、方位角に対しては対称な散乱であるという仮定を用いる。なお、 $\vec{\alpha}' = \vec{\alpha} + \vec{\phi}$ である。そして、 $\delta x \rightarrow 0$ の極限をとることで次の式が得られる。

$$-\frac{\partial f(x, \vec{\alpha})}{\partial x} = N \int d\sigma(\phi) [f(x, \vec{\alpha}) - f(x, \vec{\alpha} + \vec{\phi})] \quad (2-2-2)$$

ここで、 $|\vec{\phi}| = |\vec{\alpha} - \vec{\alpha}'|$ である。上式を解くために、フーリエ変換を行う。2次元のフーリエ変換を次のように定義する。

$$f(x, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{k} \tilde{f}(x, \vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\alpha}} \quad (2-2-3)$$

$$\tilde{f}(x, \vec{k}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{\alpha} f(x, \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\alpha}} \quad (2-2-4)$$

ベクトル \vec{k} は、角度ベクトル $\vec{\alpha}$ のフーリエ成分である。そして、上記のフーリエ変換を行うと、

$$\frac{\partial \tilde{f}(x, \vec{k})}{\partial x} = -N \tilde{f}(x, \vec{k}) \int d\sigma(\phi) [1 - e^{i\vec{k} \cdot \vec{\phi}}] \quad (2-2-5)$$

となる。上式を解くと、

$$\tilde{f}(x, \vec{k}) = C \exp[-N A(k) x] \quad (2-2-6)$$

$$A(\vec{k}) = \int d\sigma(\phi) (1 - \exp[i\vec{k} \cdot \vec{\phi}]) \quad (2-2-7)$$

となる。そして、初期条件 $f(0, \alpha) = \delta(\alpha)$ を用いると、係数 C は以下のように決まる。

$$\begin{aligned}
C &= \tilde{f}(0, \vec{k}) \\
&= \frac{1}{2\pi}
\end{aligned} \tag{2-2-8}$$

ここで、フーリエ成分のベクトル \vec{k} と実空間のベクトル $\vec{\phi}$ との間の角を方位角 χ と等しくとる。式 (2-2-7) において方位角 χ について積分する。 $d\Omega'$ を立体角とし、 $\Theta(\phi)$ を ϕ 方向の微分断面積とする。そして、散乱角が小さいという近似より $d\sigma(\phi) = \Theta(\phi)d\Omega' = 2\pi\Theta(\phi)\phi d\phi$ が成り立つ。また $d\sigma(\phi)$ は方位角には依らないので、

$$\begin{aligned}
A(k) &= \int_0^\infty \Theta(\phi) \phi d\phi \, 2\pi \left[1 - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\chi \exp[ik\phi \cos(\chi)] \right] \\
&= \int_0^\infty d\sigma(\phi) [1 - J_0(k\phi)]
\end{aligned} \tag{2-2-9}$$

となる。ここで、式 (2-2-6) を式 (2-2-3) に代入する。そして、式 (2-2-10) において方位角 χ に対する積分を式 (2-2-7) と同様に計算する。すると、

$$\begin{aligned}
f(x, \vec{\alpha}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k} e^{-NA(k)x} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\alpha}} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk k \int_0^{2\pi} d\chi e^{-NA(k)x} e^{ik\alpha \cos(\chi)} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk k e^{-NA(k)x} J_0(k\alpha)
\end{aligned} \tag{2-2-10}$$

となる。ゆえに立体角 $d\Omega$ に散乱される粒子数は、

$$f(x, \vec{\alpha})d\Omega = \frac{d\Omega}{2\pi} \int_0^\infty dk k e^{-NA(k)x} J_0(k\alpha) \tag{2-2-11}$$

となる。 J_0 は、第1種0次のベッセル関数である。また、上式を次のように簡単に書くことができる。

$$f(x, \tilde{\alpha}) d\Omega = \tilde{\alpha} d\tilde{\alpha} f_1(\tau, \tilde{\alpha}) \quad (2-2-12)$$

$$f_1(\tau, \tilde{\alpha}) = \int_0^\infty dz z \exp[-\tau \Delta(z)] J_0(z \tilde{\alpha}) \quad (2-2-13)$$

ここで、

$$\Delta(z) = \int_0^\infty d\tilde{\phi} \frac{f_L(\tilde{\phi})}{\tilde{\phi}^2} [1 - J_0(z \tilde{\phi})] \quad (2-2-14)$$

は無次元の輸送断面積である。そして、

$$\tilde{\phi} = t^{1/2} = E_0 a \phi / (2Z_1 Z_2 e^2) \quad (2-2-15)$$

$$\tau = \pi a^2 N x \quad (2-2-16)$$

$$\tilde{\alpha} = E_0 a \alpha / (2Z_1 Z_2 e^2) \quad (2-2-17)$$

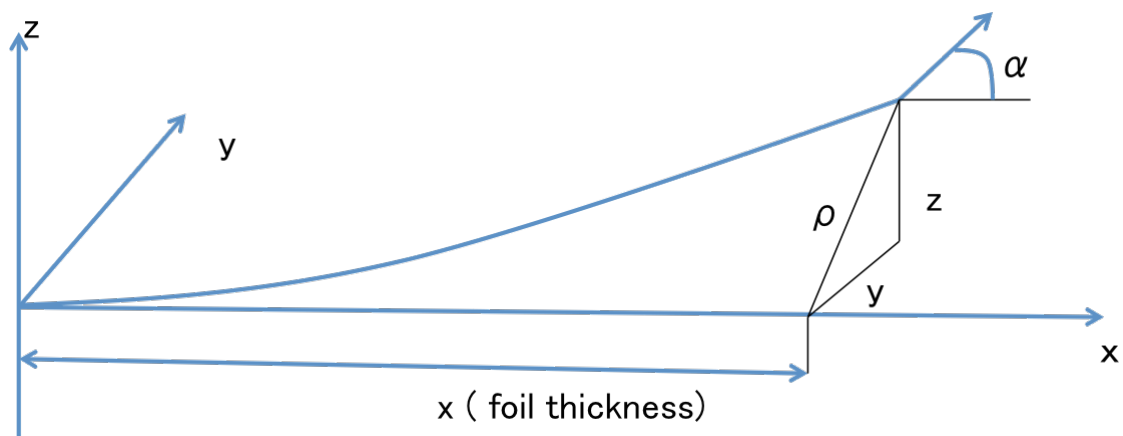
$$z = k 2Z_1 Z_2 e^2 / (E_0 a) \quad (2-2-18)$$

である。 $\tilde{\phi}$ は実験室系における一回衝突の換算された散乱角、 τ は換算された膜厚、 $\tilde{\alpha}$ は換算された出射角、 $f(x, \tilde{\alpha})$ のフーリエ成分の変数 k を換算したものが z 、そして E_0 は入射粒子の入射エネルギーである。

式 (2-2-13) は、Meyer によっても独立に求められている [付録 6. 2. 参照]。Meyer の導出方法では、 $f_1(\tau, \tilde{\alpha}) + f_2(\tau, \tilde{\alpha})$ というふうに 2 項の和で多重散乱関数が表されている。ただし Meyer の導出方法は、換算されたエネルギー ε が無限大と見なせるような場合 (高エネルギー) にのみ有効である。したがって、本研究では SW の方法で導かれた $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ のみで議論を進める。

2. 3. MarwickおよびSigmundの多重散乱理論によるビームの横広がり

MarwickおよびSigmund (MS) は、前出の小角多重散乱理論を応用して、標的物質通過後のビームのフォイル面での横広がり (lateral spread) に関するモデルを提案した [4]。図4はビームの横広がりの概念図で、 ρ はフォイル面 (標的薄膜通過直後) でのビームの広がり を意味している。 α は薄膜通過後のビームの角度を示している。



$$\rho = (y^2 + z^2)^{1/2}$$

図 4：ビームの横広がりの概念図。厚さ x の薄膜通過後のフォイル面でのビームの横広がり ρ を示している。

MSモデルの理論式の導出は、SW理論と同様に、輸送方程式から始まる。粒子が物質中を δx 進んだときの分布関数を $F_{MS}(x + \delta x, \vec{\rho}, \alpha)$ と置く。 $\vec{\rho}$ は、粒子ビームが物質中で広がった幅を示すベクトルである。また、MS理論で前提となっている仮定は、SW理論と同じである。この時、輸送方程式は、以下のように書ける。

$$F_{MS}(x+\delta x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = N\delta x \int d\sigma(\vec{\alpha}' \rightarrow \vec{\alpha}) F_{MS}(x, \vec{\rho}', \vec{\alpha}') \\ + (1 - N\delta x \int d\sigma(\vec{\alpha} \rightarrow \vec{\alpha}')) F_{MS}(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) \quad (2-3-1)$$

ここで、

$$\vec{\alpha}' = \vec{\alpha} + \vec{\phi} \quad (2-3-2)$$

$$\vec{\rho}' = \vec{\rho} - x\vec{\phi} \quad (2-3-3)$$

$$|\vec{\phi}| = |\vec{\alpha} - \vec{\alpha}'| \quad (2-3-4)$$

とする。これらの置き換え式で、 $\vec{\phi}$ は 1 回衝突による散乱角、 $x\vec{\phi}$ は 1 回の散乱によるビームの角度広がりである。さらに、以下の定義を用いる。

$$\vec{\rho}_1 = \vec{\rho} - x\vec{\alpha} \quad (2-3-5)$$

$$F_{MS}(x, \vec{\rho}_1 + x\vec{\alpha}, \vec{\alpha}) \equiv f_{MS}(x, \vec{\rho}_1, \vec{\alpha}) \quad (2-3-6)$$

$$F_{MS}(x, \vec{\rho}_1 + x\vec{\alpha} + x\vec{\phi}, \vec{\alpha} + \vec{\phi}) \equiv f_{MS}(x, \vec{\rho}_1 + x\vec{\phi}, \vec{\alpha} + \vec{\phi}) \quad (2-3-7)$$

すると、SW理論と同様の取り扱いの後、式(2-3-1)は、次のように書ける。

$$-\frac{\partial f_{MS}(x, \vec{\rho}_1, \vec{\alpha})}{\partial x} = N \int d\sigma(\phi) [f_{MS}(x, \vec{\rho}_1, \vec{\alpha}) - f_{MS}(x, \vec{\rho}_1 - x\vec{\phi}, \vec{\alpha} + \vec{\phi})] \quad (2-3-8)$$

ここで、4次元のフーリエ変換を次のように定義する。

$$f_{MS}(x, \vec{\rho}_1, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{q} \int d\vec{k} \tilde{f}_{MS}(x, \vec{q}, \vec{k}) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{\alpha} + \vec{k} \cdot \vec{\rho}_1)} \quad (2-3-9)$$

$$\tilde{f}_{MS}(x, \vec{k}, \vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{\alpha} \int d\vec{\rho}_1 f_{MS}(x, \vec{\rho}_1, \vec{\alpha}) e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{\alpha} + \vec{k} \cdot \vec{\rho}_1)} \quad (2-3-10)$$

\vec{q} および \vec{k} は、それぞれ角度 $\vec{\alpha}$ および横広がり $\vec{\rho}_1$ のフーリエ成分である。式 (2-3-8) は、次のように書ける。

$$-\frac{\partial}{\partial x}\tilde{f}_{MS}(x,\vec{\kappa},\vec{q})=N\tilde{f}_{MS}(x,\vec{\kappa},\vec{q})\left(\int d\sigma(\phi)-\int d\sigma(\phi)e^{i(\vec{q}\cdot\vec{\phi}+\vec{\kappa}\cdot x\vec{\phi})}\right) \quad (2-3-11)$$

上記の方程式を解き、そして初期条件、 $f_{MS}(0,\vec{\rho}_1,\vec{\alpha})=\delta(\vec{\rho}_1)\delta(\vec{\alpha})$ 、を用いて下記の式を得る。

$$\tilde{f}_{MS}(x,\vec{\kappa},\vec{q})=\frac{1}{(2\pi)^2}e^{-N\int_0^x dx'\sigma(\vec{q}+\vec{\kappa}x')} \quad (2-3-12)$$

$$\sigma(\vec{q}+\vec{\kappa}x')=\int d\sigma(\phi)\left(1-e^{i(\vec{q}\cdot\vec{\phi}+\vec{\kappa}\cdot x'\vec{\phi})}\right) \quad (2-3-13)$$

従って、 $f_{MS}(x,\vec{\rho}_1,\vec{\alpha})$ は次のように書ける。

$$f_{MS}(x,\vec{\rho}_1,\vec{\alpha})=\frac{1}{(2\pi)^4}\int d\vec{q}\int d\vec{\kappa}e^{i(\vec{q}\cdot\vec{\alpha}+\vec{\kappa}\cdot\vec{\rho}_1)}e^{-N\int_0^x dx'\sigma(\vec{q}+\vec{\kappa}x')} \quad (2-3-14)$$

ここで、角度 α で積分を行う。

$$\begin{aligned} \int d\vec{\alpha}F_{MS}(x,\vec{\rho},\vec{\alpha}) &= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{\alpha}\int d\vec{q}\int d\vec{\kappa}e^{i\vec{q}\cdot\vec{\alpha}}e^{i\vec{\kappa}\cdot(\vec{\rho}-x\vec{\alpha})}e^{-N\int_0^x dx'\sigma(\vec{q}+\vec{\kappa}x')} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{\alpha}\int d\vec{q}\int d\vec{\kappa}e^{i\vec{\alpha}\cdot(\vec{q}-x\vec{\kappa})}e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{\rho}}e^{-N\int_0^x dx'\sigma(\vec{q}+\vec{\kappa}x')} \end{aligned} \quad (2-3-15)$$

さらに $x' \rightarrow x' - x$ と置く。

$$\int d\alpha F_{MS}(x,\vec{\rho},\vec{\alpha})=\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{\kappa}e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{\rho}}e^{-N\int_0^x dx'\sigma(\vec{\kappa}x')} \quad (2-3-16)$$

次に、式 (2-3-16) 中の関数 σ の具体的な式を示す。

$$\sigma(\vec{\kappa}x')=\int_0^\infty d\sigma(\phi)[1-J_0(\kappa\phi x')] \quad (2-3-17)$$

ここで、次の変数変換を行う。

$$\kappa x' = k' \quad (2-3-18)$$

$$\rho \rightarrow \frac{\rho}{x} \quad (2-3-19)$$

すると、最終的に、次の式を得る。

$$G_{MS}(x, \bar{\rho}) d^2 \rho = \frac{\rho}{x} d\left(\frac{\rho}{x}\right) \int_0^\infty k dk J_0\left(k \frac{\rho}{x}\right) e^{-Nx \frac{1}{k} \int_0^k dk' \sigma(k')} \quad (2-3-20)$$

さらに、次の換算された量を定義する。

$$\tilde{\rho} = \pi a^2 N \frac{Ea}{2Z_1 Z_2 e^2} \rho \quad (2-3-21)$$

そして、前出の、(2-2-15)、(2-2-16)、(2-2-18)を用いる。すると、

$$\sigma(k') \rightarrow \pi a^2 \Delta(z') \quad (2-3-22)$$

と書ける。 $\Delta(z)$ は、(2-2-14)と同じである。上記の換算された量を使うと、

$$G_{MS}(x, \bar{\rho}) d^2 \rho \rightarrow g(\tau, \tilde{\rho}) = \frac{\tilde{\rho}}{\tau} d\left(\frac{\tilde{\rho}}{\tau}\right) \int_0^\infty z dz J_0\left(z \frac{\tilde{\rho}}{\tau}\right) e^{-\tau \frac{1}{z} \int_0^z dz' \Delta(z')} \quad (2-3-23)$$

を得る。ここで、 τ は式 (2-2-16) と同じである。上式が、Marwick および Sigmund によって得られた、薄膜通過後のフォイル面でのビームの横広がりの理論式である。

2. 4. Sigmundらのビームの角度広がりおよび横広がりに関するCombinedモデル

Sigmundらは、文献 [5] において、ビームの角度広がりと横広がりを含む 1 つの表式を導出した。これは、Combinedモデルと呼ばれている。Combinedモデルの導出は、式 (2-3-7) より始まる。

$$-\frac{\partial F_{Com}(x, \vec{\rho}_1, \vec{\alpha})}{\partial x} = N \int d\sigma(\phi) \left[F_{Com}(x, \vec{\rho}_1 + x\vec{\alpha}, \vec{\alpha}) - F_{Com}(x, \vec{\rho}_1 + x\vec{\alpha} - x\vec{\phi}, \vec{\alpha} + \vec{\phi}) \right] \quad (2-4-1)$$

次に、式 (2-3-9) および式 (2-3-10) と、同じフーリエ変換を定義する。ここで、初期条件、 $f_{Com}(0, \vec{\rho}_1, \vec{\alpha}) = \delta(\vec{\rho}_1)\delta(\vec{\alpha})$ 、および、次式に注意する。

$$F_{Com}(x, \vec{\rho}_1 + x\vec{\phi}, \vec{\alpha}) \equiv f_{Com}(x, \vec{\rho}_1, \vec{\alpha}) \quad (2-4-2)$$

$$\vec{\rho}_1 = \vec{\rho} - x\vec{\alpha} \quad (2-4-3)$$

すると、

$$F_{Com}(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\vec{k} \int d\vec{k}' e^{i[\vec{k} \cdot (\vec{\rho} - x\vec{\alpha}) + \vec{k}' \cdot \vec{\alpha}]} e^{-N \int_0^x dx' \sigma_0(\vec{k} - x'\vec{k}')} \quad (2-4-4)$$

を得る。また、以下のように定義をする。

$$F_{Com}(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) d^2\alpha d^2\rho \equiv G(x, \vec{\beta}, \vec{\alpha}) d^2\alpha d^2\beta \quad (2-4-5)$$

さらに積分変数を変える。

$$\vec{k} \cdot (\vec{\rho} - x\vec{\alpha}) \rightarrow (\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{\beta} \quad (2-4-6)$$

$$x'\vec{k} \rightarrow t(\vec{k} - \vec{k}') \quad (2-4-7)$$

すると次式を得る。

$$G(x, \beta, \alpha) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{\alpha} - \vec{\beta})} \int d\vec{k}' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{\beta}} e^{-N\alpha \int_0^1 dt \sigma_0((1-t)\vec{k} + t\vec{k}')} \quad (2-4-8)$$

次に、0次のモーメントを求める。

$$\begin{aligned}\int d^2\beta G(x, \vec{\beta}, \vec{\alpha}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2k e^{i\vec{k} \cdot \vec{\alpha}} e^{-Nx\sigma_0(\vec{k})} \\ &\equiv F(x, \vec{\alpha})\end{aligned}\tag{2-4-9}$$

$$\begin{aligned}\int d^2\alpha G(x, \vec{\beta}, \vec{\alpha}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2k' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{\beta}} e^{-Nx \int_0^1 dt \sigma_0(t\vec{k}')} \\ &\equiv G(x, \vec{\beta})\end{aligned}\tag{2-4-10}$$

次に、 $\sigma_0(\vec{k})$ が k のべき乗で表せると仮定する。つまり、

$$\sigma_0(\vec{k}) = C_{const} k^{2m_c}\tag{2-4-11}$$

とする。すると、次の結果を得る。

$$\nabla_k \sigma_0(\vec{k}) = 2m_c \frac{\vec{k}}{k^2} \sigma_0(\vec{k})\tag{2-4-12}$$

そして、次の関数を定義する。

$$g(\vec{k}, \vec{k}') \equiv \int dt \sigma_0((1-t)\vec{k} + t\vec{k}')\tag{2-4-13}$$

さらに、

$$g(\vec{k}, \vec{k}') = g(\vec{k}', \vec{k})\tag{2-4-14}$$

とする。すると

$$\begin{aligned}
g(\vec{k}, 0) &= C_{const} k^{2m_c} \int_0^1 dt (1-t)^{2m_c} \\
&= C_{const} k^{2m_c} \frac{1}{2m_c + 1} \\
&= \frac{1}{2m_c + 1} \sigma_0(k)
\end{aligned} \tag{2-4-15}$$

次に、 $g(\vec{k}, \vec{k}')$ が線形であると仮定する。

$$g(\vec{k}, \vec{k}') \approx A[\sigma_0(a_c \vec{k} + b_c \vec{k}') + \sigma_0(b_c \vec{k} + a_c \vec{k}')] \tag{2-4-16}$$

Sigmundらは、 $A=1/2$ として a_c および b_c を求めている。上式で $\vec{k}' = \vec{k}$ の場合を考える。すると、

$$\begin{aligned}
g(\vec{k}, \vec{k}) &= 2A\sigma_0([a_c + b_c]k) \\
&= \sigma_0(k)
\end{aligned} \tag{2-4-17}$$

を得る。 $\vec{k} = 0$ の時を考える。

$$\begin{aligned}
g(0, \vec{k}') &= A[\sigma_0(a_c \vec{k}') + \sigma_0(b_c \vec{k}')] \\
&= \int_0^1 dt \sigma_0(t\vec{k}')
\end{aligned} \tag{2-4-18}$$

さらに、

$$\begin{aligned}
\sigma_0(k) &= C_{const} k^{2m} \\
&= 2AC_{const} (a_c + b_c)^{2m} k^{2m}
\end{aligned} \tag{2-4-19}$$

上式より

$$2A(a_c + b_c)^{2m} = 1 \tag{2-4-20}$$

を得る。次に、式 (2-4-18) は、

$$A[\sigma_0(a_c \vec{k}') + \sigma_0(b_c \vec{k}')] = A[C(a_c \vec{k}')^{2m} + C(b_c \vec{k}')^{2m}] \tag{2-4-21}$$

となり、また

$$\begin{aligned}
\int_0^1 dt \sigma_0(t\vec{k}') &= \int_0^1 dt C(t\vec{k}')^{2m} \\
&= C\vec{k}'^{2m} \int_0^1 dt t^{2m} \\
&= C\vec{k}'^{2m} \frac{1}{2m+1}
\end{aligned} \tag{2-4-22}$$

を得る。したがって、

$$A(a_c^{2m_c} + b_c^{2m_c}) = \frac{1}{2m_c + 1} \tag{2-4-23}$$

と求まる。ここで、次の関係式を導入する。

$$\begin{aligned}
a_c \vec{k} + b_c \vec{k}' &= \vec{k}_1, \\
b_c \vec{k} + a_c \vec{k}' &= \vec{k}_2
\end{aligned} \tag{2-4-24}$$

上式より、

$$\begin{aligned}
\vec{k} &= \left(\frac{a_c^2}{a_c^2 - b_c^2} \right) \left(\frac{1}{a_c} \vec{k}_1 - \frac{b_c}{a_c^2} \vec{k}_2 \right) \\
&= \frac{1}{(a_c + b_c)(a_c - b_c)} (a_c \vec{k}_1 - b_c \vec{k}_2)
\end{aligned} \tag{2-4-25}$$

$$\begin{aligned}
\vec{k}' &= \left(\frac{a_c^2}{a_c^2 - b_c^2} \right) \left(\frac{1}{a_c} \vec{k}_2 - \frac{b_c}{a_c^2} \vec{k}_1 \right) \\
&= \frac{1}{(a_c + b_c)(a_c - b_c)} (a_c \vec{k}_2 - b_c \vec{k}_1)
\end{aligned} \tag{2-4-26}$$

次に、2次の微少量を無視することで次式が得られる。

$$\begin{aligned}
d\vec{k} d\vec{k}' &= \frac{1}{(a_c + b_c)^2 (a_c - b_c)^2} (a_c d\vec{k}_1 - b_c d\vec{k}_2) (a_c d\vec{k}_2 - b_c d\vec{k}_1) \\
&\approx \frac{d\vec{k}_1 d\vec{k}_2}{(a_c - b_c)^2}
\end{aligned} \tag{2-4-27}$$

下の式に \vec{k} および \vec{k}' を代入して整理すると、

$$G(x, \beta, \alpha) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{\alpha} - \vec{\beta})} \int d\vec{k}' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{\beta}} e^{-N\chi A[\sigma_0(k_1) + \sigma_0(k_2)]} \quad (2-4-28)$$

を得る。次に上式の一部を整理する。

$$e^{i\vec{k} \cdot (\vec{\alpha} - \vec{\beta})} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{\beta}} = e^{i \frac{1}{(a_c + b_c)(a_c - b_c)} (a_c \vec{k}_1 - b_c \vec{k}_2) \cdot (\vec{\alpha} - \vec{\beta})} e^{i \frac{1}{(a_c + b_c)(a_c - b_c)} (a_c \vec{k}_2 - b_c \vec{k}_1) \cdot \vec{\beta}} \quad (2-4-29)$$

指数関数の肩のところのみ取り出して整理をする。このとき、 $a_c + b_c = 1$ に注意する。

$$\begin{aligned} & i \frac{1}{(a_c + b_c)(a_c - b_c)} \left[(a_c \vec{k}_1 - b_c \vec{k}_2) \cdot (\vec{\alpha} - \vec{\beta}) + (a_c \vec{k}_2 - b_c \vec{k}_1) \cdot \vec{\beta} \right] \\ &= i \frac{1}{(a_c - b_c)} \left[\vec{k}_1 \cdot (a_c \vec{\alpha} - \vec{\beta}) + \vec{k}_2 \cdot (\vec{\beta} - b_c \vec{\alpha}) \right] \end{aligned} \quad (2-4-30)$$

式 (2-4-28) は次のように表される。

$$\begin{aligned} G(x, \beta, \alpha) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{\alpha} - \vec{\beta})} \int d\vec{k}' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{\beta}} e^{-N\chi A[\sigma_0(k_1) + \sigma_0(k_2)]} \\ &= \frac{1}{(a - b)^2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k}_1 e^{i\vec{k}_1 \cdot \left[\frac{a_c \vec{\alpha} - \vec{\beta}}{a_c - b_c} \right]} e^{-\frac{N\chi}{2} \sigma_0(k_1)} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k}_2 e^{i\vec{k}_2 \cdot \left[\frac{\vec{\beta} - b_c \vec{\alpha}}{a_c - b_c} \right]} e^{-\frac{N\chi}{2} \sigma_0(k_2)} \\ &= \frac{1}{(a - b)^2} f\left(\frac{x}{2}, \frac{a_c \vec{\alpha} - \vec{\beta}}{a_c - b_c}\right) f\left(\frac{x}{2}, \frac{\vec{\beta} - b_c \vec{\alpha}}{a_c - b_c}\right) \end{aligned} \quad (2-4-31)$$

また、Sigmundらは数値計算の結果、 $a_c = 4/5$ 、 $b_c = 1/5$ 、 $m_c = 0.5$ という値を得た。そして、最終的にSigmundらは

$$G(x, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) \approx \frac{25}{9} f\left(\frac{x}{2}, \frac{4}{3} \vec{\alpha} - \frac{5}{3} \vec{\beta}\right) f\left(\frac{x}{2}, \frac{5}{3} \vec{\alpha} - \frac{1}{3} \vec{\beta}\right) \quad (2-4-32)$$

を得た。なお、式 (2-4-32) においては関数 G の変数の順序は、Sigmundらの表し方に従った。そして、式 (2-4-32) の右辺の関数 f はSW理論の式 (2-2-11) の

関数 $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ と同じである。さらに、式 (2-2-16) と式 (2-2-17) との表記にしたがって、式 (2-4-32) を次のように書くことができる。

$$G(\tau, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}) \approx \frac{25}{9} f\left(\frac{\tau}{2}, \frac{4}{3}\tilde{\alpha} - \frac{5}{3}\tilde{\beta}\right) f\left(\frac{\tau}{2}, \frac{5}{3}\tilde{\alpha} - \frac{1}{3}\tilde{\beta}\right) \quad (2-4-33)$$

2. 5. ValdesおよびAristaのエネルギー損失を考慮した多重散乱理論

ValdesとArista (VA) は、SW理論に電子的エネルギー損失を導入することに成功した [6]。ただしVA理論はエネルギー損失と膜厚を独立に取り扱っている。また、核的エネルギー損失を無視している。

VAは、阻止能をべき乗で仮定して、SW理論にエネルギー損失を導入した。この節では、その方法について説明する。VAは阻止能 S_{VA} を次の形で導入した。

$$S_{VA}(\beta_{VA}) \equiv \frac{d\beta_{VA}}{d\tau} = -\lambda\beta_{VA}^n \quad (2-5-1)$$

$$\beta_{VA}(\tau) = \frac{aE(x)}{2Z_1Z_2e^2} \quad (2-5-2)$$

ここで、 λ は係数、 β_{VA} は換算されたエネルギーである。そして、 $z' = k / \beta_{VA}(\tau')$ なので、

$$\begin{aligned} \int_0^\tau d\tau' \Delta(z') &= \int_{\beta_0}^{\beta_1} d\beta_{VA} \frac{1}{S_{VA}(\beta_{VA})} \Delta\left(\frac{k}{\beta_{VA}}\right) \\ &= -\int_0^{\beta_1} d\beta_{VA} \frac{1}{\lambda\beta_{VA}^n} \Delta\left(\frac{k}{\beta_{VA}}\right) + \int_0^{\beta_0} d\beta_{VA} \frac{1}{\lambda\beta_{VA}^n} \Delta\left(\frac{k}{\beta_{VA}}\right) \\ &= \frac{k^{1-n}}{\lambda} \left\{ \int_0^{z_1} dz'_1 \frac{\Delta(z'_1)}{z_1'^{2-n}} + \int_0^{z_0} dz'_0 \frac{\Delta(z'_0)}{z_0'^{2-n}} \right\} \\ &= \frac{k^{1-n}}{\lambda} \{ G_{VA}(z_1) + G_{VA}(z_0) \} \end{aligned} \quad (2-5-3)$$

ここで、 G_{VA} は、

$$G_{VA}(z) = \int_0^z dz' \frac{\Delta(z')}{z'^{2-n}} \quad (2-5-4)$$

である。なお、 $z_0 = k/\beta_{0VA}$ 、 $z_1 = k/\beta_{1VA}$ 、である。 β_{0VA} は入射エネルギーに対応し、 β_{1VA} は出射エネルギーに対応している。さらに、

$$\frac{1}{\lambda} = (1-n)\tau \frac{1}{\beta_{0VA}^{1-n} - \beta_{1VA}^{1-n}} \quad (2-5-5)$$

となる。したがって、

$$\tau\Delta(z) \rightarrow \tau\Delta_e(z, z/\mu_e) = \tau(1-n)z^{1-n} \frac{G_{VA}(z/\mu_e) - G_{VA}(z)}{1 - \mu_e^{1-n}} \quad (2-5-6)$$

$$f_1(\tau, \tilde{\alpha}) \rightarrow f_{VA1}(\tau, \tilde{\alpha}) \quad (2-5-7)$$

と書ける。なお、 $\mu_e = \beta_{1VA}/\beta_{0VA}$ 、 $z \equiv z_0$ 、 $z/\mu_e = z\beta_{0VA}/\beta_{1VA} = k/\beta_{1VA}$ 、である。式 (2-5-6) において、 $n=1/2$ とすると、電子的エネルギー損失を考慮することになる。なぜなら、式 (2-5-1) において $n=1/2$ の場合、阻止能が入射粒子の速度に比例しているからである。VAは相互作用ポテンシャルとしてZBLポテンシャル [7] を採用している。我々は後の第4章においてT-F-Moliere (TFM) ポテンシャル [8] を用いて数値計算を行った。

2. 6. Kanekoの低速重イオンに対する電子的エネルギー損失理論

本節で紹介するKanekoの理論 [9] は、Brandt-Kitagwa [1 0] モデルの改良である。BrandtおよびKitagwaは、入射粒子が低速の時には、入射粒子が束縛している電子による遮蔽効果が必要であることを理論的に説明した。さらにKanekoは、入射粒子が標的内で伝導電子による遮蔽を受けることを考慮した。以下では、Kanekoモデルの概要について説明する。導出の詳細は付録 6. 4. および 6. 5. を参照。

Kanekoは、入射粒子が標的内で受ける遮蔽効果を、Yukawa型ポテンシャルを用いて計算をした。すなわち V_{ne} および V_{ee} をそれぞれ核子-電子相互作用ポテンシャルおよび電子-電子相互作用ポテンシャルとすると

$$V_{ne}(r) = -\frac{Z_1 e^2}{r} e^{-k_{TF} r} \quad (2-6-1)$$

$$V_{ee}(r) = \frac{e^2}{r} e^{-k_{TF} r} \quad (2-6-2)$$

ここで、 k_{TF} は、Thomas-Fermi波数であり、以下のように定義されている。

$$k_{TF} = \left(\frac{4k_F}{\pi a_0} \right)^{1/2} = 1.564 / (r_s^{1/2} a_0) \quad (2-6-3)$$

k_F はFermi波数、 r_s は電子の体積を球で近似したときの半径である。そして、 a_0 はボーア半径である。1つの原子が N_e 個の電子を束縛しているとき、Yukawa型ポテンシャル V_Y を、

$$V_Y(r) = -\frac{N_e}{r} e^{-r/\Lambda} \quad (2-6-4)$$

と置く。上式より求めた電子密度は、

$$\rho_Y(r) = \frac{N_e}{4\pi\Lambda^3} \frac{\Lambda}{r} e^{-r/\Lambda} \quad (2-6-5)$$

ここで、 Λ はサイズパラメーターである。次に、原子が個体内にあるときを考える。そして、その原子によって束縛されている電子のトータルエネルギーを考える。

$$E_{tot} = E_k + E_{ne} + \mu E_{ee} \quad (2-6-6)$$

E_k は運動エネルギー、 E_{ne} は電子と核子の相互作用エネルギー、 E_{ee} は、電子電子相互作用エネルギーである。また、 μ は変分パラメーターである。

$$E_k = \frac{3\hbar^2}{10m_e} (3\pi^2)^{2/3} \int [\rho_Y(\vec{r})]^{5/3} d^3r \quad (2-6-7)$$

$$E_{ne} = \int V_{ne}(\vec{r}) \rho_Y(\vec{r}) d^3r \quad (2-6-8)$$

$$E_{ee} = \int V_{ee}(\vec{r} - \vec{r}') \rho_Y(\vec{r}) \rho_Y(\vec{r}') d^3r d^3r' \quad (2-6-9)$$

さらに、いくつかの計算の後、次のサイズパラメーターを得る。

$$\Lambda = \Lambda_0 / \left(1 - \frac{2}{3} k_{TF}^2 \Lambda_0^2 \right) \quad (2-6-10)$$

$$\Lambda_0 = \frac{0.560 a_0}{Z_1^{1/3}} \quad (2-6-11)$$

ここで、 Λ_0 は、BrandtとKitagawaによって得られたサイズパラメーターである。

次に、Kanekoによって得られたエネルギー損失の式を導出する。入射粒子が、速度 v_k で固体内を進むときに、物体から受ける阻止能は、次のように書ける。

$$S_k = \frac{1}{n_{free}} \frac{dE}{dx} = \frac{4\pi e^4}{m_e v_k^2} L_k \quad (2-6-12)$$

$$L_k = \frac{-2}{\pi \omega_p^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \left| Z_1 - \rho_Y(\vec{k}) \right|^2 \int_0^{kv_k} d\omega \omega \text{Im}[1/\varepsilon(k, \omega) - 1] \quad (2-6-13)$$

ここで、 n_{free} は自由電子の数密度である。また、 ε は、Lindhardによって求められた誘電関数である [11]。そして ω_p はプラズマ振動数であり、次のように定義される。

$$\omega_p = (4\pi n_{free} e^2 / m_e)^{1/2} \quad (2-6-14)$$

さらに、入射粒子の形状因子 $\rho_Y(\vec{k})$ は、 $\rho_Y(\vec{r})$ のフーリエ変換より得られる。

$$\rho_Y(\vec{k}) = \rho_Y(k) = \frac{Z_1}{1 + (\Lambda k)^2} \quad (2-6-15)$$

阻止能が、入射粒子の速度 v_k に比例する領域において、式(2-6-12)は、次のように書ける。

$$L_1 = \left(\frac{4E_F}{\hbar\omega_p} \right)^2 \frac{\chi^2}{3} (v_k / v_F)^3 K_{k1} \quad (2-6-16)$$

$$K_{k1} = \int dz z^3 |Z_1 - \rho_Y(2k_F z)|^2 / (z^2 + \chi^2)^2 \quad (2-6-17)$$

$$\chi^2 = \frac{v_B}{\pi v_F} \quad (2-6-18)$$

そして、最終的に次の阻止能の式を得る。

$$\begin{aligned} S_K(E) &= \frac{dE}{dx} \\ &= 16\pi N(k_F a_0)(v_k / v_B) Z_1^{2/3} N_{free} A^4 (m_e v_B^2 a_0^2) \\ &\quad \times \{1 - 4\chi^2 + \chi^4 [6 \ln(1 + \pi v_F / v_B) \\ &\quad - 2\pi v_F / (\pi v_F + v_B)]\}, \end{aligned} \quad (2-6-19)$$

$$A = 0.56 / (1 - 0.511 Z_1^{-2/3} r_s^{-1}) \quad (2-6-20)$$

ここで、 N_{free} は1原子あたりの伝導電子の数である。

2. 7. まとめ

第2章では、本研究で用いている理論の説明を行った。

2. 2. 節で述べた、Sigmund–Winterbon理論は、2. 3. 節（Marwick–Sigmundモデル）、2. 4. 節（Combinedモデル）、2. 5. 節（Valdes–Arista理論）での大切な基礎理論である。

2. 8. 参考文献

- [1] J. Linhard, V. Nielsen, M. Scharff, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 36 (10) (1968).
- [2] 伊藤典明, 放射線物性 1, 森北出版, 2010 [POD版], pp.43-46.
- [3] P. Sigmund, K. B. Winterbon, Nucl. Instr. Meth. 119 (1974) 541.
- [4] A. D. Marwick, P. Sigmund, Nucl. Instr. Meth. 126 (1975) 317.
- [5] P. Sigmund, J. Heinemeier, F. Besenbacher, P. Hbelplund, H. Knudsen, Nucl. Instr. Meth. 150 (1978) 221.
- [6] J. E. Valdes, N. R. Arista, Phys. Rev. A 49 (1994) 2690.
- [7] J. F. Zieger, J. P. Biersack and U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergmon, New York, 1985, pp.45–pp.49.
- [8] 藤本文範, 小牧研一郎 編, イオンビーム工学, 内田老鶴圃, 1995, p.12.
- [9] T. Kaneko, Phys. Rev. A 41 (1990) 4889.
- [10] W. Brandt, M. Kitagawa, Phys. Rev. B 25 (1982) 5631.
- [11] J. Lindhard, K. Dan Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 28, (8) (1954).

第3章 理論

第3章では本研究で提案する3つの理論を述べて行く。

最初に、イオン-中性原子間の遮蔽定数を導出する。

次にVA理論に対して以下の3つの改良を述べる。

- (1) 電子的エネルギー損失と標的の膜厚とを関連づけ
- (2) VAモデルで無視されていた核的エネルギー損失の考慮
- (3) 電子的および核的エネルギー損失のビームの角度広がり、ビームの横広がりおよびCombinedモデルへの適用

最後に、荒い近似に基づいてはいるが、電子的および核的エネルギー損失の両方を1つの式に含むモデル (Switchingモデル) を提案する。

3. 1. イオン-中性原子間ポテンシャルより導いた遮蔽定数

本節で、Thomas-Fermi-Moliere (TFM) 型のポテンシャルを用いて、イオン-中性原子間に対する新しい遮蔽定数を提案した [1]。過去の研究と同様にインパルス近似を使用するので、図5にあるように、2つの原子間のクーロン相互作用のみを考慮する。ここでは、TFMポテンシャルから導かれたKanekoの孤立原子に対する遮蔽定数 [2] との関係が分かる形で導く。得られた遮蔽定数は中性原子間の遮蔽定数とは異なる点が2つある。それは、Kanekoの孤立原子に対する遮蔽定数が (付録6. 3. 参照)、スタンダードなTFの遮蔽定数とは異なること、および、新しい遮蔽定数の式の中に出てくる因子 x_{K-in} を決めるときのパラメータが、 Z_1 、 Z_2 および N_{e1} (入射粒子の電子数)の3つになることである。

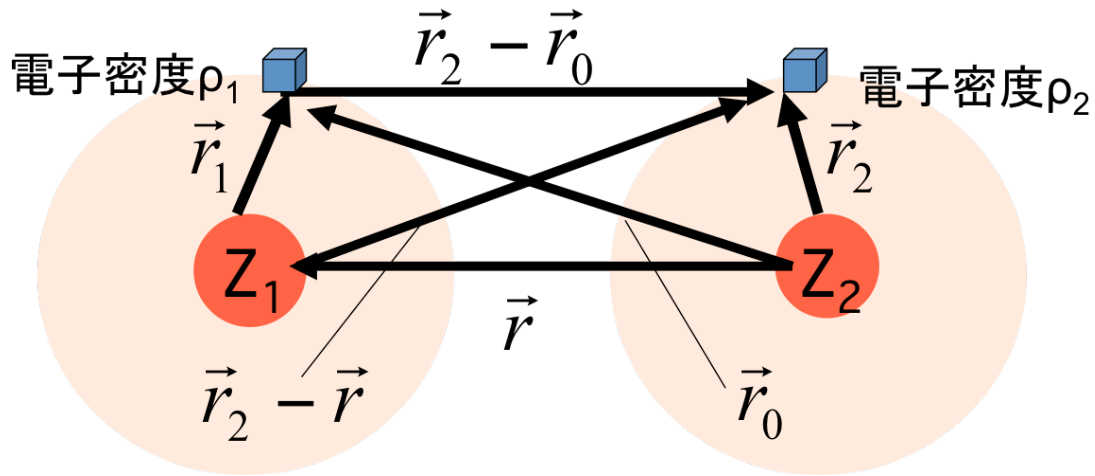


図 5: 2 原子間のクーロン相互作用のみを考慮する。核子-核子、核子-電子、電子-電子相互作用ポテンシャルのみを考慮する。

イオン-中性原子間のクーロン相互作用ポテンシャルは、

$$V(r) = \frac{e^2 Z_1 Z_2}{|\vec{r}|} - \int \frac{e^2 Z_2 \rho_1(r_1)}{|\vec{r}_0|} d\vec{r}_1 - \int \frac{e^2 Z_1 \rho_2(r_2)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}|} d\vec{r}_2 - \int \frac{e^2 \rho_1(r_1) \rho_2(r_2)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} d\vec{r}_2 d\vec{r}_1 \quad (3-1-1)$$

と表せる。第 1 項は、核子-核子相互作用ポテンシャル。第 2 項、第 3 項は、核子-電子相互作用ポテンシャル。第 4 項は、電子-電子相互作用ポテンシャルである。式 (3-1-1) は、正確に積分することができる。そして、

$$\rho_1(r_1) = \frac{N_1 e}{4\pi r_1} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\beta_i^2}{a_1'^2} \exp\left(-\frac{\beta_i r_1}{a_1'}\right) \quad (3-1-2a)$$

$$\rho_2(r_2) = \frac{Z_2 e}{4\pi r_2} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\beta_i^2}{a_2^2} \exp\left(-\frac{\beta_i r_2}{a_2}\right) \quad (3-1-2b)$$

は、電子密度である。これらの式では、TFMポテンシャルを使用しており、 $\alpha_1 = 0.35$ 、 $\alpha_2 = 0.55$ 、 $\alpha_3 = 0.10$ 、 $\beta_1 = 0.3$ 、 $\beta_2 = 1.2$ 、 $\beta_3 = 6.0$ 、である [第2章

Ref. 7]。そして、 a'_1 、 a_2 は、それぞれ遮蔽定数であり、具体的な表式に関しては後で述べる。

最初に式 (3-1-1) の右辺第 2 項を計算する。

$$\begin{aligned}
 -\int \frac{e^2 Z_2 \rho_1(r_1)}{|\vec{r}_0|} d\vec{r}_1 &= -\frac{e^2 Z_2 N_1}{4\pi} \sum_i \frac{\alpha_i \beta_i^2}{a_1'^2} \int dr_1 \frac{e^{-\frac{\beta_i r_1}{a_1'}}}{|r_1 + r| r_1} \\
 &= -\frac{e^2 Z_2 N_1}{4\pi} \sum_i \frac{\alpha_i \beta_i^2}{a_1'^2} \iiint \frac{r r_1^2 dr_1 \sin \theta d\theta d\psi e^{-\frac{\beta_i r_1}{a_1'}}}{r [r_1^2 + r^2 - 2r_1 r \cos \theta]^{1/2} r_1}
 \end{aligned} \tag{3-1-3}$$

ここからは、上式の、積分の部分のみを取り出して計算を行う。まず、次のようにおく。

$$X_1 = [r_1^2 + r^2 - 2r_1 r \cos \theta]^{1/2}$$

すると以下のように計算できる。

$$\begin{aligned}
& \iiint \frac{rr_1^2 dr_1 \sin\theta d\theta d\psi e^{-\frac{\beta_i r_1}{a'_1}}}{r[r_1^2 + r^2 - 2r_1 r \cos\theta]^{1/2} r_1} = \frac{2\pi}{r} \int dr_1 e^{-\frac{\beta_i r_1}{a'_1}} \int_{[r_1^2 + r^2 - 2r_1 r]^{1/2}}^{[r_1^2 + r^2 + 2r_1 r]^{1/2}} dX_1 \\
&= \frac{2\pi}{r} \int dr_1 e^{-\frac{\beta_i r_1}{a'_1}} (r_1 + r - |r - r_1|) \\
&= \frac{2\pi}{r} \left(2 \int_0^R dr_1 r_1 e^{-\frac{\beta_i r_1}{a'_1}} + 2r \int_R^\infty dr_1 e^{-\frac{\beta_i r_1}{a'_1}} \right) \\
&= \frac{4\pi}{r} \left(-\frac{a'_1}{\beta_i} r e^{-\frac{\beta_i r}{a'_1}} - \left(\frac{a'_1}{\beta_i} \right)^2 e^{-\frac{\beta_i r}{a'_1}} + \left(\frac{a'_1}{\beta_i} \right)^2 + \frac{a'_1}{\beta_i} r e^{-\frac{\beta_i r}{a'_1}} \right) \quad (3-1-4) \\
&= \frac{4\pi}{r} \left(-\left(\frac{a'_1}{\beta_i} \right)^2 e^{-\frac{\beta_i r}{a'_1}} + \left(\frac{a'_1}{\beta_i} \right)^2 \right)
\end{aligned}$$

ただし、 R は $r - r_1$ がプラスからマイナスへ転じる r_1 の値である。したがって、式 (3-1-3) は、

$$\begin{aligned}
& -\int \frac{e^2 Z_2 \rho_1(r_1)}{|\vec{r}_0|} d\vec{r}_1 = -\frac{e^2 Z_2 N_1}{4\pi} \sum_i \frac{\alpha_i \beta_i^2}{a_1'^2} \frac{4\pi}{r} \left[-\left(\frac{a'_1}{\beta_i} \right)^2 e^{-\frac{\beta_i r}{a'_1}} + \left(\frac{a'_1}{\beta_i} \right)^2 \right] \\
&= -\frac{e^2 N_1 Z_2}{r} \sum_i \alpha_i \left(-e^{-\frac{\beta_i r}{a'_1}} + 1 \right) \quad (3-1-5)
\end{aligned}$$

と求まる。式 (3-1-1) の第3項は同様に計算できて、

$$-\int \frac{e^2 Z_1 \rho_2(r_2)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}|} d\vec{r}_2 = -\frac{e^2 Z_1 Z_2}{r} \sum_i \alpha_i \left(-e^{-\frac{\beta_i r}{a_2}} + 1 \right)$$

を得る。次に、式 (3-1-1) の第4項を計算する。

$$\begin{aligned}
& e^2 \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{\rho_1(r_1)\rho_2(r_2)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} \\
& = e^2 \frac{N_1 Z_2}{(4\pi)^2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j \beta_i^2 \beta_j^2}{a_1'^2 a_2^2} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{e^{-\frac{\beta_i r_1}{a_1'}} e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}}}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1 - \vec{r}| r_1 r_2}
\end{aligned} \tag{3-1-6}$$

先ほどと同様に、積分部分のみを計算する。まず、 $\vec{r}_3 \equiv \vec{r}_2 - \vec{r}$ において、計算をする。

$$\begin{aligned}
& \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{e^{-\frac{\beta_i r_1}{a_1'}} e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}}}{|\vec{r}_3 - \vec{r}_1| r_1 r_2} \\
& = \iiint \iint \frac{r_3 r_1^2 dr_1 \sin\theta_1 d\theta_1 d\psi_1 r_2^2 dr_2 \sin\theta_2 d\theta_2 d\psi_2 e^{-\frac{\beta_i r_1}{a_1'}} e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}}}{r_3 r_1 r_2 [r_3^2 + r_1^2 - 2r_3 r_1 \cos\theta_2]^{1/2}}
\end{aligned} \tag{3-1-7}$$

ここで、先ほどと同様に、

$$X_3 = [r_3^2 + r_1^2 - 2r_3 r_1 \cos\theta_1]^{1/2} \tag{3-1-8}$$

とおく。すると、

$$\begin{aligned}
& \iiint \iint \frac{r_3 r_1^2 dr_1 \sin\theta_1 d\theta_1 d\psi_1 r_2^2 dr_2 \sin\theta_2 d\theta_2 d\psi_2 e^{-\frac{\beta_i r_1}{a_1'}} e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}}}{r_3 r_1 r_2 [r_3^2 + r_1^2 - 2r_3 r_1 \cos\theta_2]^{1/2}} \\
& = \iiint \iint \frac{dr_1 d\psi_1 r_2 dr_2 \sin\theta_2 d\theta_2 d\psi_2 e^{-\frac{\beta_i r_1}{a_1'}} e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}}}{r_3} \int_{[r_3^2 + r_1^2 - 2r_3 r_1]^{1/2}}^{[r_3^2 + r_1^2 + 2r_3 r_1]^{1/2}} dX_3 \\
& = \iiint \int \frac{d\psi_1 r_2 dr_2 \sin\theta_2 d\theta_2 d\psi_2 e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}}}{r_3} \int_0^\infty dr_1 e^{-\frac{\beta_i r_1}{a_1'}} (r_3 + r_1 - |r_3 - r_1|) \\
& = 2 \left(\frac{a_1'}{\beta_i} \right)^2 \iiint \int \frac{d\psi_1 r_2 dr_2 \sin\theta_2 d\theta_2 d\psi_2 e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}}}{r_3} \left(1 - e^{-\frac{\beta_j r_3}{a_1'}} \right)
\end{aligned} \tag{3-1-9}$$

を得る。さらに計算を進めると、

$$\begin{aligned}
& 2 \left(\frac{a'_1}{\beta_i} \right)^2 \iiint \int \frac{d\psi_1 r_2 dr_2 \sin \theta_2 d\theta_2 d\psi_2 e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}} \left(1 - e^{-\frac{\beta_i r_2}{a'_1}} \right)}{r_3} \\
&= 2 \left(\frac{a'_1}{\beta_i} \right)^2 (2\pi)^2 \iint \frac{r r_2 dr_2 \sin \theta_2 d\theta_2}{r[r_2^2 + r^2 - 2r_2 r \cos \theta_2]^{1/2}} \left(e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}} - e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}} e^{-\frac{\beta_i [r_2^2 + r^2 - 2r_2 r \cos \theta_2]^{1/2}}{a'_1}} \right) \\
&= 2 \left(\frac{a'_1}{\beta_i} \right)^2 (2\pi)^2 \left[\frac{2}{r} \left(\frac{a_2}{\beta_j} \right)^2 \left(1 - e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}} \right) + \frac{1}{r} \frac{a'_1}{\beta_i} \left\{ \frac{e^{-\frac{\beta_j r_2}{a'_1}} - e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}}}{\frac{\beta_i}{a'_1} + \frac{\beta_j}{a_2}} + \frac{e^{-\frac{\beta_j r_2}{a'_1}} - e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}}}{\frac{\beta_i}{a'_1} - \frac{\beta_j}{a_2}} \right\} \right] \quad (3-1-10)
\end{aligned}$$

を得る。したがって、式 (3-1-6) は、以下のように求まる。

$$\begin{aligned}
& e^2 \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{\rho_1(r_1) \rho_2(r_2)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} \\
&= e^2 \frac{Z_1 Z_2}{r} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i \alpha_j \left[\left(1 - e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}} \right) + \frac{\left(\frac{\beta_j}{a_2} \right)^2}{\left(\frac{\beta_i}{a'_1} \right)^2 - \left(\frac{\beta_j}{a_2} \right)^2} \left(e^{-\frac{\beta_i r_1}{a'_1}} - e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}} \right) \right] \quad (3-1-11)
\end{aligned}$$

ゆえに、式 (3-1-1) は、次のように求まる。

$$\begin{aligned}
V(r) &= \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} + \frac{N_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i e^{-\frac{\beta_i r}{a'_1}} - \frac{N_1 Z_2 e^2}{r} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{j=1}^3 \alpha_j e^{-\frac{\beta_j r}{a_2}} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \\
&+ \frac{N_1 Z_2 e^2}{r} + \frac{N_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{\left(\frac{\beta_i}{a'_1} \right)^2 - \left(\frac{\beta_j}{a_2} \right)^2} \left[e^{-\frac{\beta_i r_1}{a'_1}} \left(\frac{\beta_j}{a_2} \right)^2 - e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}} \left(\frac{\beta_i}{a'_1} \right)^2 \right] \\
&= \frac{N_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i e^{-\frac{\beta_i r}{a'_1}} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{j=1}^3 \alpha_j e^{-\frac{\beta_j r}{a_2}} + \frac{N_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{\left(\frac{\beta_i}{a'_1} \right)^2 - \left(\frac{\beta_j}{a_2} \right)^2} \left[e^{-\frac{\beta_i r_1}{a'_1}} \left(\frac{\beta_j}{a_2} \right)^2 - e^{-\frac{\beta_j r_2}{a_2}} \left(\frac{\beta_i}{a'_1} \right)^2 \right] \quad (3-1-12)
\end{aligned}$$

そして、マクローリン展開 $e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \dots$ を用いて次式を得る。

$$V(r) \approx \frac{Z_1 Z_2}{r} - \frac{N_1 Z_2}{a'_1} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i - \frac{Z_1 Z_2}{a_2} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \beta_j + N_1 Z_2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j \beta_i \beta_j}{\beta_i a_2 + \beta_j a'_1} \quad (3-1-13)$$

一方、2 原子間の TFM ポテンシャルは、次のように与えられる。

$$V_{TFM}(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i e^{-\frac{\beta_i r}{a_K}} \quad (3-1-14)$$

そして、上式もマクローリン展開を行った後、次式を得る。

$$V_{TFM}(r) \approx \frac{Z_1 Z_2}{r} - Z_1 Z_2 \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i \beta_i}{a_K} \quad (3-1-15)$$

ここで、 a_K は遮蔽定数である。我々は、式 (3-1-13) と式 (3-1-15) とを等しいと仮定する。したがって、式 (3-1-12) のマクローリン展開は式 (3-1-13) および式 (3-1-15) とを比較するための方法であり、物理的視点では、クーロン相互作用する 2 原子間の距離が近いところを見ていることになる。すると、遮蔽定数 a_{K-in} は、次のように表せる。

$$\begin{aligned} \frac{1}{a_{K-in}} &= \frac{N_{e1}}{Z_1} \frac{1}{a'_1} + \frac{1}{a_2} - \frac{1}{1.365} \frac{N_{e1}}{Z_1} \sum \sum \frac{\alpha_i \alpha_j \beta_i \beta_j}{\beta_j a'_1 + \beta_i a_2} \\ &\approx \frac{N_{e1}}{Z_1} \frac{1}{a'_1} + \frac{1}{a_2} - \frac{N_{e1}}{Z_1} \frac{x_{K-in}}{a'_1 + a_2} \end{aligned} \quad (3-1-16)$$

式 (3-1-16) の第 3 項の Molire ポテンシャルのパラメータ (α および β) をまとめて x_{K-in} と置いた。そして上式を次のように表す。

$$a_{K-in} = \frac{Z_1 a'_1 a_2 (a_2 + a'_1)}{N_{e1} a_2^2 + Z_1 a_1'^2 + a'_1 a_2 (N_{e1} + Z_1 - N_{e1} x_{K-in})} \quad (3-1-17)$$

ここで、 $N_{e1}=Z_1$ の時には、

$$a_{K-in} = \frac{a'_1 a_2 (a'_1 + a_2)}{a_1'^2 + a_2^2 + (2 - x_{K-in}) a'_1 a_2} \quad (3-1-18)$$

となって、形式的に中性中性の式と一致する[3]。そして、数値計算の結果および中性-中性原子間のKanekoの遮蔽定数と一致させるために、 $x_{K-in} \approx 0.688$ を採用する。そして、 a'_1 はKanekoによって求められており、その表式は、

$$a'_1 = \frac{0.6269 N_{e1}^{2/3}}{Z_1 - N_{e1} / 7} \quad (3-1-19)$$

である。また、

$$a_2 = \frac{0.8853 a_0}{Z_2^{1/3}} \quad (3-1-20)$$

である。

3. 2. 標的の膜厚と電子のエネルギー損失の関係

ここでは、標的膜厚とエネルギー損失との関係を述べる。なぜなら、VA理論においては、標的膜厚とエネルギー損失とが独立に扱われているからである。この2つは本来関係づけられるべきである。実際、電子のエネルギー損失の解析的理論があり、それを用いて膜厚とエネルギー損失とを関連づけることができる。

理論の出発点は、2. 6. 節にあるKanekoの電子のエネルギー損失の式(2-6-19)である[4]。式(2-6-19)より、初等的な計算によって入射エネルギーと出射エネルギーとの比 μ_e を得る。以下に導出の概要を示す。速度に比例する外力がある場合の運動方程式は係数を λ_K とすると、

$$\frac{dv}{dt} = -\lambda_K v \quad (3-2-1)$$

と書ける。ここで初期条件として、 $t=0$ の時 $x=0$ 、 $v=v_0$ とすると

$$x = -\frac{v_0}{\lambda_K} e^{-\lambda_K t} + \frac{v_0}{\lambda_K} \quad (3-2-2)$$

$$v = v_0 e^{-\lambda_K t} = v_0 - \lambda_K x \quad (3-2-3)$$

$$\frac{1}{2} v^2 = \frac{1}{2} (v_0 - \lambda_K x)^2 \quad (3-2-4)$$

$$E(x) = -mv_0 \lambda_K x + \frac{1}{2} m \lambda_K^2 x^2 + E_0 \quad (3-2-5)$$

$$\beta_{e1}(\tau) = -\beta_{e0} \frac{mv_0}{E_0 \pi a_x^2 N} \lambda_K \tau + \frac{1}{2} \beta_{e0} \frac{m}{E_0 (\pi a_x^2 N)^2} \lambda_K^2 \tau^2 + \beta_{e0} \quad (3-2-6)$$

を得る。したがって、無次元に換算された、エネルギー比は以下のように求まる。

$$\mu_e \equiv \frac{\beta_{e1}(\tau)}{\beta_{e0}} = -I_1 \kappa_K \tau + \frac{1}{2} I_2 \kappa_K^2 \tau^2 + 1 \quad (3-2-7)$$

$$I_1 = \frac{mv_B}{E_0 \pi a_x^2 N} \quad (3-2-8)$$

$$I_2 = \frac{m}{E_0 (\pi a_x^2 N)^2} \quad (3-2-9)$$

$$\begin{aligned} \kappa_K = & 16\pi N(k_F a_0)(1/v_B)Z_1^{2/3}N_{free}A^4(v_B^2 a_0^2) \\ & \times \{1 - 4\chi^2 + \chi^4[6\ln(1 + \pi v_F/v_B) \\ & - 2\pi v_F/(\pi v_F + v_B)]\}, \end{aligned} \quad (3-2-10)$$

ここで、 κ_K は、式(2-6-18)を入射速度 v_k と電子の質量 m_e で割った値である。 β_{e0} と β_{e1} は、前出の定義と同じであり、それぞれ入射エネルギーおよび出射エネルギーを無次元化した換算エネルギー値である。なお、 I_1 と I_2 に含まれている a_x は、遮蔽定数である。第4章での、エネルギー損失を考慮した小角多重散乱では、換算膜厚 $\tau = \pi a^2 N x$ を用いて議論している。つまり、遮蔽定数に依存しない議論をしている。従って、ここで a_x がどの遮蔽定数であるかは、特定する必要はない。

3. 3. 標的の膜厚と核的エネルギー損失の関係

VA理論で無視されていた核的エネルギー損失を考慮する。なぜなら、粒子が標的を通過するとき、粒子の速度が遅くなってくれば、電子的エネルギー損失よりも核的エネルギー損失の方が優勢になるからである（3. 4. 節の図6参照）。このような観点から見ると、SW理論に電子的エネルギー損失をVAが初めて導入したが、まだ改善の余地があるといえる。我々は、VA理論を元に、近似を用いて核的エネルギー損失によるエネルギー比 μ_n を求めた。ここで、核的阻止能として、Lindhardらの核的阻止能理論〔5〕を採用する。

Lindhardらが求めた、無次元の核的阻止断面積（2-1-24）は、次のように書かれる。

$$s(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon} dt^{1/2} f_L(t^{1/2}) \quad (3-3-1)$$

ただし、式（2-1-9）の上の説明より

$$t^{1/2} = \varepsilon \sin(\theta/2) \quad (3-3-2)$$

$$\varepsilon \equiv \frac{a_x}{b} = \frac{a_x E m_2}{Z_1 Z_2 e^2 (m_1 + m_2)} \quad (3-3-3)$$

ここで、 m_1 と m_2 は、それぞれ、入射粒子、および標的粒子の質量である。そして、 f_L は、式（2-1-18）と同じ関数である。換算された値 $t^{1/2}$ が大きければ（すなわち、大きな ε ） f_L は、十分に小さい。従って、以下の計算のように、式（3-3-1）を定数として扱えるだろう。

はじめに、外力 Bv_1 が働いている場合の、ニュートンの運動方程式から出発する。 B は速度に依存する係数である。

$$\frac{d}{dt}(m_1 v_1) = -B(v_1) v_1^2 \quad (3-3-4)$$

ここで、 v_1 は入射粒子の速度である。式 (3-3-4) を次の形に書く。

$$\frac{dm_1 v_1}{dt} = \frac{dm_1 v_1}{dx} \frac{dx}{dt} = v \frac{dm_1 v_1}{dt} = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2} m_1 v_1^2 \right) \quad (3-3-5)$$

$$\frac{d}{dx'} \left(m_1 \frac{v_1^2(x')}{2} \right) = -B(v_1) v_1^2(x') \quad (3-3-6)$$

そして、我々は、次のように B を得た。まず阻止能 S を次のように書く。

$$\begin{aligned} S &= NT_m \int \sin^2(\theta) d\sigma \\ &= NT_m \frac{1}{\varepsilon^2} \pi a^2 \int_0^\varepsilon dt^{1/2} f_L(t^{1/2}) \\ &= \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{aE} \right)^2 \frac{(m_1 + m_2)}{m_2} N \pi a^2 \int_0^\varepsilon dt^{1/2} f_L(t^{1/2}) \\ &= N \pi a^2 \frac{1}{2} m_1 v^2 4 \frac{m_1}{m_2} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a} \right)^2 \frac{1}{E^2} \int_0^\varepsilon dt^{1/2} f_L(t^{1/2}) \\ &= B v^2 \end{aligned} \quad (3-3-7)$$

ゆえに、係数 B は下のよう書ける。

$$B(v) = \frac{1}{2} \frac{m_1^2}{m_2} 4 \frac{\tau}{x} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a_x} \right)^2 \frac{1}{E(v_1)^2} \int_0^\varepsilon dt^{1/2} f_L(t^{1/2}) \quad (3-3-8)$$

上式を求めるに当たって、次の近似を用いたが、入射粒子のエネルギー $E(v_1)$ は、速度の関数として取り扱った。

$$\int_0^{\varepsilon_i} dt^{1/2} f_L(t^{1/2}) \approx \int_0^{\varepsilon_f} dt^{1/2} f_L(t^{1/2}) \approx const \quad (3-3-9)$$

ここで、 ε_i は入射エネルギーに、 ε_f は出射エネルギーに対応している。大きな ε に対しては（すなわち大きな $t^{1/2}$ ） $f_L(t^{1/2})$ は十分に小さい。 ε_i と ε_f とがあまり差がなければ式 (3-3-6) のように、積分部分を一定と見なすことができる。核的エネルギー損失でのエネルギー比 μ_n は、次のように書ける。

$$\begin{aligned}\mu_n &\equiv \frac{\beta_{n1}(\tau)}{\beta_{n0}} = \frac{E_n}{E_0} \\ &= \left\{ 1 - 8\tau \frac{m_1}{m_2} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a_x E_0} \right)^2 \int_0^\varepsilon dt^{1/2} f(t^{1/2}) \right\}^{1/2}\end{aligned}\tag{3-3-10}$$

ここで、 β_{n1} は、弾性散乱のみでエネルギーを失った後の換算エネルギーである。また、具体例として、 $\varepsilon = 10$ 、 20 および 30 のとき、式 (3-3-9) は、 1.28 、 1.62 および 1.82 である。

3. 4. 小角多重散乱理論における、ビームの角度広がり、横広がりおよび Combinedモデルへの、エネルギー損失の導入

まずは、ビームの角度広がりに対してエネルギー損失を導入する。出発点はVA理論（2. 5. 節参照）で得られている。まず式（2-5-6）と（2-5-4）において $n=1/2$ と置くと、それぞれ、

$$\Delta_e(z, z/\mu_e) = \frac{1}{2} z^{1/2} \frac{G_{VA}(z/\mu_e) - G_{VA}(z)}{1 - \mu_e^{1/2}} \quad (3-4-1)$$

$$G_{VA}(z) = \int_0^z dz' \frac{\Delta(z')}{z'^{3/2}} \quad (3-4-2)$$

となる。これらの式は、電子的エネルギーロスの効果を取り入れるために使われる。なお、 $n=1/2$ としているのは、阻止能が速度に比例する領域を扱うからである。次に、核的エネルギー損失をVA理論を元に導入する。

$$\Delta_n(z, z/\mu_n) = \frac{2}{(1 - \mu_n^2)} \{L_{n1}(z/\mu_n) - L_{n1}(z)\} \quad (3-4-3)$$

$$L_{n1}(z) = \int_0^z dz'' \frac{\Delta(z'')}{z''} \quad (3-4-4)$$

以上が、小角多重散乱の角度分布（SW理論）にエネルギー損失の効果を導入する式である。

なお、Combinedモデルにおいても上記と同じ式が用いられる。なぜなら、Combinedモデルの粒子の分布関数は、SW理論の分布関数と同じだからである。

次に、ビームの横広がりエネルギー損失の効果を導入する。まずは電子的エネルギー損失に関して行う。式（3-4-2）において、次の置き換えを行う。

$$G_{VA}(z) \rightarrow G_{lateral}(z) = \int_0^z dz' \frac{1}{z'^{5/2}} \int_0^{z'} dz'' \Delta(z'') \quad (3-4-5)$$

そして次に、核的エネルギー損失を導入する。それは、式 (3-4-3) において、次の置き換えを行うことでなされる。

$$L_{n1}(z) \rightarrow L_{n2}(z) = \int_0^z dz' \frac{1}{z'^2} \int_0^{z'} dz'' \Delta(z'') \quad (3-4-6)$$

以上で、角度広がり、横広がり、**Combined**モデルに対して、電子のおよび核的エネルギー損失効果を取り入れたことになる [6]。

3. 5. Switching モデル

我々の目的は、前節では別々に取り扱われていた電子的阻止能と核的阻止能を1つの式で表すことである。本節では、我々が提案したSwitchingモデルに関して説明を行う [6]。まず、図6に見られるように、入射粒子のある速度領域では電子的阻止能が優勢である。そして、別の領域では、核的阻止能が優勢である。2つの阻止能が同じくらい寄与している場合を無視すれば、次のように分布関数を変数分離できる。すなわち、ある部分では電子的阻止能のみを考慮し、別の部分では核的阻止能のみを考慮するということである。

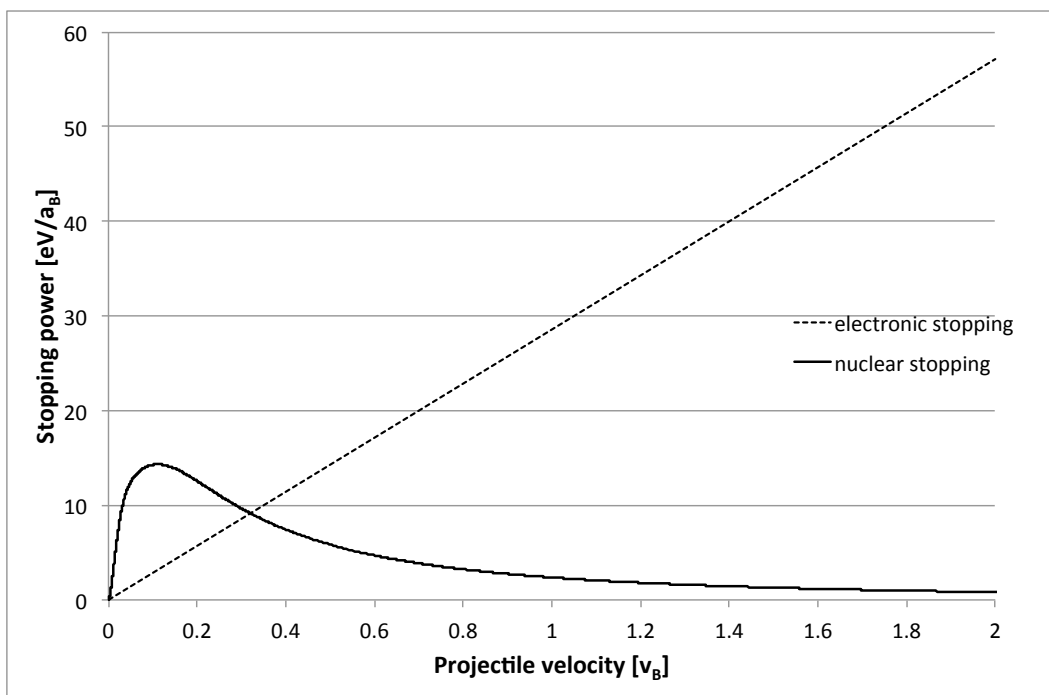


図 6: 核的阻止能と電子的阻止能のグラフ。入射粒子の速度が比較的遅い場合の値をグラフにしている。

上記の考え方に従って、散乱分布関数を下のように書く。

$$\begin{aligned}
 f_{ne}(x_t, \vec{\alpha}_t) &= f_{ne}(x_n, \vec{\alpha}_n, x_e, \vec{\alpha}_e) \\
 &= f_n(x_n, \vec{\alpha}_n) f_e(x_e, \vec{\alpha}_e)
 \end{aligned}
 \tag{3-5-1}$$

上式で、 f_n は、核的阻止能のみのエネルギー損失を含む。そして f_e は、電子的阻止能のみのエネルギー損失を含む。さらに、以下の標的膜厚の定義をする。

$$x_t \equiv x_n + x_e = (a_t + b_t)x_t \tag{3-5-2}$$

$$a_t + b_t \equiv 1 \tag{3-5-3}$$

$$x_n \equiv a_t x_t \tag{3-5-4}$$

$$x_e \equiv b_t x_t \tag{3-5-5}$$

標的膜厚は、2つの部分に分けられている。それは、電子的阻止能が優勢である部分 x_e と、核的阻止能が優勢である部分 x_n とである。同様に微少長さも定義する。

$$\begin{aligned}
 \delta x_t &= (a_t + b_t) \delta x_t \\
 &= \delta x_n + \delta x_e
 \end{aligned}
 \tag{3-5-6}$$

そして、Switchingモデルにおける輸送方程式は、(2-2-1) の表示にならって次のようになる。

$$\begin{aligned}
& f_{ne}(x_t + \delta x_t, \vec{\alpha}) \\
&= f_n(x_n + \delta x_n, \vec{\alpha}_n) f_e(x_e + \delta x_e, \vec{\alpha}_e) \\
&= f_n(x_n + a_t \delta x_t, \vec{\alpha}_n) f_e(x_e + b_t \delta x_t, \vec{\alpha}_e) \\
&= a_t \delta x_t N \int d\sigma(\vec{\alpha}'_n \rightarrow \vec{\alpha}_n) f_n(x_n, \vec{\alpha}'_n) \times b_t \delta x_t N \int d\sigma(\vec{\alpha}'_e \rightarrow \vec{\alpha}_e) f_e(x_e, \vec{\alpha}'_e) \\
&+ \left(1 - a_t \delta x_t N \int d\sigma(\vec{\alpha}_n \rightarrow \vec{\alpha}'_n)\right) f_n(x_n, \vec{\alpha}_n) \times b_t \delta x_t N \int d\sigma(\vec{\alpha}'_e \rightarrow \vec{\alpha}_e) f_e(x_e, \vec{\alpha}'_e) \\
&+ a_t \delta x_t N \int d\sigma(\vec{\alpha}'_n \rightarrow \vec{\alpha}_n) f_n(x_n, \vec{\alpha}'_n) \times \left(1 - b_t \delta x_t N \int d\sigma(\vec{\alpha}_e \rightarrow \vec{\alpha}'_e)\right) f_e(x_e, \vec{\alpha}_e) \\
&+ \left(1 - a_t \delta x_t N \int d\sigma(\vec{\alpha}_n \rightarrow \vec{\alpha}'_n)\right) f_n(x_n, \vec{\alpha}_n) \times \left(1 - b_t \delta x_t N \int d\sigma(\vec{\alpha}_e \rightarrow \vec{\alpha}'_e)\right) f_e(x_e, \vec{\alpha}_e)
\end{aligned}$$

(3-5-7)

ここで、式 (3-5-7) の1番最後の右辺について説明を行う。まず第1項は、電子のエネルギー損失と核的エネルギー損失との両方を含んでいる。次に、第2項は、電子的エネルギー損失のみを含む。第3項は、核的エネルギー損失のみを含む。第4項は、どちらのエネルギー損失も含まず、つまり衝突なく通過することを示している。Switchingモデルでは、電子的エネルギー損失と核的エネルギー損失との両方は、同時には起こらない。従って、式 (3-5-7) は、次のように書ける。

$$\begin{aligned}
& - \frac{\partial f_n(x_n, \vec{\alpha}_n) f_e(x_e, \vec{\alpha}_e)}{\partial x} \\
&= f_e(x_e, \vec{\alpha}_e) N b \int d\sigma(\phi_e) \left[f_e(x_e, \vec{\alpha}_e) - f_e(x_e, \vec{\alpha}_e + \vec{\phi}_e) \right] \\
&+ f_n(x_n, \vec{\alpha}_n) N a \int d\sigma(\phi_n) \left[f_n(x_n, \vec{\alpha}_n) - f_n(x_n, \vec{\alpha}_n + \vec{\phi}_n) \right]
\end{aligned} \tag{3-5-8}$$

この上式は、式 (3-5-7) において、2次の微少量 $(\delta x_t)^2$ を無視することでも得られる。ここで、

$$\vec{\alpha}'_n = \vec{\alpha}_n + \vec{\phi}_n \tag{3-5-9}$$

$$\vec{\alpha}'_e = \vec{\alpha}_e + \vec{\phi}_e \tag{3-5-10}$$

$$d\sigma(\phi_n) \equiv d\sigma(\vec{\alpha}'_n \rightarrow \vec{\alpha}_n) = d\sigma(\vec{\alpha}_n \rightarrow \vec{\alpha}'_n) \quad (3-5-11)$$

$$d\sigma(\phi_e) \equiv d\sigma(\vec{\alpha}'_e \rightarrow \vec{\alpha}_e) = d\sigma(\vec{\alpha}_e \rightarrow \vec{\alpha}'_e) \quad (3-5-12)$$

次に、4次元のフーリエ変換を定義する。

$$\begin{aligned} & f_n(x_n, \vec{\alpha}_n) f_e(x_e, \vec{\alpha}_e) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k} \int d\vec{k} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{\alpha}_n + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}_e)} \tilde{f}_n(x_n, \vec{k}) \tilde{f}_e(x_e, \vec{k}) \end{aligned} \quad (3-5-13)$$

$$\begin{aligned} & \tilde{f}_n(x_n, \vec{k}) \tilde{f}_e(x_e, \vec{k}) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{\alpha}_n \int d\vec{\alpha}_e e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{\alpha}_n + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}_e)} f_n(x_n, \vec{\alpha}_n) f_e(x_e, \vec{\alpha}_e) \end{aligned} \quad (3-5-14)$$

そして、初期条件として、次の関数を与える。

$$f_n(0, \vec{\alpha}_n) f_e(0, \vec{\alpha}_e) = \delta(\vec{\alpha}_n) \delta(\vec{\alpha}_e) \quad (3-5-15)$$

この初期条件は一見すると間違いであるように見える。まず、 $\delta(\vec{\alpha}_e)$ は、ビームが標的に侵入するときに、良くコリメートされているということを表している。したがって、 $\delta(\vec{\alpha}_e)$ は、正しいと考えられる。一方、 $f_n(0, \vec{\alpha}_n)$ は、入射粒子が電子的エネルギー損失を受けながら散乱されて、核的阻止能が優勢になったときの分布関数でなければならない。従って、 $\delta(\vec{\alpha}_n)$ という初期条件ではないであろう。しかしながら、我々の提案したSwitchingモデルでは、2つの散乱角 $\vec{\alpha}_n$ と $\vec{\alpha}_e$ を独立に取り扱っている。したがって、式(3-5-15)の初期条件で良いといえる。

式(3-6-8)をフーリエ変換し、初期条件の下で解くと、

$$\begin{aligned} & f_n(\tau_n, \vec{\alpha}_n) f_e(\tau_e, \vec{\alpha}_e) \\ &= \int_0^\infty dz_n z_n e^{-\tau_n \Delta_n(z_n, \vec{z}_n/\mu_n)} J_0(z_n \vec{\alpha}_n) \int_0^\infty dz_e z_e e^{-\tau_e \Delta_e(z_e, \vec{z}_e/\mu_e)} J_0(z_e \vec{\alpha}_e) \end{aligned} \quad (3-5-16)$$

が得られる。ここで、 τ_n と τ_e はそれぞれ、 x_n と x_e に対応している。したがって、我々は、Switchingモデルを用いて、核的阻止能と電子的阻止能の両方を含む1つの理論式を提案できた。

3. 6. まとめ

我々は、イオン-中性原子間の遮蔽定数を求めることに成功した。VA理論の改良を行い、また、荒い近似に基づいてはいるが、電子的エネルギー損失と核的エネルギー損失の両方を1つの式に含むモデルを提案した。それがSwitchingモデルである。

3. 7. 参考文献

- [1] S. Ikegami, Nucl. Instr. Meth B 311 (2013) 14.
- [2] T. Kaneko, Phys. Rev. A 66 (2002) 052901.
- [3] T. Kaneko, S. Ikegami, Nucl. Instr. Meth. B 258 (2007) 57.
- [4] T. Kaneko, Phys. Rev. A 41 (1990) 4889.
- [5] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 36 (10) (1968).
- [6] S. Ikegami, Nucl. Instr. Meth. B 316 (2013) 222.

第4章 結果および考察

第4章で、遮蔽定数に関しては本研究で得られた理論計算の結果と実験データとの比較を行う。また、エネルギー損失を含む多重散乱理論は、核的阻止能および電子的阻止能とを比較して検討する。

4. 1. Lindhardらの $f_L(t^{1/2})$ に関して

2. 1. 節のLindhardらの理論によれば、使用される散乱ポテンシャルの形が散乱関数 $f_L(t^{1/2})$ を通して散乱角分布に反映される。従って、いろいろな散乱ポテンシャルに対して計算した $f_L(t^{1/2})$ の形を比較することにも意味がある。4.

1. 節では、TFMポテンシャルで $f_L(t^{1/2})$ を計算し、他のポテンシャルで計算したものと比較する。計算式は2. 1. 節から転記すると以下のように表される：

$$f_L(t^{1/2}) = X \frac{g_L^2(X)}{\left(g_L(X) - X \frac{dg_L}{dX} \right)} \quad (4-1-1)$$

$$t^{1/2} = \frac{g_L(X)}{2X} \quad (4-1-2)$$

$$g_L(X) = \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos(\varphi) \left\{ \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp[-\beta_i X / \cos(\varphi)] + \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i \beta_i X}{\cos(\varphi)} \exp[-\beta_i X / \cos(\varphi)] \right\} \quad (4-1-3)$$

$$X = p/a \quad (4-1-4)$$

ここで、式(4-1-3)のTFMポテンシャルを表すパラメーター α_i 、 β_i は、3. 1. 節に示したように、 $\alpha_1 = 0.10$ 、 $\alpha_2 = 0.55$ 、 $\alpha_3 = 0.35$ 、 $\beta_1 = 6.0$ 、 $\beta_2 = 1.20$ および $\beta_3 = 0.30$ である。

散乱関数 $f_L(t^{1/2})$ は、いろいろの研究者によって評価されている。ここでは、我々の求めた値と、他の研究者らによる値とを比較する。比較するのは、

Lindhardら [1]、Meyer [2]、Sigmund–Winterbon [3]、Mueller [4] の値である。Lindhardらは、スタンダードなTFの数表を用いている。同様に、MeyerもスタンダードなTFの数表を元に計算をしている。従ってグラフから見取れるように、LindhardらおよびMeyerの結果に差は無い。Sigmund–Winterbonは、スタンダードなTFの値を再現するフィッティングの式を使っている。Muellerは、TFMを再現するフィッティングの式を用いている。我々は、TFMポテンシャルを用いている。それらの比較を、図7に示す [5]。

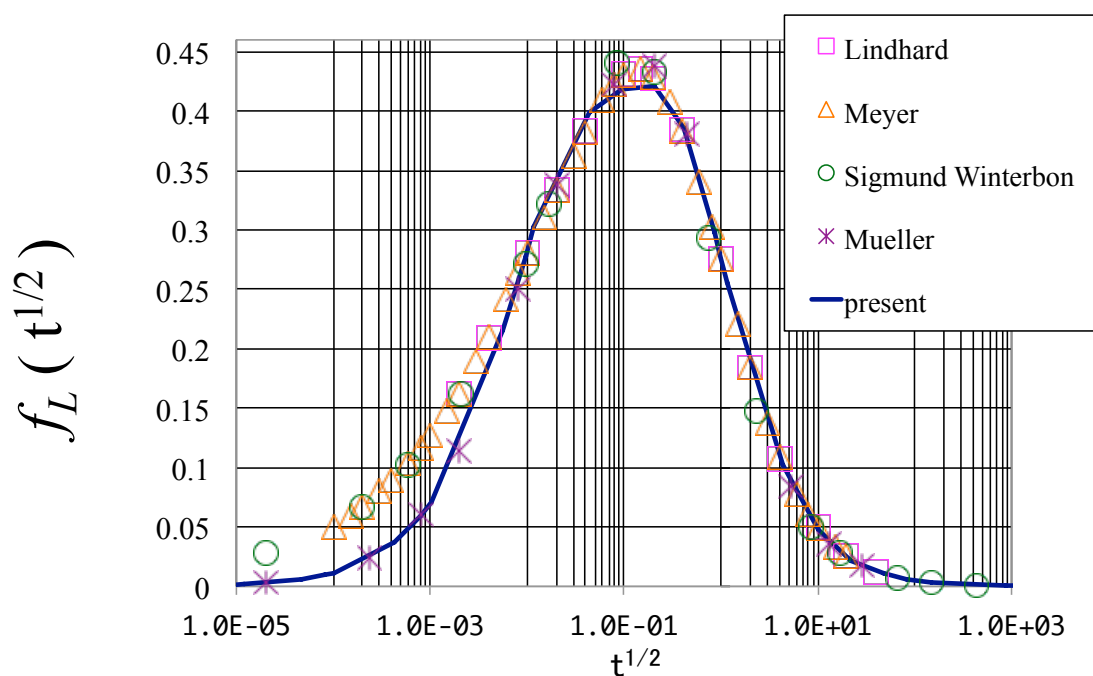


図 7: 散乱関数 $f_L(t^{1/2})$ のグラフ。□が Lindhard、△が Meyer、○が Sigmund、*が Mueller、-が本研究による値である。

図7では、曲線のピークの右側で、異なる計算の値がほぼ同じ曲線の上に乗っている。しかし、ピークの左側で、不一致が見られる。その原因は、TFMポテンシャルとスタンダードなTFポテンシャルの差である。TFMの方が強い遮蔽を与えるため、散乱角の小さなところでの強度が弱くなっているのである。

4. 2. Thomas-Fermi-MoliereポテンシャルとLindhardの遮蔽定数とを用いた場合の、小角多重散乱理論と実験との比較

本節では、TFMポテンシャルと a_L （Lindhardの遮蔽定数）との組み合わせで求めたSW（式（2-2-13））の小角多重散乱の理論曲線と実験値を比較する。なお、理論曲線は本研究で求めた値を使用している。図8-図12において入射粒子の価数は数値計算の結果には影響しない。なぜなら a_L は中性の2原子に対する遮蔽定数だからである。

まず、Schafflerは[6, 7]陽子がNiに入射したときの小角多重散乱の実験を行った。図8は、 H^+ -Ni系に対して計算した散乱角分布のSchafflerの実験との比較を示す。理論曲線は、実験データに近い値を示している。わずかのずれは、入射粒子の標的内での平均エネルギーを用いることで、より良くなる。

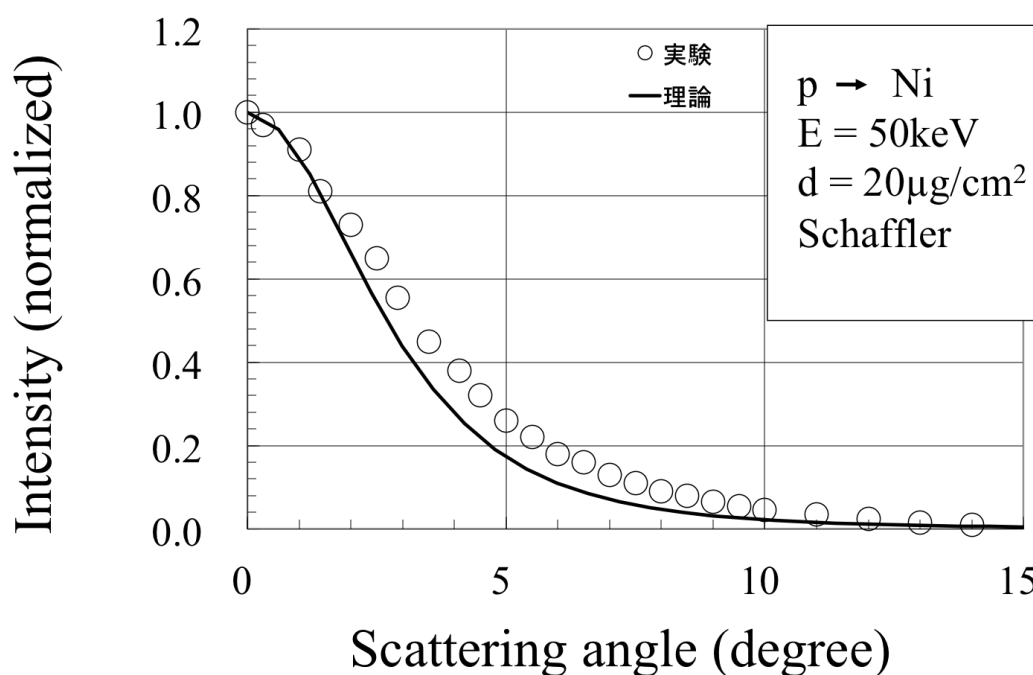


図 8: 陽子を Ni に入射させたときの角度分布。理論値と実験値が近く、良い一致を示している。

次に、図 9 は、Hogberg の Ar が C に入射したときの実験値との比較である [6, 8]。こちら、先ほどの図と同様に、理論曲線は実験データを良く再現している。

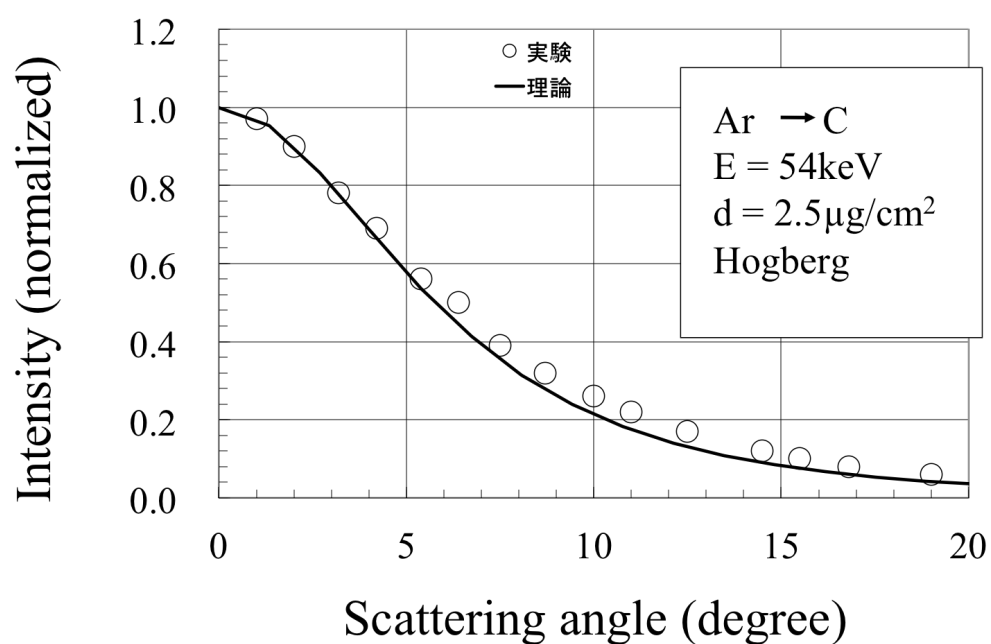


図 9: Ar を C に入射させたときの角度分布。理論値は実験データを良く再現できている。

図 10 は、Spahn が行った実験との比較である [6, 9]。入射粒子は Ne であり、標的は Al である。この実験においても、理論曲線は実験データを良く再現している。

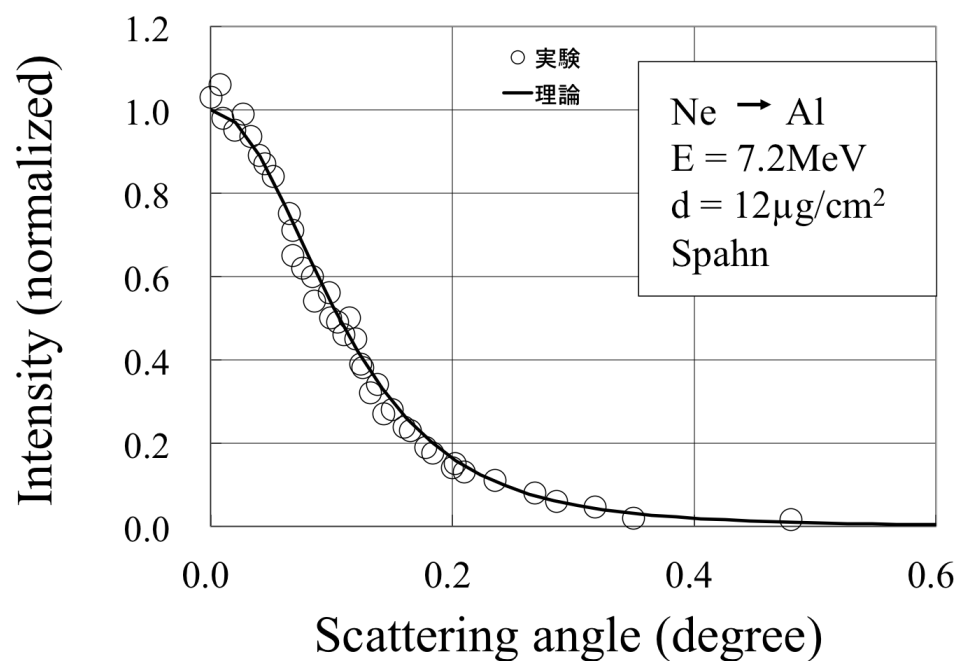


図 10: Ne を Al に入射させたときの角度分布。実験データと理論値とが良好一致を示している。

図 11 と図 12 に、Schwabe [10] らの実験データと理論値とを比較する。入射粒子は、4 つの実験においてすべて Li である。Li と C との組み合わせは、理論と実験の値は良好一致を示している。しかしながら、Li と Al、Si、Co との組み合わせでは、理論値は実験データをうまく再現できていない。

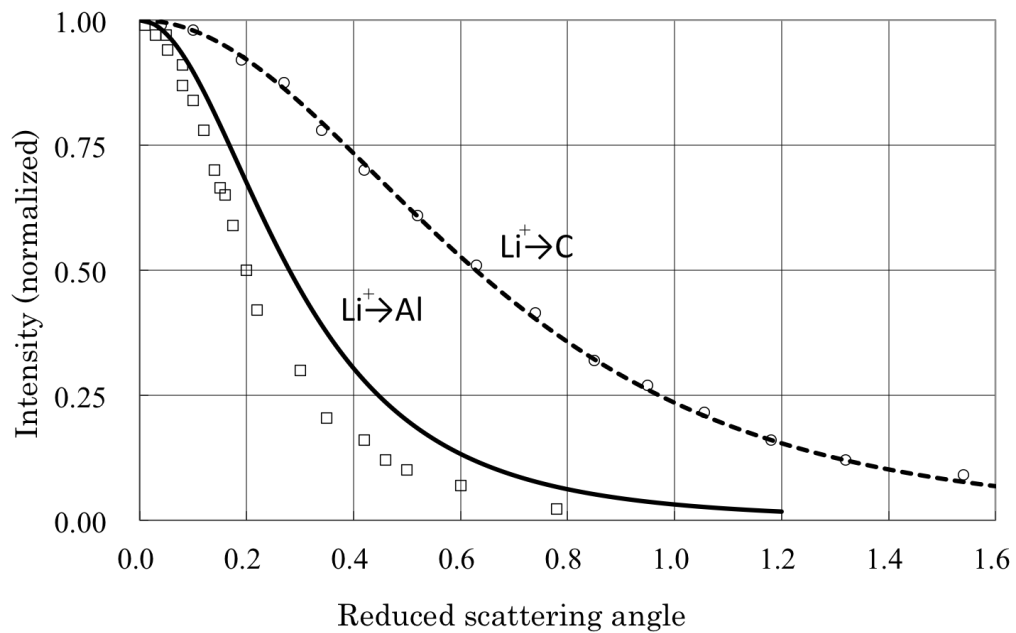


図 11: SW 理論と遮蔽定数 a_L との組み合わせで理論値を得ている。Li⁺ → Al (□ : 実験値および実線 : 理論値) では、理論値が実験データを再現できていない。Li⁺ → C (○ : 実験値および破線 : 理論値) の組み合わせでは、理論値は実験値を良く再現できている。入射エネルギーはどちらの衝突系でも同じで、14、20、28、35、43、および 50 keV である。

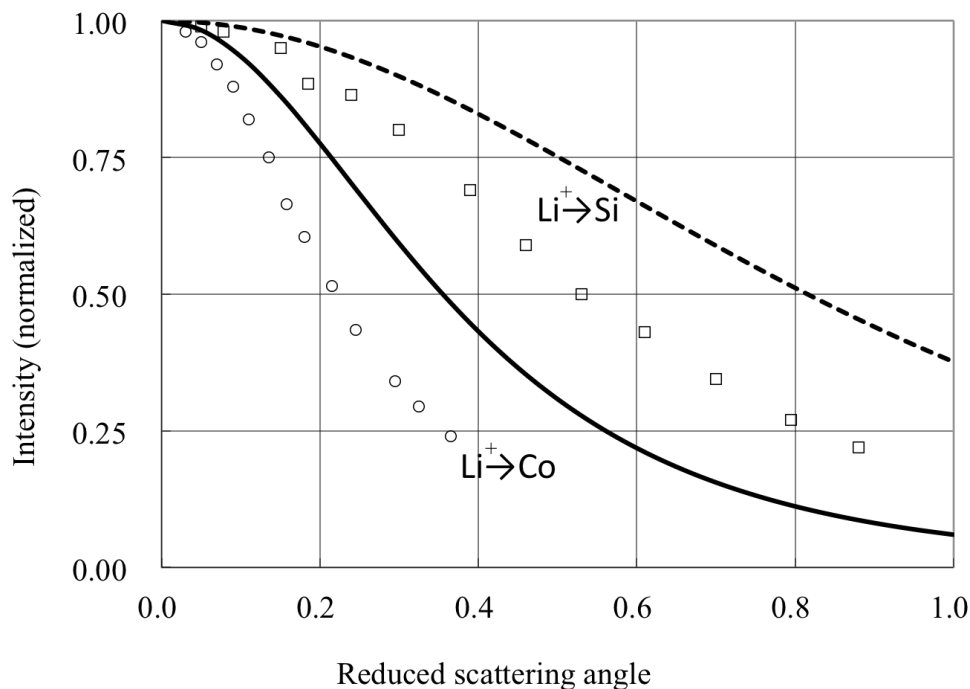


図 12: $\text{Li}^+ \rightarrow \text{Si}$ (□ : 実験値および破線 : 理論値) および $\text{Li}^+ \rightarrow \text{Co}$ (○ : 実験値および実線 : 理論値) の多重散乱の実験データと理論値の比較。理論値は SW 理論と a_L との組み合わせで計算している。どちらの衝突系でも理論値は実験データを再現できていない。入射エネルギーはどちらの衝突系でも同じで、28、35、43、および 50 keV である。

なお、Schwabeらの実験は、換算された角度を用いている。したがって、入射粒子のエネルギーと散乱角との組み合わせでスケールされる。ゆえに、入射エネルギーはいろいろであるが、ただ1つの曲線のみで実験も理論も表すことが可能である。

H. H. Andersenらは、この不一致を、次のように結論づけた [1 1]。それは、標的薄膜が理論の仮定を満たしていないため、という結論である。しかしながら、表面の研究では、遮蔽定数は、実験によっていろいろの値をとることが知られている [1 2]。したがって、原因は標的薄膜の状態にありとみるのではなく、最適な遮蔽定数が用いられていないとみるのも妥当である。

4. 3. 遮蔽定数 a_{K-in} の入射体電荷効果およびこれで計算した散乱角分布の実験との比較

本節では3. 1. 節で導いたイオン-中性原子系に対する遮蔽定数 a_{K-in} を使って2種類の計算を行って議論する。最初に図13は遮蔽定数 a_{K-in} を使って、Ar-Al系と Ar^{+17} -Al系に対して計算した散乱角分布を比較したものである。規格化した散乱強度を換算された散乱角に対してプロットした。入射エネルギーは500 keVである。図には入射粒子の荷電効果がはっきりと現れている。

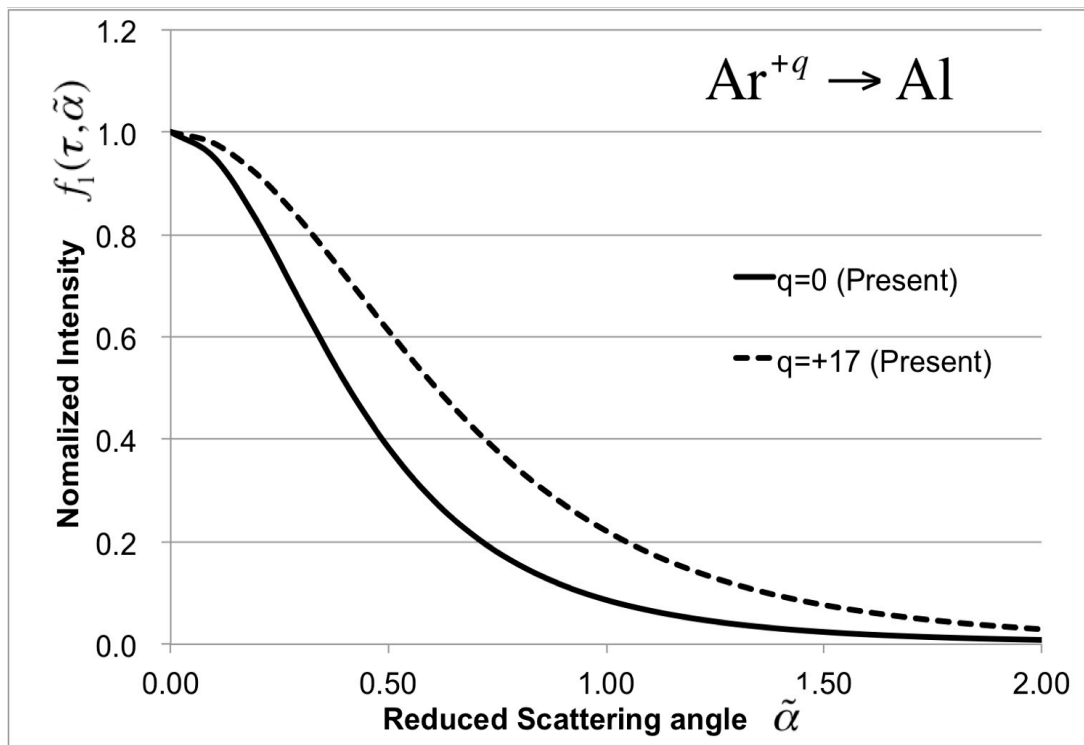


図 13: 小角多重散乱における荷電効果の有無の比較。本研究で用いた a_{K-in} を用いている。実線は $N_{e1}=Z_1$ 、破線は $N_{e1}=1$ での理論計算である。入射エネルギーは 500 keV である。

次に、本研究で導いた遮蔽定数 a_{K-in} で多重散乱関数 $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ を計算し、他の計算および実験と比較した。図14-図19はそれらの比較を示す。図14に示した Li^+ -Al系では中性-中性原子間のKaneko-Ikegamiの遮蔽定数 a_k (第3章、Ref.[3]) は、イオン-中性原子間の遮蔽定数 a_{K-in} よりも広い角度分布を与えたが、差はほとんど無い。この差をより詳しく説明すると、 a_{K-in} に含まれる a'_1 がスタンダー

ドなTFの遮蔽定数とは異なるからである。本来は a_k よりも a_{K-in} の方が広い角度分布を与えねばならない。しかしながら、上記の理由により a_{K-in} の方が狭い角度分布を与えている。つまり本研究で求めた遮蔽定数 a_{K-in} の荷電効果はあまり強くないと言える。

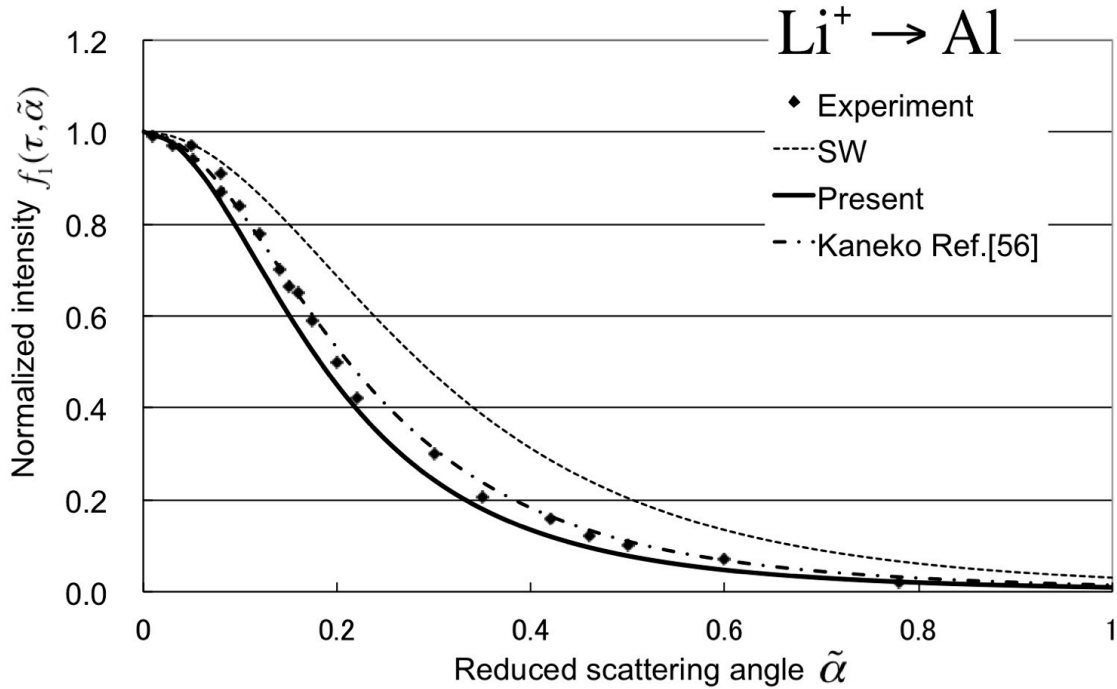


図 14：実験データは図 11 と同じである。点線は a_L 、実線は a_{K-in} 、破線は a_K を用いて計算されている。

遮蔽定数 a_{K-in} を使った多重散乱関数 $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ は a_L （Lindhardの遮蔽定数）を使ったものよりもSchwabeらの実験 [1] に近い値を与えている。しかしながら、図15に示した $\text{Li}^+\text{-C}$ 系の場合 a_{K-in} は実験データを再現できていない。次に、 Li^+ とCoの組み合わせをみしてみる。これは、我々の提案した遮蔽定数 a_{K-in} は、Lindhardの遮蔽定数よりも良い値を与えている。また、 Li^+ とSiの組み合わせに対しても同様のことがいえる。

次に、Andersenの実験データと比較する [11]（図18，19）。Andersenらの実験データも、SWモデルとLindhardの遮蔽定数との組み合わせで、理論と

良い一致を示している。したがって、我々の提案した遮蔽定数は、適さないと
いえる。なお、図 1 8, 1 9 は、分布曲線のすそで規格化を行っている。

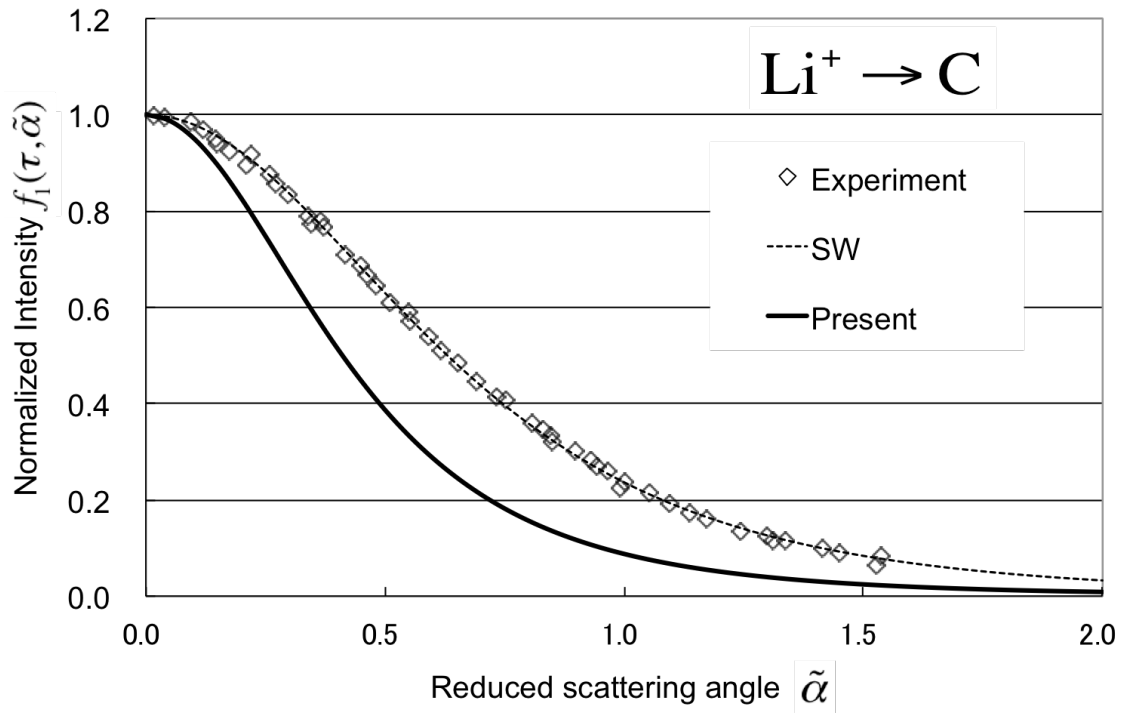


図 15: 実験データは図 11 と同じである。点線は a_L 、実線は a_{K-in} を用いて計算されている。

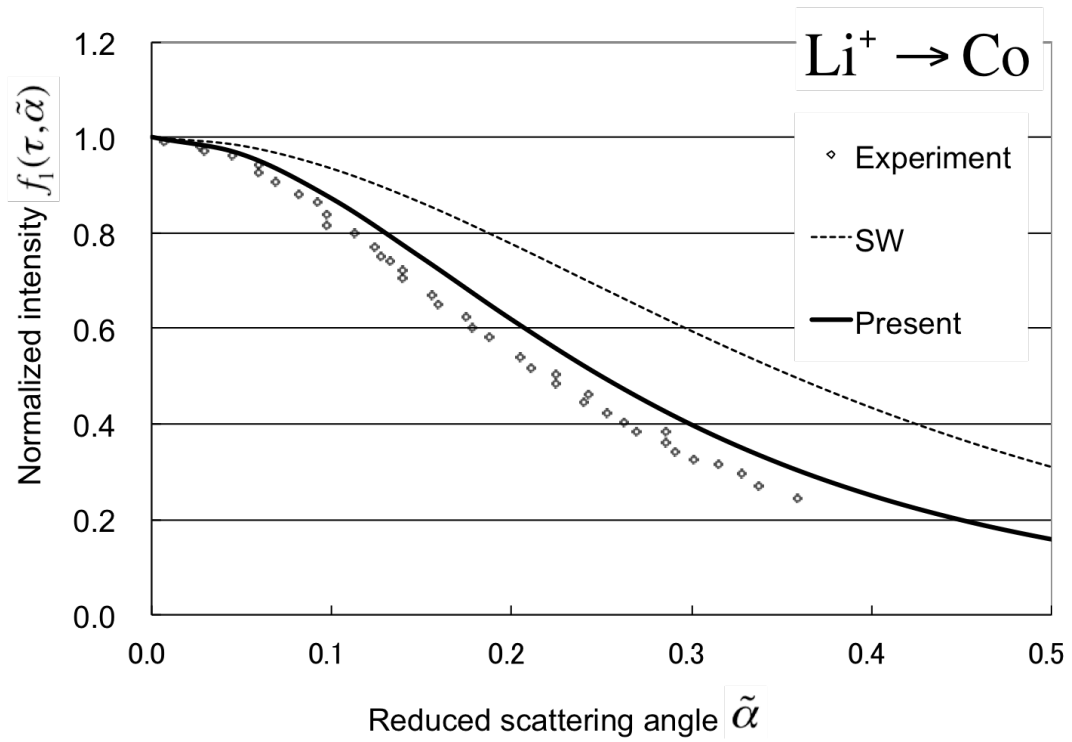


図 16: 実験データは図 12 と同じである。点線は a_L 、実線は a_{K-in} を用いて計算されている。

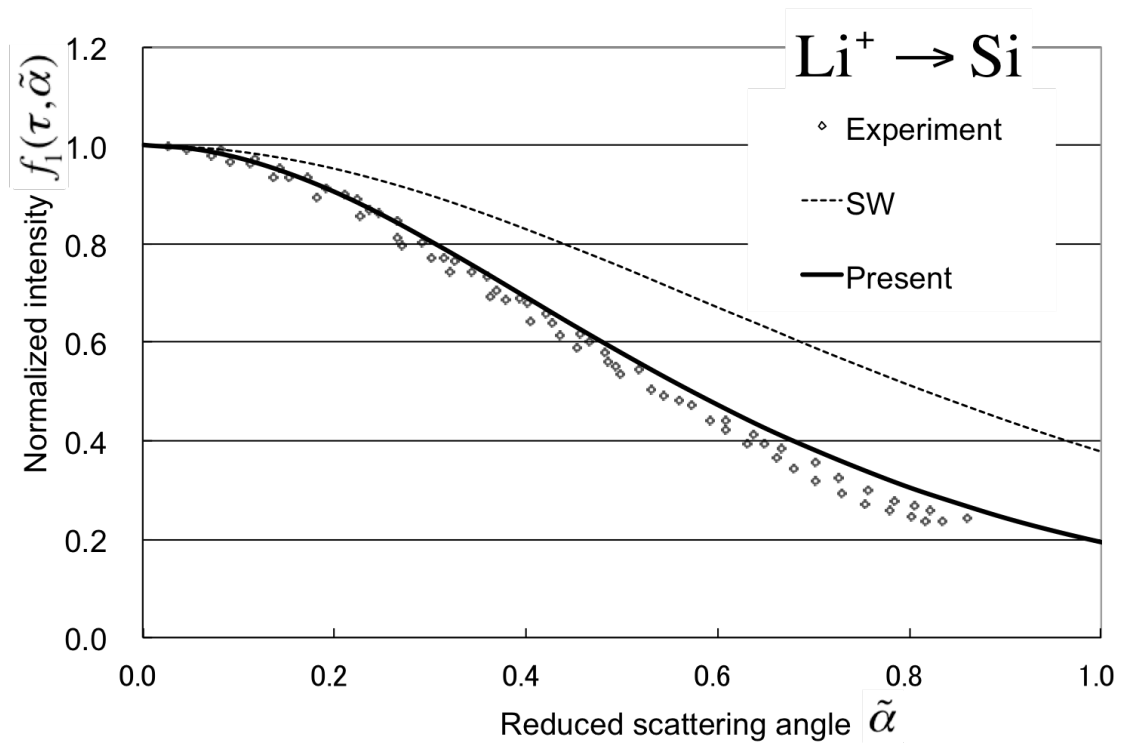


図 17: 実験データは図 12 と同じである。点線は a_L 、実線は a_{K-in} を用いて計算され

ている。

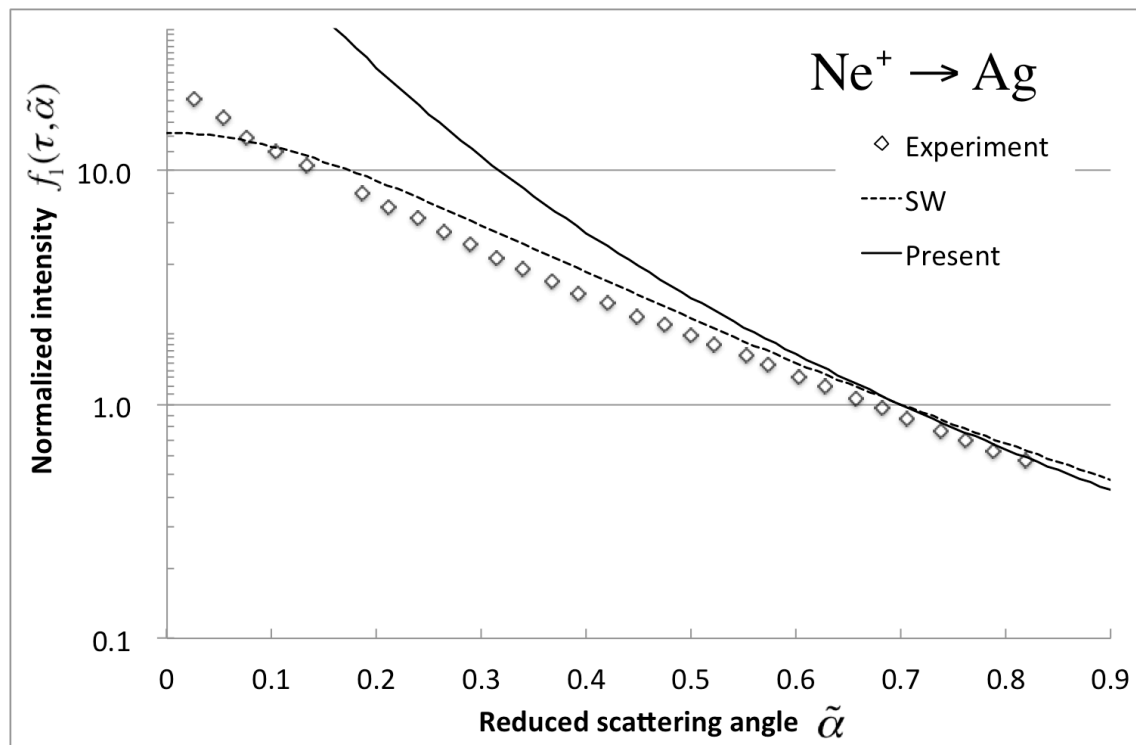


図 18 : 入射エネルギー500 keV であり膜厚 31.4nm での実験データである。点線は a_L 、実線は a_{K-in} を用いて計算されている。

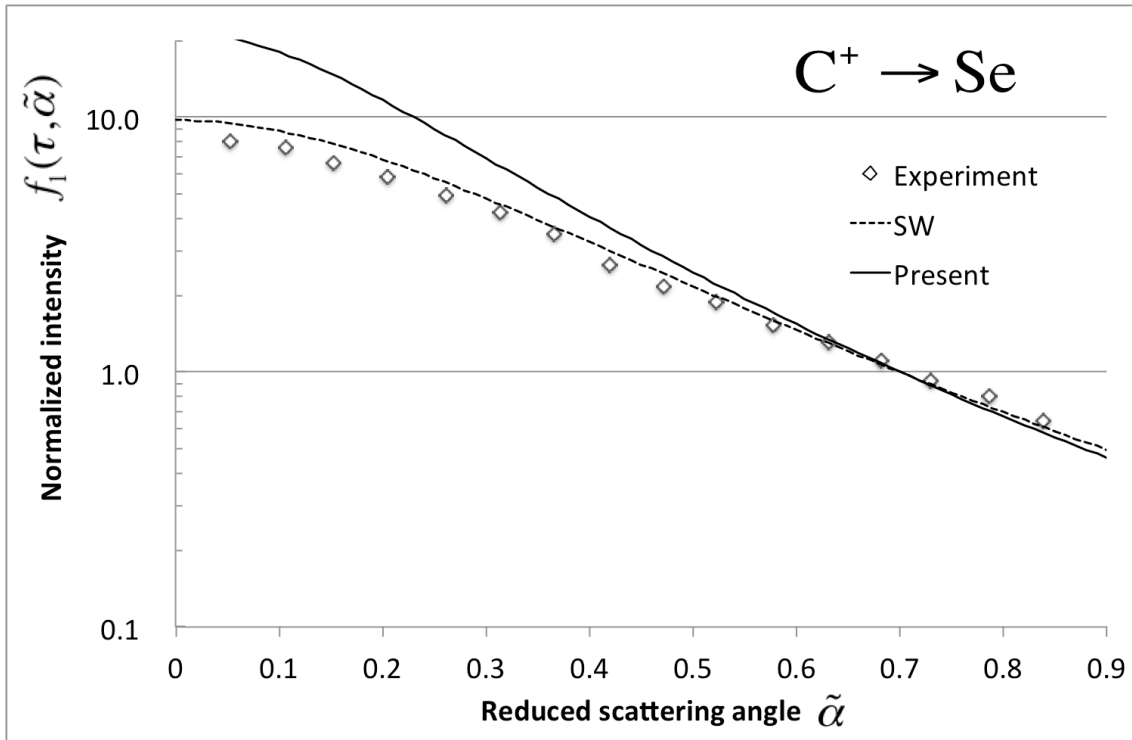


図 19：入射エネルギー500 keV であり膜厚 54.8nm の実験データである。点線は a_L 、実線は a_{K-in} を用いて計算されている。

図 1 4–図 1 9に見られる傾向として、入射体が標的原子の質量に対して相対的に軽い系では実験に近い値を与える。4. 4. 節で議論を行うが本研究で求めた a_{K-in} は比較的インパクトパラメーターの小さい散乱に対応している。なぜなら、マクローリン展開を用いて a_{K-in} を求めたからである。より具体的に述べると、3. 1. 節で、式 (3-1-13) と式 (3-1-15) とを等しいと仮定したことである。本研究での理論値と実験値とが良い一致を示したのは図 1 4、図 1 6 および図 1 7 である。これらは、比較的低エネルギー (数十 keV) での実験である。低エネルギーのため、標的物質との相互作用時間が比較的長い (インパクトパラメーターが小さい)。したがって、 a_{K-in} を求めた方法は図 1 4、図 1 6 および図 1 7 において良い一致を示したのであろう。

4. 4. 遮蔽定数 a_{K-in} と良く知られた遮蔽定数との比較

本節ではよく知られている遮蔽定数と、Kanekoの遮蔽定数 a_K （第3章 Ref. [3]を参照）、および本研究でイオン-中性原子系に対して導いた遮蔽定数 a_{K-in} （式 (3-1-17) を参照）との比較を行う。よく知られた遮蔽定数として、Bohr a_B [13]、Firsov a_F [14]、Lindhard a_L [1]、ZBL a_{ZBL} [15] がある。

$$a_B = \frac{a_0}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{1/2}} \quad (4-4-1)$$

$$a_F = \frac{0.8853a_0}{\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{2/3}} \quad (4-4-2)$$

$$a_L = \frac{0.8853a_0}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{1/2}} \quad (4-4-3)$$

$$a_{ZBL} = \frac{0.8853a_0}{\left(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}\right)} \quad (4-4-4)$$

図20では、 Li^+ ($Z_1 = 3$) 入射体に対する遮蔽定数を8種類の標的原子 (Z_2) に対して示している。図の作成にはSchawave [10] らの数表を参考にした。ここで、実験の遮蔽定数というのは実験データを再現できるように決めた遮蔽定数のことである。図から分かるのは、 Z_2 が小さいときは、本研究で導いた a_{K-in} が実験の遮蔽定数を再現しないが、 Z_2 が大きくなるにつれて、 a_{K-in} が実験に近い値を与える傾向があるということである。

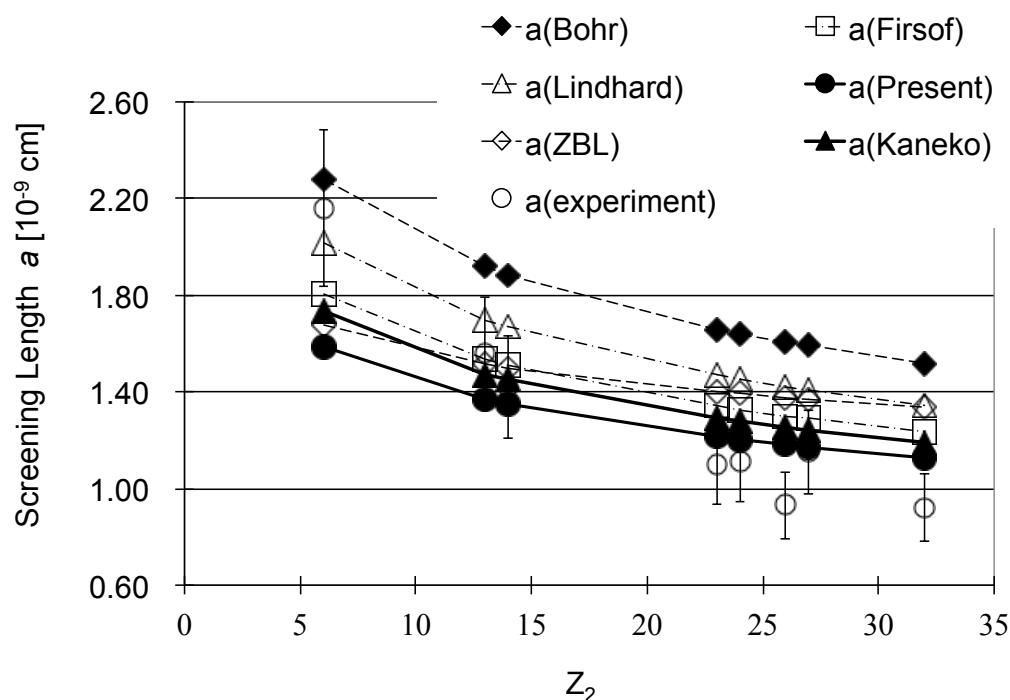


図 20: 良く知られた遮蔽定数と実験データおよび本研究で得られた遮蔽定数との比較。 a_{K-in} は、 $Z_1=3$ 、 $N_{e1}=2$ で計算している。

次に、表 1 を元にした考察を行う。この表では、[1 6-5 3] の実験データが 5 列目にまとめられている。この表を最初に作ったのは、Walkerらである [1 2]。若干の誤植があったので再編集を我々が行った。O'Connerらは、Firsovの遮蔽定数（式 (4-4-2)）を補正する式を与えた [5 4]。O'Connerと記した列にあるのは、この式に基づく補正係数である。PCF は、本研究の遮蔽定数 a_{K-in} （式 (3-1-17)）より求めたFirsovの遮蔽定数の補正係数である。我々の補正係数は、No. 1(He-Ti), 22(Na-Au), 26(K-Mo)および27(Kr-Cu)、に対しては良い結果を与えている。入射粒子および標的原子が、比較的重い場合に良い値を与える傾向がある。

我々は、第3章においてマクローリン展開を用いて遮蔽定数を求めた。つまり、近接衝突に対応している。しかしながら、小角散乱ということは、散乱中心から遠いところでの散乱である。では、なぜ、実験と一致する場合があるのか、というのが疑問になる。それは、Lindhardらの弾性散乱の微分散乱断面積が、小角でも、非小角でも、べき乗のポテンシャルを用いて評価すると、同じ表式を与えるということに起因するのであろう。つまり、SW理論における小角近似は、比較的制限が弱いといえる。

表1 低エネルギーイオン散乱における Firsov の遮蔽定数の補正係数

No.	Ion	Target	Energy (keV)	Exp. C	O'Connor's C	P C _F	Ref.
1	He	Ti	1.0	0.92	0.81	0.92	[16]
2	He	Mg	1.0	0.66	0.76	0.90	[12, 17]
3	He	Al	3.0	0.70	0.77	0.91	[12, 18]
4	He	Si	10.0	0.20	0.77	0.91	[12, 19]
5	He	Ni	1.0 to 5.0	0.57 to 0.70	0.85	0.92	[12, 18, 20]
6	He	Cu	0.6 to 3.0	0.53 to 0.75	0.85	0.92	[12, 21-25]
7	He	Pd	2.0 to 4.0	0.70	0.91	0.92	[12]
8	He	In	3.0	0.70	0.92	0.93	[12, 26]
9	He	Pt	2.0 to 4.0	0.72 to 0.74	1.00	0.94	[12, 27]
10	He	Au	2.0 to 4.0	0.75	1.00	0.93	[12]
11	Li	Al	0.5	0.71	0.78	0.89	[12, 28]
12	Li	Si	5.0	0.60	0.79	0.90	[12, 29]
13	Li	Ni	0.5 to 5.0	0.60 to 0.70	0.86	0.91	[12, 28, 29, 30]
14	Li	Cu	5.0	0.60	0.86	0.91	[12, 31]
15	Li	Sn	0.5	0.84	0.94	0.92	[12, 30]
16	Ne	S	5.0	0.72	0.86	0.87	[12, 32]
17	Ne	Ni	0.5 to 6.0	0.58 to 0.72	0.92	0.89	[12, 32, 20, 33-37]
18	Ne	Cu	5.0 to 10.0	0.75 to 0.77	0.92	0.89	[12, 23, 38, 39]
19	Ne	Ag	2.9	0.80	0.99	0.90	[12, 40]
20	Ne	Pt	2.0	0.85	1.08	0.90	[12, 41]
21	Na	Cu	1.5 to 5.0	0.70 to 0.77	0.93	0.88	[12, 42, 43]
22	Na	Au	0.9 to 1.5	0.90 to 0.95	1.09	0.90	[12, 43, 44]
23	Ar	Mg	4.0	0.70	0.88	0.86	[12, 45]

24	Ar	Ni	6.0	0.70	0.97	0.87	[12, 37, 46]
25	Ar	Cu	6.0 to 10.0	0.65	0.97	0.87	[12, 47-50]
26	K	Mo	0.5	0.85	1.03	0.88	[12, 51]
27	Kr	Cu	10.0	0.75 to 0.88	1.05	0.86	[12, 39, 52, 53]

表 1 において、Ionは入射粒子、Targetは標的原子、Energyは入射エネルギー、O'Conner's CはFirsovの遮蔽定数を補正する値、P CFは a_{K-in} より求めたFirsovの遮蔽定数に対する補正係数である。

4. 5. 多重散乱理論における電子的エネルギー損失と、核的エネルギー損失との比較

本節では多重散乱における角度広がり（散乱角分布）および横広がりに対する電子的エネルギー損失と核的エネルギー損失の影響を数値計算によって調べる。以下に示す図 2 1 から図 2 8 までが、これら 2 種類のエネルギー損失の比較である。図の中に (a) と表記されたものは角度広がり、(b) は横広がり of 計算結果である。図 2 9 と図 3 0 にはcombinedモデルの計算結果を示す[5 5]。

電子的エネルギー損失による角度広がり of 計算は 3. 4. 節の式 (3-4-1) (3-4-2) (3-4-3) および (3-4-4) によって、横広がり of 計算は式 (3-4-1) (3-4-3) (3-4-5) および (3-4-6) によって行った。また、combinedモデルによる計算は式 (2-5-6) (2-5-7) によって行った。これらの全ての計算は、入射粒子および標的原子が共に炭素 (C) の場合に対して行っている。

図 2 1 と図 2 2 は、標的 of 換算膜厚 τ が 5、入射エネルギーが 27keV での結果である。これら 2 つ of 図から、核的エネルギー損失を無視することができない場合があることがわかる。このことに関して、VA of 論文中では、全く触れられていない。VA は、核的阻止能を無視する理由も記述していない。したがって、我々の提案した核的阻止能を考慮するということは、これら 2 つ of 図から支持される。

図 2 3 および図 2 4 は、換算膜厚 τ を 20 にして、入射エネルギーを 0.2MeV にしたときの計算結果である。これらの場合には、電子的阻止能によるエネルギー損失効果が核的阻止能によるものよりも明らかに大きくなり、図 2 1 と図 2 2 の結果と比較すると、2 つ of エネルギー損失効果が逆転していることが分かる。

図 2 5, 図 2 6 および図 2 7、図 2 8 は、換算膜厚 τ がそれぞれ 40 および 80 であり、入射エネルギーは共に 0.2MeV である。これらの場合には電子的阻止能によるエネルギー損失効果が核的阻止能によるものよりも明らかに大きく、図 2 3 と図 2 4 の結果とを合わせると、 τ の増加につれて差が大きくなることが分かる。

次に、図 2 9 および図 3 0 of combinedモデルによる計算に関して説明する。これらは共に入射エネルギーは 0.2MeV であり、換算膜厚 τ がそれぞれ 20 と 40 である。縦軸は換算された散乱角、横軸は換算された横広がりを示している。図

29および図30において、 $G(\tau, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta})$ の強度が50%の値をプロットしている。Combinedモデルは一つの式で角度分布($\tilde{\alpha}$)と横広がり($\tilde{\beta}$)を表すことができる。図29の場合には、核的阻止能によるエネルギー損失効果も大きいことがわかる。しかし、図30になると、電子的阻止能によるエネルギー損失効果が支配的になっている。

また、本研究では、エネルギー比 μ_n (式(3-3-7))と μ_e (式(3-2-1))を、標的膜厚の関数として取り扱っている。これは、VA理論では独立に扱われていた。しかしながら、エネルギー損失を膜厚の関数として取り扱うことは自然な考えである。なぜなら、核的エネルギー損失も電子的エネルギー損失も、すでに理論式があるからである。

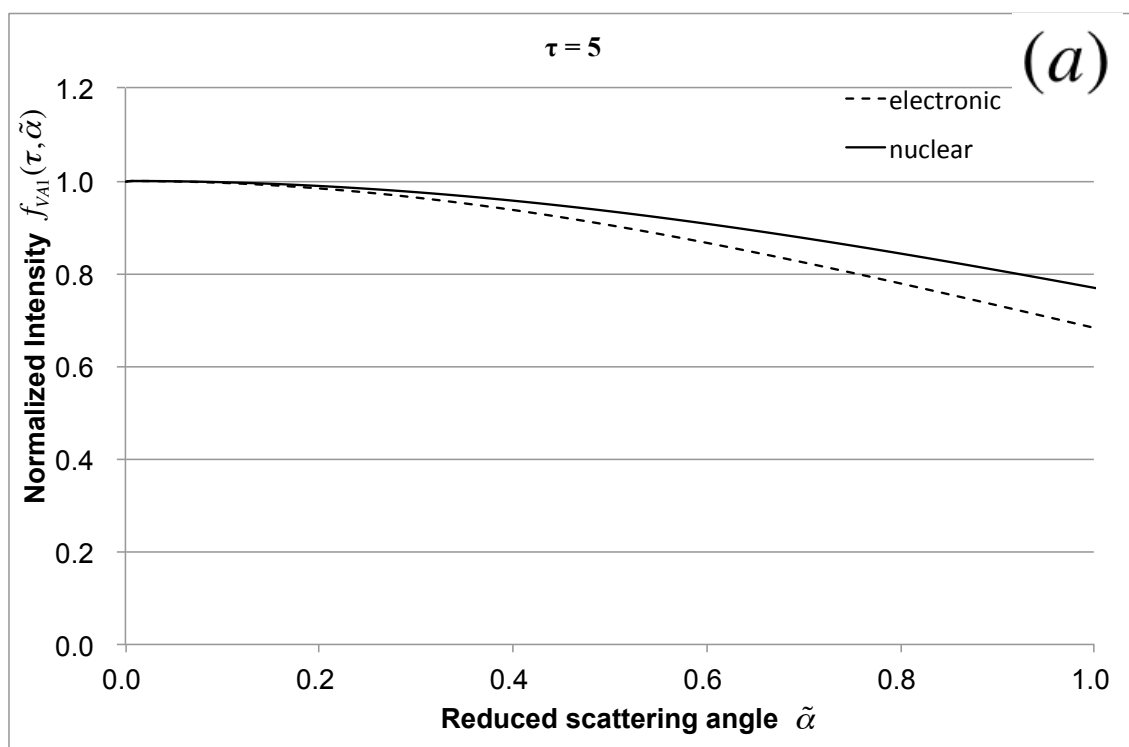


図 21 : 換算された膜厚 $\tau = 5$ 、入射エネルギーは 27 keV である。破線 : 電子的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。実線 : 核的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。

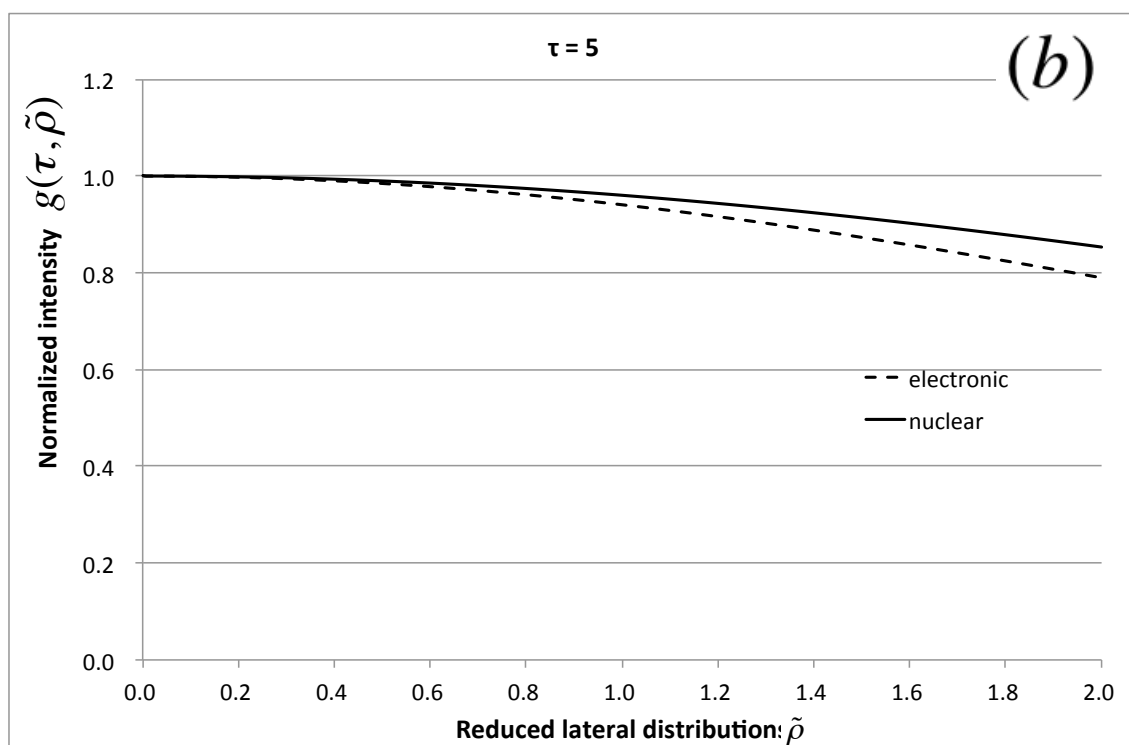


図 22 : 換算された膜厚 $\tau = 5$ 、入射エネルギーは 27 keV である。破線 : 電子的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。実線 : 核的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。

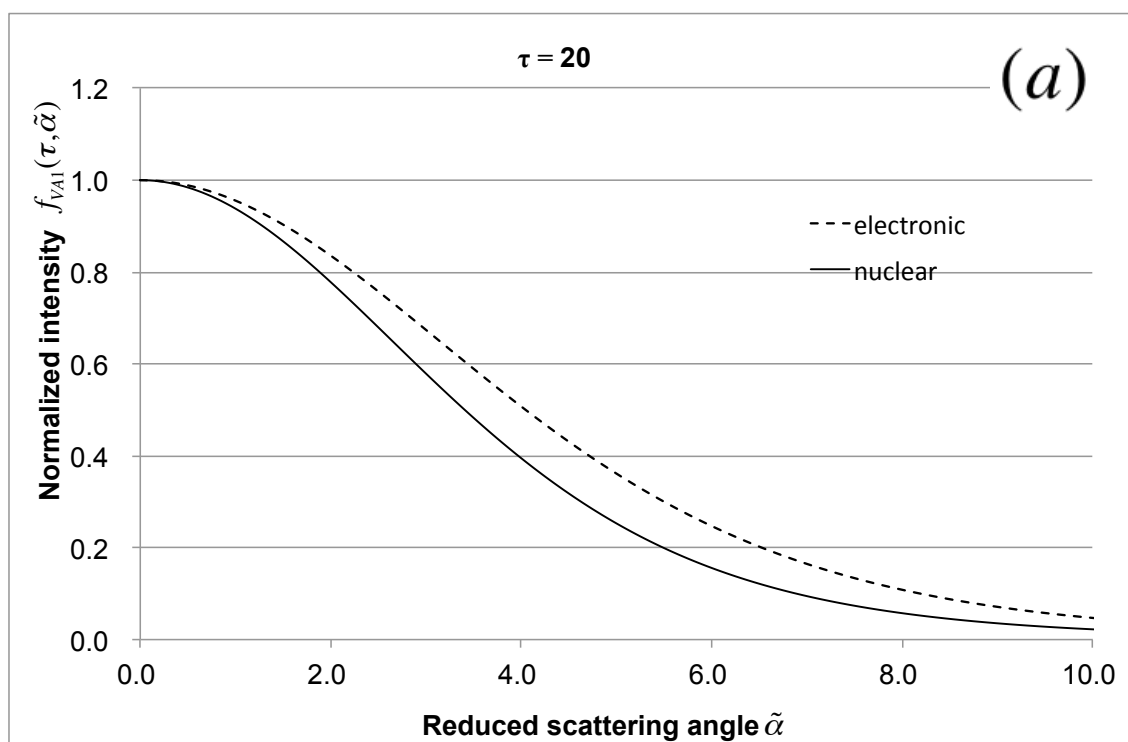


図 23：換算された膜厚 $\tau = 20$ 、入射エネルギーは 0.2 MeV である。破線：電子的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。実線：核的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。

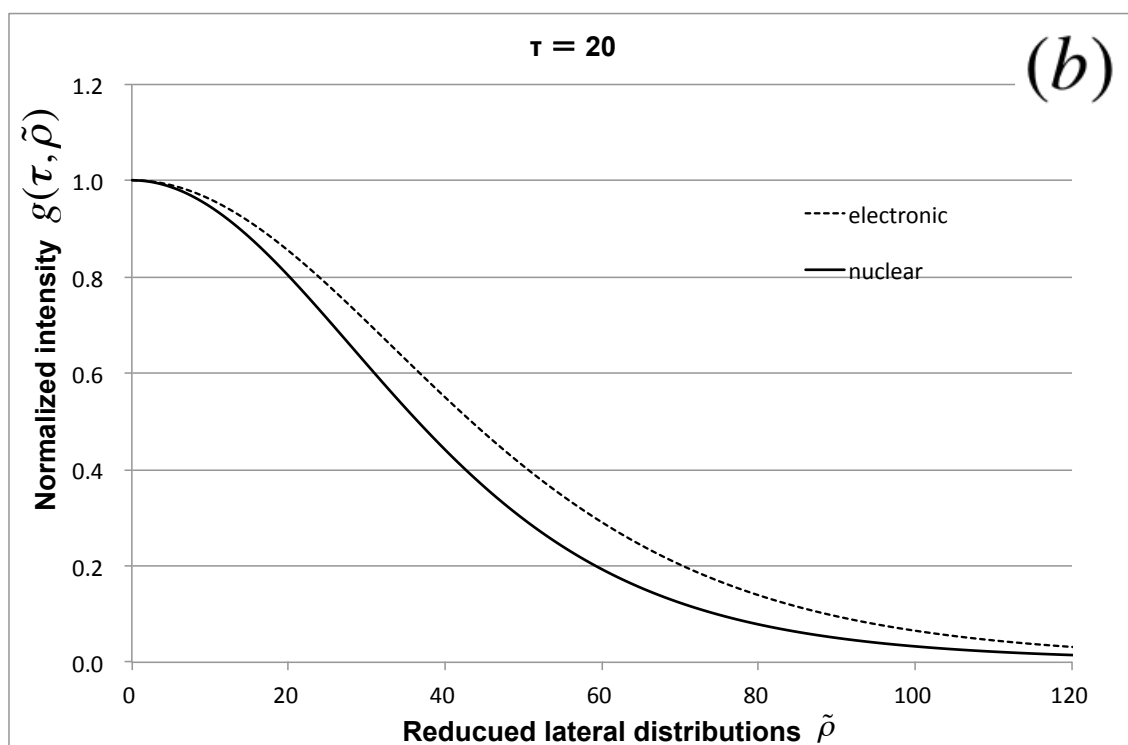


図 24：換算された膜厚 $\tau = 20$ 、入射エネルギーは 0.2 MeV である。破線：電子的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。実線：核的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。

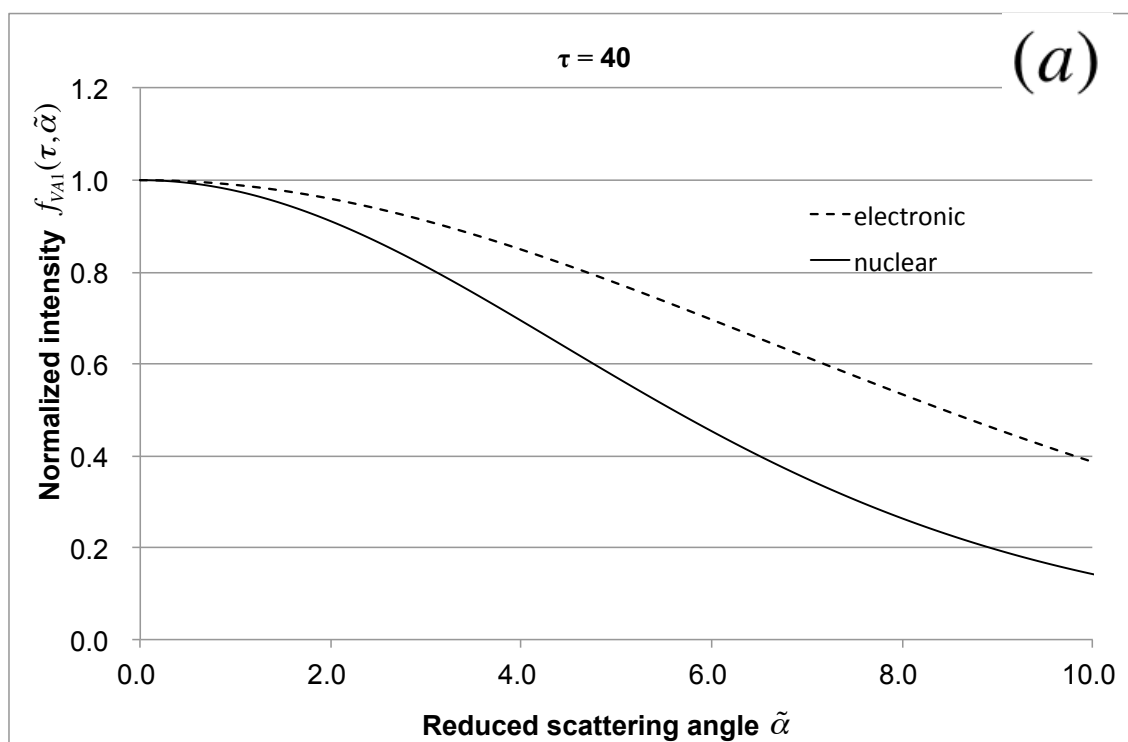


図 25：換算された膜厚 $\tau = 40$ 、入射エネルギーは 0.2 MeV である。破線：電子的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。実線：核的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。

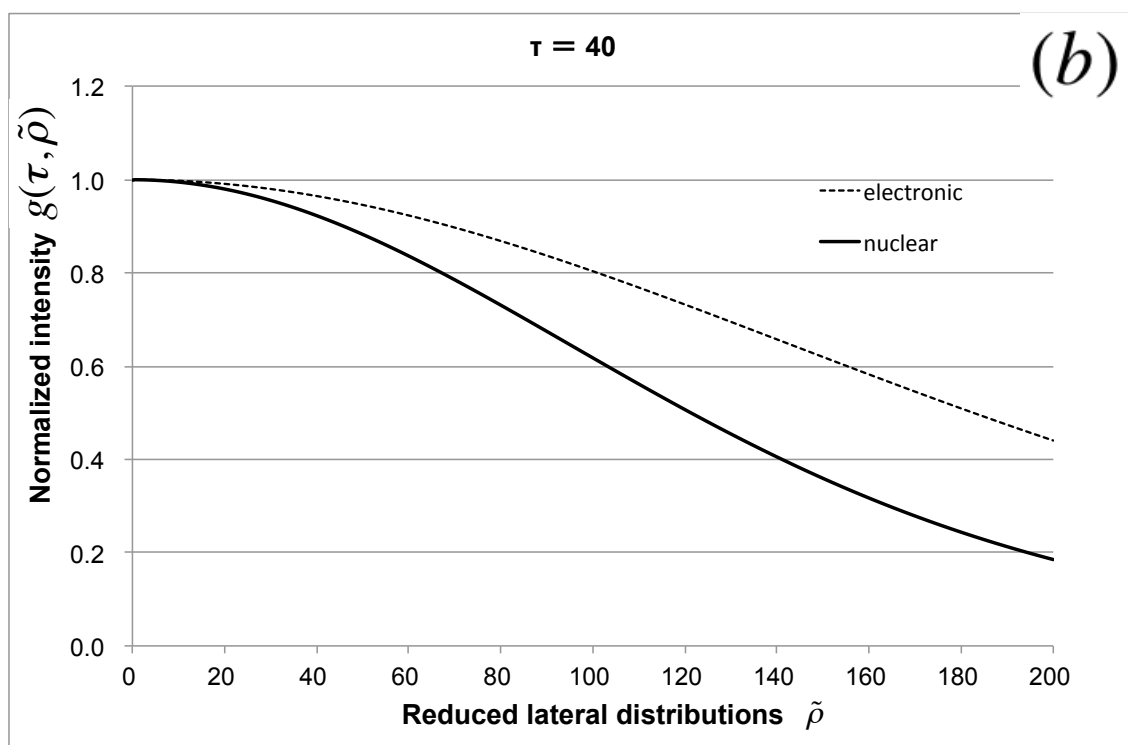


図 26：換算された膜厚 $\tau = 40$ 、入射エネルギーは 0.2 MeV である。破線：電子的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。実線：核的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。

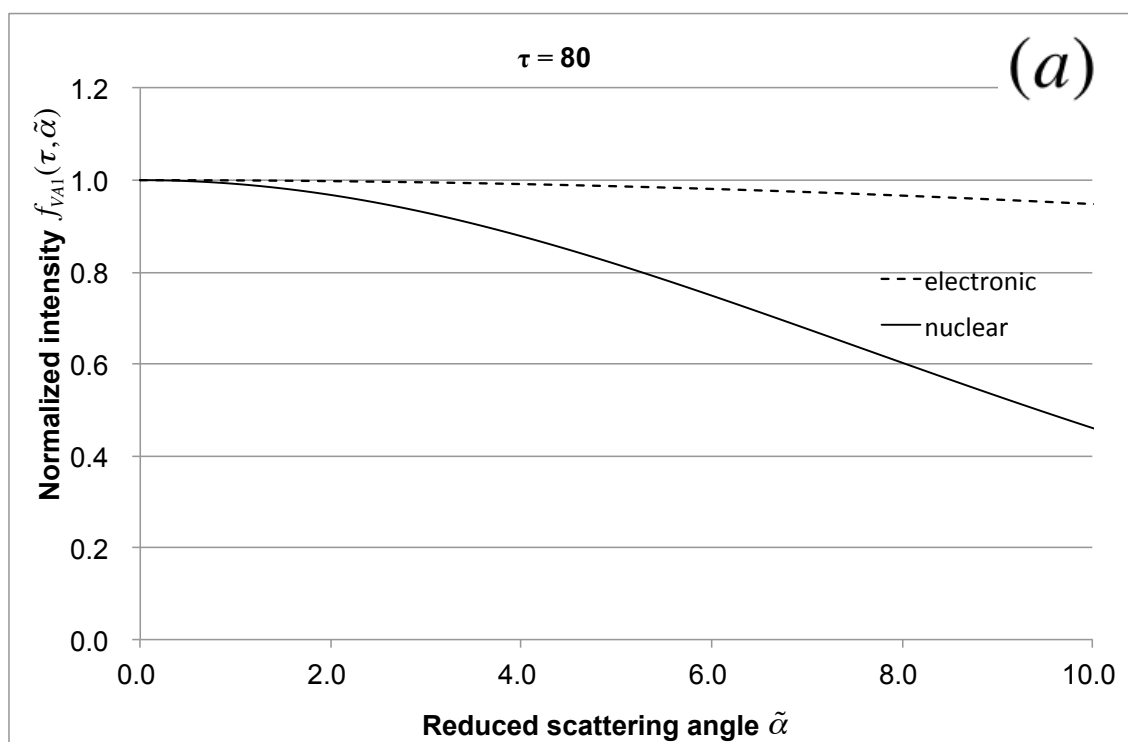


図 27：換算された膜厚 $\tau = 80$ 、入射エネルギーは 0.2 MeV である。破線：電子的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。実線：核的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。

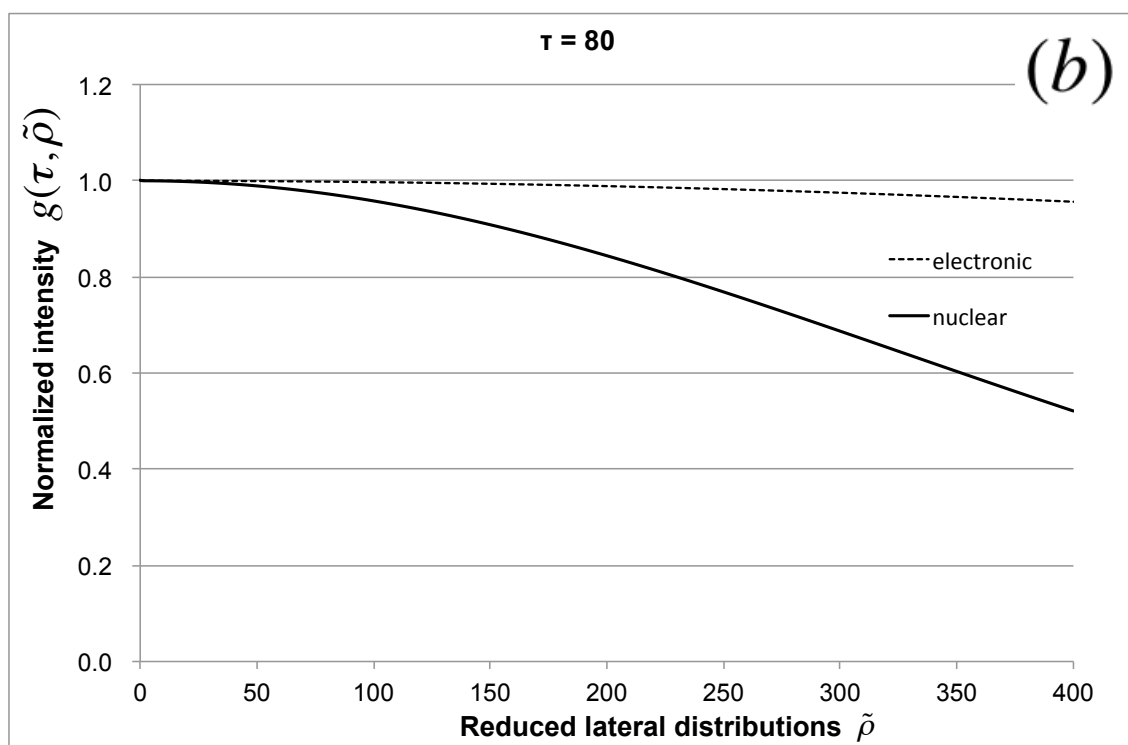


図 28：換算された膜厚 $\tau = 80$ 、入射エネルギーは 0.2 MeV である。破線：電子的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。実線：核的阻止能によるエネルギー損失のみを含む理論曲線。

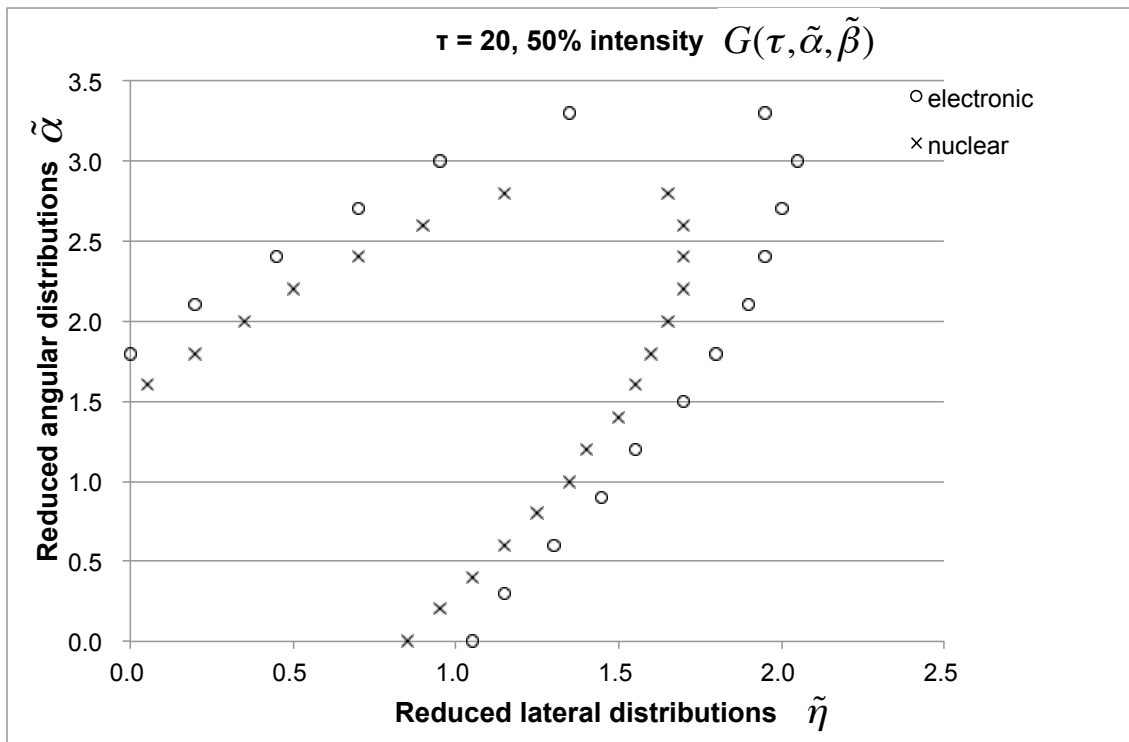


図 29 : Combined モデルのグラフ。○ : 電子的阻止能のみによるエネルギー損失を含む理論値。× : 核的阻止能のみによるエネルギー損失を含む理論値。入射エネルギーは 0.2 MeV。

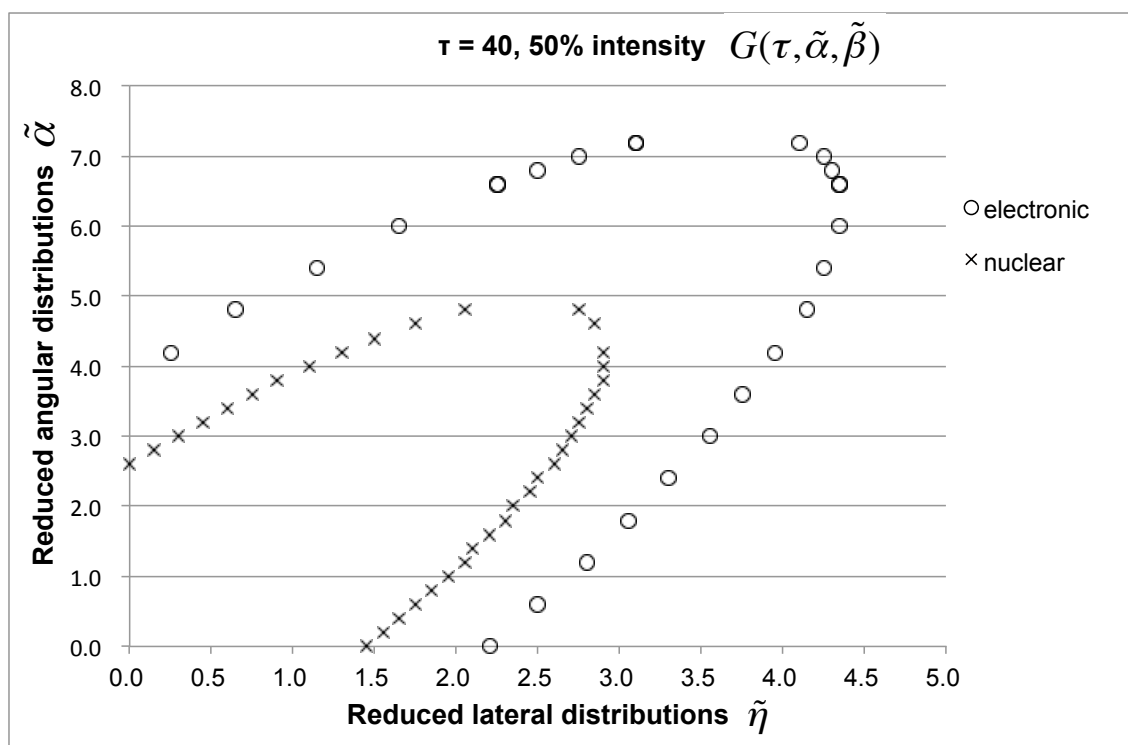


図 30 : Combined モデルのグラフ。○ : 電子的阻止能のみによるエネルギー損失を含む理論値。× : 核的阻止能のみによるエネルギー損失を含む理論値。入射エネルギーは 0.2 MeV。

4. 6. Switchingモデルの利点と欠点

Switchingモデルの良いところは、1つの式に核的阻止能によるエネルギー損失効果と電子的阻止能によるエネルギー損失効果のを含むことである。これら2つの阻止能によるエネルギー損失は今まで別々に取り扱われてきた。しかしながら、Switchingモデルによって、ひとまとめに取り扱うことが可能になった。

このモデルの難点は、数値計算をすることである。入射粒子のエネルギーが低速かつ電子的阻止能が優勢な領域であるとする。すると核的阻止能が優勢になる前に、エネルギーのほとんどを電子的阻止能によって失っているからである。また、低エネルギーであるので、散乱角が大きく、小角近似の制限に収まらない。また、収まったとしても、核的阻止能が優勢である領域は、非常に薄い膜厚を取り扱うことになる。これらが、Switchingモデルの欠点である。

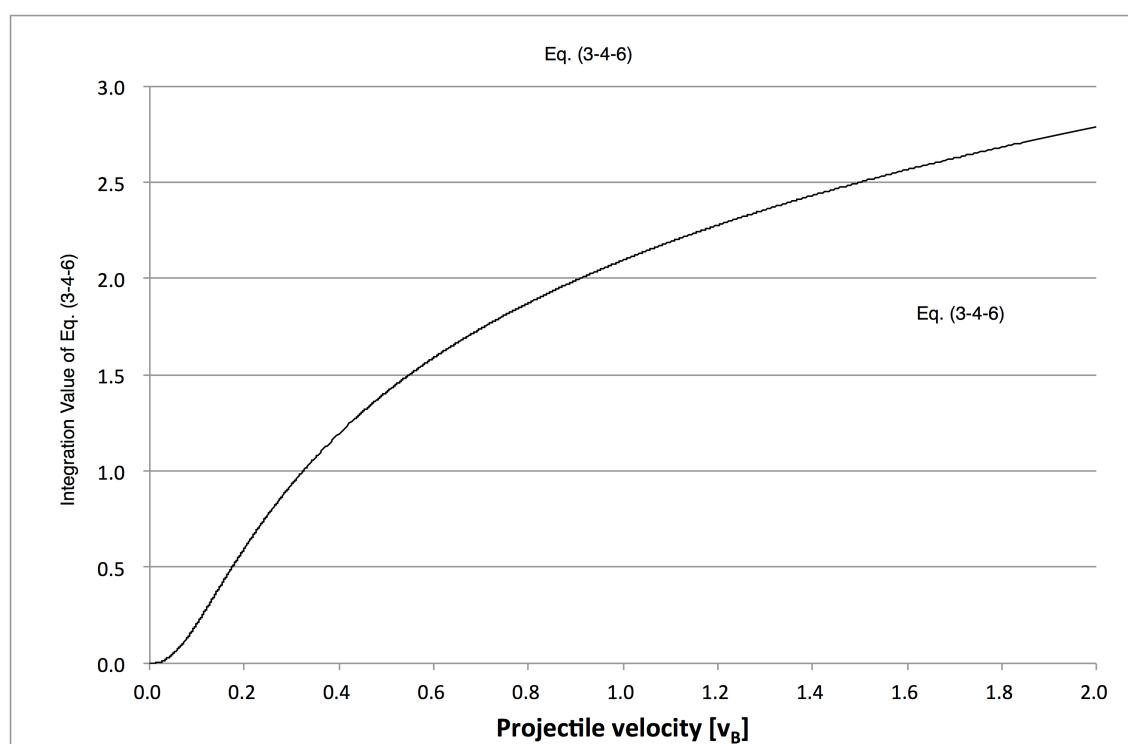


図 31 : 式 (3-4-6) のグラフ。積分の値は速度があるところまでは急に上昇し、そしてあるところで緩やかな上昇になる。

図 3 1 を使って説明をする。式 (3-4-6) がほとんど一定値であるような領域でのみ、核的阻止能のエネルギー比を計算できる。なぜなら、式 (3-4-6) が入射エネルギーと出射エネルギーに対してほとんど一定であるという制限の元でエネルギー比を求めたからである。ここで、便利のために再び式 (3-4-6) を示す。

$$\int_0^{\varepsilon_i} dt^{1/2} f(t^{1/2}) \approx \int_0^{\varepsilon_f} dt^{1/2} f(t^{1/2}) \approx \text{const}$$

したがって、物理的観点から意味のあるのは、穏やかに上昇している領域または入射速度と出射速度の差がほとんどない領域の 2 つである。穏やかに上昇している領域は、電子的阻止能が優勢であれば、採用できない。したがって、上昇が急で且つ速度差がほとんどない領域で数値計算をする必要がある。

4. 7. まとめ

Lindhardの $f_L(t^{1/2})$ をいろいろの研究者が求めた値と比較した。本研究で求めた $f_L(t^{1/2})$ は他の研究者が求めた値と似ている。しかしながら、スタンダードなTFポテンシャルよりもTFMのほうが遮蔽が強いという結果が得られた。

小角多重散乱のSW理論とLindhardの遮蔽定数を用いて、実験データと理論値の比較をした。この場合、実験値を再現できる場合もあれば、再現できない場合もあった。

新しい遮蔽定数と既存の遮蔽定数との比較を行った。新しい遮蔽定数 a_{K-in} を用いて、今までの遮蔽定数では再現できなかった実験データとの良い一致を得ることに成功した。

電子的エネルギー損失の効果、および核的エネルギー損失の効果と比較した。その結果、核的エネルギー損失を無視できない場合があることがわかった。

Switchingモデルの利点と欠点をはっきりと示すことができた。

4. 8. 参考文献

- [1] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 36 (10) (1968).
- [2] L. Meyer, Phys. Stat. Sol. (b) 44 (1971) 253.
- [3] P. Sigmund, K. B. Winterbon, Nucl. Instr. Meth. 119 (1974) 541.
- [4] G. P. Muller, Naval Research Laboratory Report, 8207 (1978)
- [5] S. Ikegami, T. Kaneko, Bull. Okayama Univ. Sci. A 42 (2006) 21.
- [6] W. Moller, G. Pospiech, G. Schrieder, Nucl. Instr. Meth. 123 (1975) 265.
- [7] H. F. Schaffler, Dissertation IPP 9/14, Institute fur Plasmaphysik, Garching b. Munchen.
- [8] G. Hogberg, H. Norden, H. G. Berry, Nucl. Instr. and Meth. **90** (1970) 283
- [9] G. Spahn, K. O. Groneveld, Nucl. Instr. and Meth. **123** (1975) 425
- [10] S. Schwave, R. Stolle, phys. stat. sol. (b) **47**, 111 (1971)
- [11] H. H. Andersen, J. Bottiger, H. Knudsen, P. M. Petersen, T. Wohlenberg, Phys. Rev. A **10** (1974) 1568.
- [12] R.P. Walker, D.J. Martin, Surf. Sci. 118 (1982) 659.
- [13] N. Bohr, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **18**, No. 8 (1948).
- [14] O. B. Firsov, Sov. Phys. JETP **6**, (1958) 534.
- [15] J. F. Zieger, J. P. Biersack and U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids, (Pergmon, New York, 1985).
- [16] K. Komaki, A. Ootuka and F. Fujimoto, Jpn. J. Appl. Phys. **21** (1982) L521.
- [17] H. Nakamatsu, A. Sudo and S. Kawai, Surf. Sci. **194** (1988) 265.
- [18] R-P. Blum, D. Ahlbehrendt and H. Niehus, Surf. Sci. **366** (1996) 107.

- [19] K. Kawamoto, K. Inari, T. Mori and K. Oura, Jpn. J. Appl. Phys. **34** (1995) 4917.
- [20] Th. Fauster and M. H. Metzner, Surf. Sci. **166** (1986) 29.
- [21] M. Draxler, M. Walker and C. F. McConville, Nucl. Instr. and Meth. B **249** (2006) 812.
- [22] D. Primetzhofer, S. N. Markin, M. Draxler, R. Beikler, E. Taglauer and P. Bauer. Surf. Sci. **602** (2008) 2921.
- [23] H. Durr, Th. Fauster and R. Schneider, Surf. Sci. **244** (1991) 237.
- [24] R. Spitzl, H. Niehus and G. Comsa, Surf. Sci. Lett. **250** (1991) L355.
- [25] W. Takeuchi, Nucl. Instr. and Meth. B **267** (2009) 1952.
- [26] T. D. Veal, P. D. C. King, M. Walker, C. F. McConville, H. Lu and W. J. Schaff, Physica Scripta B **401-402** (2007) 351.
- [27] W. Takeuchi, Jpn. J. Appl. Phys. **47** (2008) 7285.
- [28] D. R. Mullins and S. H. Overbury, Surf. Sci. **199** (1988) 141.
- [29] J. H. Huang and R. S. Williams, Solid State Commun. **60** (1986) 689.
- [30] Y. D. Li, L. Q. Jiang and B. E. Koel, Phys. Rev. B **49** (1994) 2813.
- [31] J. A. Yarmoff, D. M. Cyr, J. H. Huang, S. Kim, and R. S. Williams, Phys. Rev. B **33** (1986) 3856.
- [32] Th. Fauster, H. Durr and D. Hartwig, Surf. Sci. **178** (1986) 657.
- [33] J. A. Yarmoff and R. S. Williams, Surf. Sci. **127** (1983) 461.
- [34] C. C. Hsu and J. W. Rabalais, Surf. Sci. **256** (1991) 77.
- [35] W. Soszk, Surf. Sci. **249** (1991) 289.
- [36] W. Soszk, Surf. Sci. **287-288** (1993) 69.
- [37] L. K. Verheij, J. A. van den Berg and D. G. Armour, Surf. Sci. **84** (1979) 408.
- [38] E. van de Riet, J. B. J. Smeets, J. M. Fluit and A. Niehaus, Surf. Sci. **214** (1989) 111.
- [39] B. Poelsena, L. K. Verhey and A. L. Boers, Surf. Sci. **64** (1977) 537.
- [40] G. Bracco, M. Canaepa, P. Cantini, F. Fossa, L. Mattera, S. Terreni and D. Truffelli, Surf. Sci. **269-270** (1992) 61.
- [41] W. Takeuchi and Y. Yamamura, Nucl. Instr. and Meth. B **72** (1992) 363.
- [42] T. Taglauer and R. Beikler, Vacuum **73** (2004) 9.
- [43] A. J. Algra, E. P. Th. M. Suurmeijer and A. L. Boers, Surf. Sci. **128** (1983) 207.
- [44] K. Oura, M. Katayama, F. Shoji and T. Hanawa, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 1486.

- [45] S. A. Cruz, E. V. Alonso, R. P. Walker, D. J. Martin and D. G. Armour, Nucl. Instr. and Meth. **194** (1982) 659.
- [46] D. S. Karpuzov, I. N. Evdokimov, D. G. Armour and G. Carter, Phys. Lett. A **68** (1978) 485.
- [47] S. B. Luitjens, A. J. Algra, E. P. Th. M. Suurmeijer and A. L. Boers, Surf. Sci. **99** (1980) 631.
- [48] S. B. Luitjens, Th. R. Verbeek, A. J. Algra and A. L. Boers, Surf. Sci. **76** (1978) L609.
- [49] A. J. Algra, S. B. Luitjens, E. P. Th. M. Suurmeijer and A. L. Boers, Surf. Sci. **100** (1980) 329.
- [50] S. B. Luitjens, A. J. Algra, E. P. Th. M. Suurmeijer and A. L. Boers, Surf. Sci. **100** (1980) 315.
- [51] S. H. Overbury, Nucl. Instr. and Meth. B **2** (1984) 448.
- [52] B. Poetsema, L. K. Verheij and A. L. Boers, Surf. Sci. **133** (1983) 344.
- [53] R. P. Walker and D. J. Martin, Surf. Sci. **118** (1982) 659.
- [54] D.J. O'Connor, J.P. Biersack, Nucl. Instrum. Meth. B **15** (1986) 14.
- [55] S. Ikegami, Nucl. Instr. Meth. B **316** (2013) 222.

第5章 結論

5. 1. 本研究のまとめと今後の課題

本論文では、まず多重散乱問題の基礎となっているいくつかの重要な論文の概要を述べ、これを基に研究の新しい展開として、相互に関係する 3 つの課題についての理論的研究を報告した。

最初に、入射粒子として中性原子を仮定していた SW 理論に対して、入射粒子として電荷状態（イオン）を考慮したイオン-中性原子系に対する遮蔽定数の式を Thomas-Fermi-Moliere (TFM) ポテンシャルに基づいて導いた。この式の導出は、Kaneko が孤立中性原子間の遮蔽定数を TFM ポテンシャルから導出した手法に準じた。得られた遮蔽定数の数値計算をいくつかの標的原子種に対して行った結果、原子種が重くなるほど実験値に近づくことがわかった。また、この新しい遮蔽定数を使った多重散乱角分布を、いくつかのイオン-原子系に対して行った。 $\text{Ar}^{q+} - \text{Ar}$ 系 (q は価数) に対する計算は、電荷の効果は価数が低いときは強くないが、価数が高くなると無視できないことを示した。また 1 価イオン-中性原子系の多重散乱角分布は、軽い入射イオンと比較的重い標的原子の組合せに対して実験との良い一致を示した。

次に、Valdes-Arista (VA) の多重散乱理論で無視されていた核的阻止能によるエネルギー損失効果を考慮した。また、このVA理論では電子的阻止能によるエネルギー損失と標的膜厚が独立に取り扱われていたが、本研究ではKanekoの電子的エネルギー損失理論とLindhardらの核的エネルギー損失理論とを用いて両者を関連付ける理論を展開した。いくつかの数値計算例は、低エネルギー散乱では核的阻止能の効果が電子的阻止能の効果を上回り、後者に対して無視できないことを示した。一方、高エネルギー散乱では逆に電子的阻止能の効果が核的阻止能の効果より優勢になり、標的膜厚の増加につれてその差が大きくなることを示した。最後に、Switchingモデルという、電子的エネルギー損失と核的エネルギー損失とを同時に含む 1 つの式を提案することに成功した。ただし、このモデルは数値計算に困難さがある。

今後の課題として、小角近似を使っていない、Goudsmit-Saunderson理論 (GS) [1] にエネルギー損失を導入することである。そして、GS理論にSwitchingモ

デルを適用することも目的である。また、**Switching**モデルの応用として、飛程の理論を作ることも目的である。

5. 2. 参考文献

[1] S. Goudsmit, Saunderson, Phys. Rev. 57 (1940) 24.

S. Goudsmit, Saunderson, Phys. Rev. 58 (1940) 36.

6. 付録

6. 1. Lindhardらの微分散乱断面積に関して

ここでは、小角近似の式と、非小角の式とが同じ表式を与えることを示す[1]。

散乱角 θ は、

$$\theta = \frac{b}{p} g\left(\frac{p}{a}\right) \quad (6-1-1)$$

$$g\left(\frac{p}{a}\right) = \int_0^{\pi/2} d\phi \cos(\phi) \left\{ u\left(\frac{p}{a \cos(\phi)}\right) - \frac{p}{a \cos(\phi)} u'\left(\frac{p}{a \cos(\phi)}\right) \right\} \quad (6-1-2)$$

$$b = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{\mu v_0^2} \quad (6-1-3)$$

となる。ここで、 b はラザフォード散乱における最近接距離である。

次に、逆幂乗のポテンシャルを用いると、式(6-1-1)の左辺が θ のときおよび $\sin(\theta/2)$ のときのどちらに対しても同じ $d\sigma$ を与えることを示す。まず、遮蔽関数 $u(\mathbf{r}/a)$ を r の関数として次のように置く。

$$u\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{k_s}{s} \left(\frac{a}{r}\right)^{s-1} \quad (6-1-4)$$

ここで、 k_s と s は定数である。式(6-1-4)を用いると、式(6-1-2)は、

$$g\left(\frac{p}{a}\right) = \left(\frac{a}{p}\right)^{s-1} k_s \int_0^{\pi/2} d\phi \cos^s(\phi) \quad (6-1-5)$$

となる。ゆえに、

$$\begin{aligned}
\theta &= g\left(\frac{p}{a}\right), \\
&= \frac{b}{p} \left(\frac{a}{p}\right)^{s-1} k_s \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^s(\varphi),
\end{aligned} \tag{6-1-6}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{ba^{s-1}k_s}{p^s} \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^s(\varphi), \\
&= \frac{ba^{s-1}k_s \gamma_s}{p^s},
\end{aligned} \tag{6-1-7}$$

となる。なおここで、

$$\gamma_s = \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^s(\varphi), \tag{6-1-8}$$

である。ゆえに、衝突径数 p は、

$$p = \left(\frac{ba^{s-1}k_s \gamma_s}{\theta} \right)^{1/s}, \tag{6-1-9}$$

となる。そして、

$$\frac{dp}{d\theta} = \frac{1}{s} \left(\frac{ba^{s-1}k_s \gamma_s}{\theta} \right)^{\frac{1-s}{s}} \left(-\frac{ba^{s-1}k_s \gamma_s}{\theta^2} \right), \tag{6-1-10}$$

であり、また

$$2pdp = -2 \left(\frac{ba^{s-1}k_s \gamma_s}{\theta} \right)^{\frac{1}{s} + \frac{1-s}{s} + \frac{s}{s}} \frac{1}{s\theta} d\theta, \tag{6-1-11}$$

である。そして、エネルギー輸送 T は、 $\theta \ll 1$ ならば、

$$T = T_m \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cong T_m \frac{\theta^2}{4}, \quad (6-1-12)$$

であり、ここで、

$$T_m = \frac{4m_1m_2}{(m_1+m_2)^2} \frac{1}{2} m_1 v_0^2, \quad (6-1-13)$$

である。ゆえに

$$\begin{aligned} 2pdp &= -2 \left(\frac{b^2 a^{2s-2} k_s^2 \gamma_s^2}{\theta} \right)^{\frac{1}{s}} \frac{1}{s\theta} d\theta, \\ &= -2 \left(\frac{b^2 a^{2s-2} k_s^2 \gamma_s^2 T_m}{4T} \right)^{\frac{1}{s}} \frac{1}{s\theta} d\theta, \\ &= -2 \left(\frac{b^2 a^{2s-2} k_s^2 \gamma_s^2 T_m}{4} \right)^{\frac{1}{s}} \frac{1}{2sT^{1+1/s}} dT \end{aligned} \quad (6-1-14)$$

したがって、微分散乱断面積 $d\sigma$ は、

$$d\sigma = 2\pi p dp = -\pi \left(\frac{b^2 a^{2s-2} k_s^2 \gamma_s^2 T_m}{4} \right)^{\frac{1}{s}} \frac{1}{sT^{1+1/s}} dT, \quad (6-1-15)$$

となる。上式は、式(6-1-1)の左辺が θ のときの結果である。

次に、式(6-1-1)の左辺を $\theta \rightarrow \sin(\theta/2)$ と置き換えて、このときの微分散乱断面積 $d\sigma$ を求める。また、 $d\sigma$ は p^2 の微分から得られるのであるから、 $p^2 \rightarrow p^2 + p_0^2$ と置き換えても良いはずである。ここで、 p_0^2 は定数である。ゆえに、式(6-1-1)

は

$$2 \sin(\theta/2) = ba^{s-1} k_s \gamma_s \left(p^2 + p_0^2 \right)^{-s/2}, \quad (6-1-16)$$

となる。そして、

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta} (p^2 + p_0^2) &= 2p \frac{dp}{d\theta} \\ &= \frac{d}{d\theta} \left(\frac{ba^{s-1} k_s \gamma_s}{2 \sin(\theta/2)} \right)^{2/s} \\ &= \frac{2}{s} \left(\frac{ba^{s-1} k_s \gamma_s}{2 \sin(\theta/2)} \right)^{\frac{2}{s}-1} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{ba^{s-1} k_s \gamma_s}{2 \sin(\theta/2)} \right), \\ &= \frac{2}{s} \left(\frac{ba^{s-1} k_s \gamma_s}{2 \sin(\theta/2)} \right)^{\frac{2}{s}-1} \left(-\frac{1}{4} ba^{s-1} k_s \gamma_s \frac{\cos(\theta/2)}{\sin^2(\theta/2)} \right) \\ &= -\frac{2}{s} \left(\frac{ba^{s-1} k_s \gamma_s}{2 \sin(\theta/2)} \right)^{\frac{2}{s}} \frac{\cos(\theta/2)}{2 \sin(\theta/2)}, \end{aligned} \quad (6-1-17)$$

となる。ゆえに、

$$2p dp = -\frac{1}{s} \left(\frac{ba^{s-1} k_s \gamma_s}{2 \sin(\theta/2)} \right)^{\frac{2}{s}} \frac{\cos(\theta/2)}{\sin(\theta/2)} d\theta, \quad (6-1-18)$$

となる。また、エネルギー輸送の式(6-1-12)から、

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) d\theta = \frac{dT}{T_m \sin(\theta/2)}, \quad (6-1-19)$$

が得られる。したがって、微分散乱断面積 $d\sigma$ は

$$d\sigma = 2pdp,$$

$$\begin{aligned}
&= -\pi \left(\frac{b^2 a^{2s-2} k_s^2 \gamma_s^2}{4 \sin^2(\theta/2)} \right)^{\frac{1}{s}} \frac{1}{s} \frac{dT}{T_m \sin^2(\theta/2)}, \\
&= -\pi \left(\frac{b^2 a^{2s-2} k_s^2 \gamma_s^2}{4T/T_m} \right)^{\frac{1}{s}} \frac{1}{s} \frac{dT}{(T/\sin^2(\theta/2)) \sin^2(\theta/2)}, \\
&= -\pi \left(\frac{b^2 a^{2s-2} k_s^2 \gamma_s^2 T_m}{4} \right)^{\frac{1}{s}} \frac{1}{s} \frac{dT}{T^{1+1/s}}, \tag{6-1-20}
\end{aligned}$$

となる。式(6-1-15)と式(6-1-20)の一致は、 $\theta \propto p^2$ と $2\sin(\theta/2) \propto p^2 + p_0^2$ とが同じ $d\sigma$ を与えることを示している。これが式(6-1-1)の左辺を $\theta \rightarrow \sin(\theta/2)$ と置き換えもよい理由である。

次に、式(6-1-15)において、 $s = 1$ と置く、つまりクーロンポテンシャルのときは、(なお、 $k_1 = 1$ である)

$$d\sigma = -\pi \left(\frac{b^2}{4} T_m \right) \frac{1}{T^2} dT, \tag{6-1-21}$$

となる。ここで、 $T = T_m \sin^2(\theta/2)$ 、 $dT = T_m \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) d\theta$ を代入すると、

$$\begin{aligned}
d\sigma &= -\pi \left(\frac{b^2}{4} T_m \right) \frac{T_m \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) d\theta}{T_m^2 \sin^4(\theta/2)}, \\
&= -\pi \frac{b^2 \cos(\theta/2) d\theta}{4 \sin^3(\theta/2)}, \tag{6-1-22}
\end{aligned}$$

となる。これはラザフォード散乱の微分散乱断面積である。つまり、逆冪乗のポテンシャルを用いると、式(6-1-1)はラザフォード散乱を含んでいることがわかる。

次に、式(6-1-16)において、進行方向に散乱される場合を考える。すなわち、 $p = 0$ で $\theta = \pi$ のときである。ゆえに、式(6-1-16)から、

$$2 = ba^{s-1}k_s\gamma_s\left(p_0^2\right)^{-s/2}, \quad (6-1-23)$$

となる。ゆえに、

$$\begin{aligned} p_0^2 &= 2^{-2/s} \left(ba^{s-1}k_s\gamma_s \right)^{2/s}, \\ &= \left(\frac{ba^{s-1}k_s\gamma_s}{2} \right)^{2/s}, \end{aligned} \quad (6-1-24)$$

となる。ここで、 $s=1$ のときは、 $k_1=1$ であり、

$$\gamma_1 = \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos(\varphi) = 1, \quad (6-1-25)$$

であるから、

$$p_0 = \frac{b}{2}, \quad (6-1-26)$$

となる。この結果を用いると、 $s=1$ のとき、式(6-1-16 A-15)は、

$$2\sin(\theta/2) = b \left(p^2 + \frac{b^2}{4} \right)^{-1/2}, \quad (6-1-27)$$

となる。上式の両辺を二乗して、式を整理すると、

$$\left(p^2 + \frac{b^2}{4} \right) 4\sin^2(\theta/2) = b^2, \quad (6-1-28)$$

$$4 \left(p^2 + \frac{b^2}{4} \right) (1 - \cos^2(\theta/2)) = b^2, \quad (6-1-29)$$

$$4p^2 - 4p^2 \cos^2(\theta/2) + b^2 - b^2 \cos^2(\theta/2) = b^2, \quad (6-1-30)$$

$$4p^2 \sin^2(\theta/2) = b^2 \cos^2(\theta/2), \quad (6-1-31)$$

$$p = \frac{1}{2} b \frac{\cos(\theta/2)}{\sin(\theta/2)}, \quad (6-1-32)$$

これは、ラザフォード散乱での衝突径数と散乱角の関係である。したがって、逆幂乗のポテンシャルを用いると、式(6-1-1)の左辺を $\theta \rightarrow \sin(\theta/2)$ と置き換えても、式(6-1-1)はラザフォード散乱を含むことがわかる。

6. 2. Meyer の小角多重散乱理論に関して

ここでは、Meyer の小角多重散乱理論について紹介を行う。Meyer の理論は、Sigmund–Winterbon よりも早く発表されている。

まず Meyer のモデルは、次のような仮定を用いている。

- 一回の衝突による散乱角は小さいとする。
- 入射粒子のエネルギーロスは無視する。
- 幾何学的に、弾性散乱の全断面積を決める。
- 標的物質はランダムで均質な原子配列をしている。
- 多重散乱は物質中での複数回の 2 体衝突を仮定。
- Lindhard et al. の微分散乱断面積を用いている。

このモデルの特徴は、幾何学的に弾性散乱の全断面積を定義しているところである。他は、Sigmund–Winterbon 理論と同じである。

N [個/unit volume] を標的物質の、原子数密度とする。となりあう原子間距離の、半分を

$$r_0 = 0.5 N^{-1/3} \quad (6-2-1)$$

とおく。全散乱断面積を次のようにおく。

$$\sigma_{tot} = \int_{\eta_0}^{\varepsilon} d\eta \frac{d\sigma}{d\eta} = \pi r_0^2 \quad (6-2-2)$$

衝突回数 n は、 $n = \pi r_0^2 N x$ と定義する。ここで、 x は標的の厚さである。一回の衝突で $\vec{\chi}_2 = \vec{\theta} - \vec{\chi}_1$ に散乱される分布関数を

$$F_1(\vec{\chi}_2) = F_1(\vec{\theta} - \vec{\chi}_1) \quad (6-2-3)$$

と書く。そして、2回の散乱で $\vec{\theta}$ に散乱される分布関数は、

$$F_2(\vec{\theta}) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} F_1(\vec{\theta} - \vec{\chi}_1) F_1(\vec{\chi}_1) d\vec{\chi}_1 \quad (6-2-4)$$

である。ゆえに、n回の衝突で $\vec{\theta}$ に散乱される分布関数は、

$$F_n(\vec{\theta}) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} F_{n-1}(\vec{\theta} - \vec{\chi}_1) F_1(\vec{\chi}_1) d\vec{\chi}_1 \quad (6-2-5)$$

となる。

ここで、 F_1 を G_1 という関数のフーリエ変換（2次元）で表すと、

$$\begin{aligned} F_1(\vec{\chi}) &= F_1(\chi) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} G_1(k') \exp[i\vec{k}' \cdot \vec{\chi}] k' dk' d\phi' \end{aligned} \quad (6-2-6)$$

$$G_1(k') = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} F_1(\chi) \exp[-i\vec{k}' \cdot \vec{\chi}] \chi d\chi d\phi' \quad (6-2-7)$$

となる。次に、 F_2 は、

$$\begin{aligned} F_2(\vec{\theta}) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} d\vec{\chi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} d\vec{k} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} d\vec{k}' \times \\ &\times G_1(k') G_1(k) \exp[i\vec{k}' \cdot \vec{\chi} + i\vec{k} \cdot (\vec{\theta} - \vec{\chi})] \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \, k G_1^2(k) J_0(k\vartheta) \quad (6-2-8)$$

となる。ゆえに、 n 回の衝突の場合は、

$$F_n(\vartheta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} G_1^n(k) J_0(k\vartheta) k \, dk \quad (6-2-9)$$

となる。

Sigmund–Winterbon の時と同様に変数変換を行う。

$$F_n(\tilde{\vartheta}) d\omega = \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\varepsilon^2}{4} \left(\frac{m_1 + m_2}{m_2} \right)^2 \int_0^{\infty} G_1^n(z) J_0(z\tilde{\vartheta}) z \, dz \quad (6-2-10)$$

$$z = \frac{2k}{\varepsilon} \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right) \quad (6-2-11)$$

$$\tilde{\vartheta} = \frac{\vartheta \varepsilon}{2} \left(\frac{m_1 + m_2}{m_2} \right) \quad (6-2-12)$$

そして、 $G_1(k)$ も同様に変数変換を行う。

$$G_1(z) = \frac{a^2}{r_0^2} \int_{\eta_0}^{\infty} d\eta \frac{f(\eta)}{\eta^2} J_0(z\eta) \quad (6-2-13)$$

次に、下記の関数を導入する。

$$\begin{aligned}
\Delta(z) &= \frac{r_0^2}{a^2} - \frac{r_0^2}{a^2} G_1(z) \\
&= \int_{\eta_0}^{\varepsilon} d\eta \frac{f(\eta)}{\eta^2} - \int_{\eta_0}^{\infty} d\eta \frac{f(\eta)}{\eta^2} J_0(z\eta) \\
&= \int_{\eta_0}^{\infty} d\eta \frac{f(\eta)}{\eta^2} \{1 - J_0(z\eta)\}
\end{aligned} \tag{6-2-14}$$

すると、 G_1 は、

$$G_1 = 1 - \frac{a^2}{r_0^2} \Delta(z) \tag{6-2-15}$$

と書ける。そして、 G_1^n は、次のように近似できる。

$$\left[1 - \frac{a^2}{r_0^2} \Delta(z)\right]^n \cong \left[1 - \frac{1}{2} \frac{a^2}{r_0^2} \tau \Delta^2\right] \exp[-\tau \Delta] \tag{6-2-16}$$

$$\left(\frac{a^2}{r_0^2}\right) \Delta(z) \ll 1 \tag{6-2-17}$$

$$\tau = \pi a^2 N x \tag{6-2-18}$$

最終的に、Meyer の小角多重散乱理論は、次の式で表せる。

$$F_n(\tilde{\vartheta}) d\omega = \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\varepsilon^2}{4} \left(\frac{m_1 + m_2}{m_2}\right)^2 \left\{ f_1(\tau, \tilde{\vartheta}) - \frac{a^2}{r_0^2} f_2(\tau, \tilde{\vartheta}) \right\} \tag{6-2-19}$$

$$f_1(\tau, \tilde{\vartheta}) = \int_0^{\infty} \exp[-\tau \Delta(z)] J_0(\tilde{\vartheta} z) z dz \quad (6-2-20)$$

$$f_2(\tau, \tilde{\vartheta}) = \frac{\tau}{2} \int_0^{\infty} \exp[-\tau \Delta(z)] J_0(\tilde{\vartheta} z) \Delta^2(z) z dz \quad (6-2-21)$$

6. 3. Kaneko の孤立原子の遮蔽定数について

本節では、Kaneko の孤立原子の遮蔽定数の導出を行う。孤立原子によって束縛されている電子の運動エネルギーは、

$$E_K = \frac{3}{5} N_e \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (6-3-1)$$

ここで、

$$k_F = \left(3\pi^2 \rho(r) \right)^{1/3} \quad (6-3-2)$$

$$N_e = \int \rho(r) d\vec{r} \quad (6-3-3)$$

$$\rho(r) = \frac{N_e}{4\pi r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \left(\frac{\beta_i}{\Lambda} \right)^2 e^{-\frac{\beta_i r}{\Lambda}} \quad (6-3-4)$$

である。したがって、

$$\begin{aligned} E_K &= \frac{3\hbar^2}{10} \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{m} \int d\vec{r} \rho(r)^{5/3} \\ &= \frac{3\hbar^2}{10} \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{m} \left(\frac{N_e}{4\pi} \right)^{5/3} 4\pi \int_0^\infty dr \frac{r^2}{r^{5/3}} \left\{ \sum_{i=1}^3 \alpha_i \left(\frac{\beta_i}{\Lambda} \right)^2 e^{-\frac{\beta_i r}{\Lambda}} \right\}^{5/3} \end{aligned} \quad (6-3-5)$$

ここで、次の変数変換を行う。

$$t \equiv \frac{r}{\Lambda} \quad (6-3-6)$$

そして、次の Bohr 半径 a_0 の関係式に注意する。

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m^2 e^2} \quad (6-3-7)$$

すると

$$\begin{aligned} E_K &= \frac{3\hbar^2}{10m} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{N_e^{5/3}}{\Lambda^2} \int_0^\infty dt t^{1/3} \left\{ \sum_i \alpha_i \beta_i^2 e^{-\beta_i t} \right\}^{5/3} \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{N_e^{5/3}}{\Lambda^2} A \end{aligned} \quad (6-3-8)$$

となる。次に、核子-電子相互作用エネルギーは、

$$\begin{aligned} E_{ne} &= -Ze^2 \int d\vec{r} \frac{\rho(r)}{r} \\ &= -N_e Ze^2 \sum_i \alpha_i \frac{\beta_i}{\Lambda} \\ &= -N_e Ze^2 B \end{aligned} \quad (6-3-9)$$

と書ける。電子-電子相互作用エネルギーは、

$$\begin{aligned} E_{ee} &= \frac{e^2}{2} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \\ &= \frac{e^2}{2} \frac{N_e^2}{(4\pi)^2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j \beta_i^2 \beta_j^2}{\Lambda^2 \Lambda^2} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \frac{e^{-\frac{\beta_i r}{\Lambda}} e^{-\frac{\beta_j r'}{\Lambda}}}{|\vec{r}-\vec{r}'| r r'} \\ &= \frac{e^2}{2} N_e^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i \alpha_j \frac{\beta_i^2}{\Lambda^2} \left(\frac{\Lambda}{\beta_i} - \frac{\Lambda}{\beta_i + \beta_j} \right) \\ &= \frac{e^2}{2\Lambda} N_e^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j \beta_i \beta_j}{\beta_i + \beta_j} \\ &= \frac{e^2}{2\Lambda} N_e^2 C \end{aligned} \quad (6-3-10)$$

となる。

故に、全エネルギーは、変分パラメーター μ を使って、

$$\begin{aligned} E_{tot} &= E_K + E_{ne} + \mu E_{ee} \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{N_e^{5/3}}{\Lambda^2} A - N_e Z e^2 B + \mu \frac{e^2}{2\Lambda} N_e^2 C \end{aligned} \quad (6-3-11)$$

と書ける。

$$\frac{\partial E_{tot}}{\partial \Lambda} = 0 \quad (6-3-12)$$

より、

$$\Lambda = \frac{2AN_e^{2/3}}{(BZ - (\mu/2)CN_e)} a_0 \quad (6-3-13)$$

となる。次に、 $N_e = Z$ のときに、

$$\frac{\partial E_{tot}}{\partial N_e} = 0 \quad (6-3-14)$$

より、

$$\frac{5}{3} a_0 e^2 \frac{N_e^{2/3}}{\Lambda} A - Z e^2 B + \mu e^2 Z C = 0 \quad (6-3-15)$$

となる。故に、

$$\mu = \frac{2}{7} \frac{B}{C} \quad (6-3-16)$$

と求まる。したがって、

$$\Lambda = \frac{2AN_e^{2/3}a_0}{B(Z-N/7)} \quad (6-3-17)$$

となる。そして、A、B、Cの値は、

$$A = 0.4279$$

$$B = 1.365$$

$$C = 0.4523$$

である。

6. 4. Kaneko のイオンの形状因子

まず式 (2-6-6) 、 (2-6-7) 、 (2-6-8) より、

$$E_K = \frac{\hbar^2}{m} \nu \frac{N_e^{5/3}}{\Lambda_K^2} \quad (6-4-1)$$

$$\nu = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \left(\frac{3}{5} \right)^{7/3} \Gamma(4/3) \quad (6-4-2)$$

そして、

$$E_{ne} = -\frac{Ze^2 N_e}{\Lambda_K} \left(\frac{1}{1 + \Lambda_K k_{TF}} \right) \quad (6-4-3)$$

$$E_{ee} = \frac{N_e^2 e^2}{4\Lambda_K} \left(\frac{1}{1 + \Lambda_K k_{TF}} \right)^2 \quad (6-4-4)$$

である。そして、次のように定義する。

$$\left(\frac{a_0}{e^2} \right) E_{tot} \equiv E(\mu, y, N_e) \quad (6-4-5)$$

ここで、

$$\frac{1}{y} = \frac{1}{\Lambda_K} + k_{TF} \quad (6-4-6)$$

である。上式を y で、偏微分する。

$$\frac{\partial E(\mu, y, N_e)}{\partial y} = 0 \quad (6-4-7)$$

より、

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(\mu, y, N_e)}{\partial y} &= -2a_0^2 \nu N_e^{5/3} \frac{1}{y^3} + \left(2a_0^2 \nu N_e^{5/3} k_{TF} + a_0 Z N_e - \mu \frac{a_0 N_e^2}{4} \right) \frac{1}{y^2} \\ &+ \left(\mu \frac{3a_0 N_e^2}{4} - a_0 Z N_e \right) k_{TF}^2 - \frac{\mu}{2} a_0 N_e^2 y k_{TF}^3 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (6-4-8)$$

を得る。ここで、上式の最初の項と第2項のみを考える。第3項と第4項は、 y の値が小さいとするので、無視できる。そして、次のように置く、

$$-2a_0^2 \nu N_e^{5/3} \frac{1}{y^3} + \left(2a_0^2 \nu N_e^{5/3} k_{TF} + a_0 Z N_e - \mu \frac{a_0 N_e^2}{4} \right) \frac{1}{y^2} = 0 \quad (6-4-9)$$

$$\frac{1}{y_1} \equiv \frac{1}{y} = k_{TF} + \left(\frac{Z_1}{a_0} - \frac{\mu N_e}{4a_0} \right) / (2\nu N_e^{2/3}) = k_{TF} + 1/\Lambda_1 \quad (6-4-10)$$

さらに、

$$\frac{1}{y} = \frac{1}{y_1} + f \quad (6-4-11)$$

と置く。そして、以下の式を得る。

$$\begin{aligned} & -2a_0\nu N_e^{5/3} \left(\frac{1}{y_1} + f \right)^4 + \left(2a_0\nu N_e^{5/3} k_{TF} + ZN_e a_0 - \frac{\mu}{4} a_0 N_e^2 \right) \left(\frac{1}{y_1} + f \right)^3 \\ & + \left(\frac{3}{4} \mu a_0 \nu N_e^2 - a_0 Z N_e \right) k_{TF}^2 \left(\frac{1}{y_1} + f \right) - \frac{1}{2} a_0 N_e^2 k_{TF}^3 \\ & = 0 \end{aligned} \quad (6-4-12)$$

f を変数と見なして、1次までのマクローリン展開をする。

$$\begin{aligned} & -2a_0\nu N_e^{5/3} \left(\left(\frac{1}{y_1} \right)^4 + 4 \left(\frac{1}{y_1} \right)^3 f \right) + \left(2a_0\nu N_e^{5/3} k_{TF} + ZN_e a_0 - \frac{\mu}{4} a_0 N_e^2 \right) \left(\left(\frac{1}{y_1} \right)^3 + 3 \left(\frac{1}{y_1} \right)^2 f \right) \\ & + \left(\frac{3}{4} \mu a_0 \nu N_e^2 - a_0 Z N_e \right) k_{TF}^2 \left(\frac{1}{y_1} + f \right) - \frac{\mu}{2} a_0 N_e^2 k_{TF}^3 \\ & = 0 \end{aligned} \quad (6-4-13)$$

ここで、式 (6-4-9) を用いて、次式を得る。

$$\begin{aligned} & -2a_0^2\nu N_e^{2/3} \left(\frac{1}{y_1} \right)^3 f + \left(\frac{3}{4} a_0 \mu N_e - a_0 Z \right) k_{TF}^2 f \\ & + \left(\frac{3}{4} \mu a_0 N_e - a_0 Z \right) k_{TF}^2 \left(\frac{1}{y_1} \right) - \frac{\mu}{2} a_0 N_e k_{TF}^3 = 0 \end{aligned} \quad (6-4-14)$$

さらに計算を続けて、

$$\begin{aligned} & \left[-2a_0^2\nu N_e^{2/3} \left(\frac{1}{y_1} \right)^3 + \left(\frac{3}{4} a_0 \mu N_e - a_0 Z \right) k_{TF}^2 \right] f \\ & = \left(\frac{1}{4} \mu a_0 N_e - a_0 Z \right) k_{TF}^3 + \left(\frac{3}{4} \mu a_0 N_e - a_0 Z \right) \frac{k_{TF}^2}{\Lambda_1} = 0 \end{aligned} \quad (6-4-15)$$

そして、次式を得る。

$$f = - \frac{\left(a_0 Z - \frac{\mu a_0 N_e}{4}\right) k_{TF}^3 + \left(a_0 Z - \frac{3}{4} \mu a_0 N_e\right) \frac{k_{TF}^2}{\Lambda_1}}{a_0 \left[2 a_0 \nu N_e^{2/3} (k_{TF} + 1/\Lambda_1)^3 + \left(Z - \frac{3}{4} \mu N_e\right) k_{TF}^2\right]}$$

$$\approx - \frac{\left(a_0 Z - \frac{3}{4} \mu a_0 N_e\right) (k_{TF} \Lambda_1)^2}{a_0 2 a_0 \nu N_e^{2/3}} \quad (6-4-16)$$

そして、

$$\frac{1}{\Lambda_1} + k_{TF} + f = \frac{1}{\Lambda_K} + k_{TF} \quad (6-4-17)$$

なので、

$$\Lambda_K = \frac{\Lambda_1}{1 + \Lambda_1 f} \quad (6-4-18)$$

となる。また、

$$\left(\frac{a_0}{e^2}\right) E_{tot} = a_0 \nu \frac{N_e^{5/3}}{\Lambda_K^2} - a_0 \frac{Z N_e}{\Lambda_K} \left(\frac{1}{a + \Lambda_K k_{TF}}\right) + \mu \frac{a_0 N_e^2}{4 \Lambda_K} \frac{1}{(1 + \Lambda_K k_{TF})} \quad (6-4-19)$$

ここで、上式の第1項を①、第2項を②、第3項を③と置くと、

$$\textcircled{1} = a_0 \nu \frac{N_e^{5/3}}{\Lambda_K^2} \approx a_0^2 \nu N_e^{5/3} \left(\frac{Z/a_0 - \frac{\mu N_e}{4 a_0}}{2 \nu N_e^{2/3}} \right) \quad (6-4-20)$$

$$\textcircled{2} = a_0 \frac{Z N_e}{\Lambda_K} \left(\frac{1}{a + \Lambda_K k_{TF}} \right) \approx a_0 Z N_e \left(\frac{Z/a_0 - \frac{\mu N_e}{4 a_0}}{2 \nu N_e^{2/3}} \right) \quad (6-4-21)$$

$$\textcircled{3} = \mu \frac{a_0 N_e^2}{4 \Lambda_K} \frac{1}{(1 + \Lambda_K k_{TF})} \approx \frac{\mu a_0 N_e^2}{4} \left(\frac{Z/a_0 - \frac{\mu N_e}{4 a_0}}{2 \nu N_e^{2/3}} \right) \quad (6-4-22)$$

となる。そして、上式3つを、 N_e で偏微分する。

$$\frac{\partial}{\partial N_e} \textcircled{1} = 2 \nu \left(\frac{Z N_e^{1/6} - \frac{N_e^{7/6}}{4}}{2 \nu} \right) \left(\frac{\frac{1}{6} Z N_e^{-5/6} - \frac{1}{4} \mu \frac{7}{6} N_e^{1/6}}{2 \nu} \right) \quad (6-4-23)$$

$$\frac{\partial}{\partial N_e} \textcircled{2} = Z \left(\frac{\frac{1}{3} Z N_e^{-2/3} - \frac{1}{4} \mu \frac{4}{3} N_e^{1/3}}{2\nu} \right) \quad (6-4-24)$$

$$\frac{\partial}{\partial N_e} \textcircled{3} = \frac{\mu}{4} \left(\frac{Z \frac{4}{3} N_e^{1/3} - \frac{\mu}{4} \frac{7}{3} N_e^{4/3}}{2\nu} \right) \quad (6-4-25)$$

そして、共通の分母 2ν を略して、 $N_e = Z$ のときを計算する。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial N_e} \textcircled{1} + \frac{\partial}{\partial N_e} \textcircled{2} + \frac{\partial}{\partial N_e} \textcircled{3} \\ &= \frac{1}{6} Z^{4/3} - \frac{\mu}{24} Z^{4/3} - \frac{7\mu}{24} Z^{4/3} - \frac{7}{4} \mu^2 \frac{1}{24} Z^{4/3} - \frac{1}{3} Z^{4/3} + \frac{1}{3} \mu Z^{4/3} + \frac{1}{3} \mu Z^{4/3} - \frac{7}{4} \frac{2}{24} \mu^2 Z^{4/3} = 0 \end{aligned} \quad (6-4-26)$$

その後いくつかの計算の後、

$$\mu = \frac{4}{7} \quad (6-4-27)$$

を得る。ここで、

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= a_0 \left(\frac{2\nu Z^{-1/3}}{1 - 1/7} \right) = 2a_0 Z^{-1/3} \nu \frac{7}{3} \\ &= \frac{0.560 a_0}{Z^{1/3}} = \Lambda_0 \end{aligned} \quad (6-4-28)$$

と求まる。そして、 $N_e = Z_1$ ゆえに、 $\Lambda_1 = \Lambda_0$ となる。したがって、 f は、

$$\begin{aligned} f &\approx - \frac{\left(Z - \frac{3}{4} \frac{4}{7} Z \right) (k_{TF} \Lambda_0)^2}{2a_0 \nu Z^{2/3}} = - \frac{\frac{4}{7} (k_{TF} \Lambda_0)^2}{2a_0 \nu Z^{-1/3}} \\ &= - \frac{4}{7} \frac{1}{2} \frac{7 \cdot 8}{100} \frac{100}{3 \cdot 8} k_{TF}^2 \Lambda_0 = - \frac{2}{3} k_{TF}^2 \Lambda_0 \end{aligned} \quad (6-4-29)$$

と求まる。ゆえに、

$$\Lambda_K = \frac{\Lambda_0}{1 - \frac{2}{3} k_{TF}^2 \Lambda_0^2} \quad (6-4-30)$$

となる。

6. 5. Kaneko の低速重イオンの阻止能公式

本節では、Kaneko によって求められた低速重イオンに関する阻止能公式[4]の導出を行う。阻止能 S は、非点電荷のとき以下のように書かれる。

$$S_p = \frac{\vec{v}}{v} \cdot \int \rho_{ne}(\vec{r}, t) \vec{E}(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (6-5-1)$$

$$\rho_{ext} = \rho_{ne} = eZ_1\delta_n(\vec{r} - \vec{v}t) - e\rho_e(\vec{r} - \vec{v}t) \quad (6-5-2)$$

ここで、 v は入射イオンの速度、 E は電場である。式 (6-5-2) の右辺第一項は入射粒子の核子、第二項 (ρ_e) は入射イオンの電荷密度である。また式 (6-5-2) のフーリエ変換は、

$$\begin{aligned} \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) &= 2\pi e(Z_1 - \rho_e(\vec{k}))\delta(\omega - \vec{k} \cdot \vec{v}) \\ &= 2\pi e\rho_{ne}(\vec{k})\delta(\omega - \vec{k} \cdot \vec{v}) \end{aligned} \quad (6-5-3)$$

である。阻止能 S_p は、

$$\begin{aligned} S_p &= \frac{\vec{v}}{v} \cdot \int \rho_{ne}(\vec{r}, t) \vec{E}(\vec{r}, t) d\vec{r} \\ &= \frac{\vec{v}}{v} \cdot \int d\vec{r} \int d\omega' \int d\vec{k}' \int d\omega \int d\vec{k} \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{(2\pi)^4} 2\pi e^2 \rho_{ne}(\vec{k}') \delta(\omega' - \vec{k}' \cdot \vec{v}) e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega' t)} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{E}(\vec{k}, \omega) \\ &= \frac{\vec{v}}{v} \cdot \int d\omega \int d\vec{k} \frac{\rho_{ne}(-\vec{k})}{(2\pi)^4} e^{i(\omega - \vec{k} \cdot \vec{v})t} \vec{E}(\vec{k}, \omega) \end{aligned} \quad (6-5-4)$$

ここで、次の関係式に注意。

$$E(\vec{k}, \omega) = \frac{-i\vec{k}}{k^2 \epsilon_0} \left[1 - \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right] \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) \quad (6-5-5)$$

上式の $\epsilon(k, \omega)$ は、Lindhard によって求められた誘電関数である [6]。 (6-5-5)

を用いると

$$S_p = \frac{(-i)}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{v\epsilon_0} \int d\omega \int d\vec{k} \left| \rho_{ne}(\vec{k}) \right|^2 \frac{\vec{k} \cdot \vec{v}}{k^2} \left[1 - \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right] \delta(\omega - \vec{k} \cdot \vec{v}) \quad (6-5-6)$$

いくつかの計算の後、次式を得る。

$$S_p = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{v^2 \epsilon_0} \int_0^{kv} d\omega \int_0^\infty d\vec{k} \frac{\omega}{k} |\rho_{ne}(\vec{k})|^2 \text{Im} \left[1 - \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right] \quad (6-5-7)$$

ここで、単位系を CGS に変更する。電子一個あたりの阻止断面積は $n = N_{free} N$ (N_{free} は伝導電子の数、 N は標的の原子数密度) 次式で表せる。

$$S_c = \frac{1}{n} S_p = \frac{4\pi e^4}{mv^2} L_1 \quad (6-5-8)$$

$$L_1 = \frac{-2}{\pi \omega_p^2} \int_0^\infty d\vec{k} \frac{1}{k} |Z_1 - \rho_e(k)|^2 \int_0^{kv} d\omega \omega \text{Im} \left[\frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 \right] \quad (6-5-9)$$

$$\omega_p = (4\pi n e^2 / m)^{1/2}$$

ω_p はプラズマ振動数、 m は電子の質量である。ここで、無次元の変数を導入する。

$$z = \frac{k}{2k_F} \quad (6-5-10)$$

$$u = \frac{\omega}{kv_F} \quad (6-5-11)$$

$$L_1 = \frac{(2k_F v_F)^2 \chi^2}{\omega_p^2} \frac{1}{3} \frac{v}{v_F} \int_0^1 dz z^3 |Z_1 - \rho_e(2k_F z)|^2 \frac{1}{(z^2 + \chi^2)^2} \int_0^{v/v_F} du u^2 \quad (6-5-12)$$

ゆえに、

$$L_1 = \left(\frac{4E_F}{\hbar \omega_p^2} \right)^2 \chi^2 \frac{1}{3} \left(\frac{v}{v_F} \right)^3 I_1 \quad (6-5-13)$$

$$I_1 = \int_0^1 dz z^3 |Z_1 - \rho_e(2k_F z)|^2 \frac{1}{(z^2 + \chi^2)^2} \quad (6-5-14)$$

$$\chi^2 = v_0 / (\pi v_F)$$

v_F はフェルミ速度、 v_0 はボーア速度である。下記のように書いて積分を実行する。

$$I_1 / Z_1^2 = \int_0^1 dz \frac{z^3}{(z^2 + \chi^2)^2} \left[1 - \frac{2}{1 + (2k_F \Lambda_K z)^2} + \frac{1}{[1 + (2k_F \Lambda_K z)^2]^2} \right] \quad (6-5-15)$$

上式を計算後に整理すると、

$$2 \frac{I_1}{Z_1^2} = (1 - \alpha)^2 g(\pi v_F / v_0) + \alpha^2 g(4k_F^2 \Lambda^2) \\ + 2\alpha(1 - \alpha)(\alpha \ln |1 + 4k_F^2 \Lambda^2| + (1 - \alpha) \ln |1 + \pi v_F / v_0|) \quad (6-5-16)$$

とより

$$\alpha = 1 / [1 - (2k_F \Lambda \chi)^2] \quad (6-5-17)$$

$$g(y) = \ln(1 + y) - y / (1 + y) \quad (6-5-18)$$

である。さらに計算をすると、次式を得る。

$$I_1 \left(\frac{2}{Z_1} \right)^2 = (2k_F \Lambda)^4 \left[1 - 4\chi^2 + \chi^4 \left(6 \ln \left[1 + \frac{\pi v_F}{v_0} \right] \right) - \frac{2\pi v_F}{v_0 + \pi v_F} \right] \quad (6-5-19)$$

したがって、

$$L_1 = \left(\frac{4E_F}{\hbar \omega_p} \right)^2 \chi^2 \frac{1}{3} \left(\frac{v}{v_F} \right)^3 I_1 \quad (6-5-20)$$

$$S_c = \frac{4\pi e^4}{mv^2} L_1 = \frac{1}{n} \frac{dE}{dX} \quad (6-5-21)$$

となる。最終的に Kaneko は阻止断面積として次式を得た。

$$S_p = N_{free} S_c = \frac{4\pi e^4}{mv^2} N_{free} L_1 = \frac{1}{N} \frac{dE}{dx} \\ = 16\pi k_F \left(\frac{v}{v_0} \right) a_0 (mv_0^2 a_0^2) Z_1^{2/3} N_{free} A^4 \\ \times \left[1 - 4\chi^2 + \chi^4 \left(6 \ln \left[1 + \frac{\pi v_F}{v_0} \right] \right) - \frac{2\pi v_F}{v_0 + \pi v_F} \right] \quad (6-5-22)$$

6. 6. 参考文献

- [1] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 36 (10) (1968).
- [2] L. Meyer, Phys. Stat. Sol. (b) 44 (1971) 253.
- [3] T. Kaneko, Phys. Rev. A 66, 052901 (2002).
- [4] T. Kaneko, Phys. Rev. A **41**, 4889 (1990).
- [5] W. Brandt, M. Kitagawa, Phys. Rev. B 25 (1982) 5631.
- [6] J. Lindhard, K. Dan Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 28, (8) (1954).

7. 謝辞

論文博士を申請するに当たり、親身にご助力をいただきました、主査でありまた恩師である、合田一夫教授に厚くお礼申し上げます。合田先生には、審査においても大変お世話になりました。重ねてお礼申し上げます。学位授与の審査をしてくださり、また主論文の詳細な添削をして頂いた学部時代の指導教官であられた恩師・長田哲夫博士に心よりお礼申し上げます。また長田先生からはきめ細やかな指導をして頂いたことに関して重ねてお礼申し上げます。合田先生および長田先生からは、多くのご助言をいただき大変有益でありました。また、お忙しい中、お時間を割いて審査をしてくださった副査の長谷川秀一博士に、心よりお礼申し上げます。お忙しいにもかかわらず、審査および本論文に多くのご助言を頂いた、副査の鈴木陽子博士に深くお礼申し上げます。また、貴重なお時間を頂き審査および有益な議論をしてくださった、副査の石田宗之博士に心よりお礼申し上げます。最後に、修士課程時代の恩師、金子敏明教授に深謝いたします。

8. 業績一覧

研究論文

- 3, S. Ikegami, "Angular and lateral distributions from small angle multiple scattering including elastic and inelastic energy loss effects based on the Valdes and Arista model", Nucl. Instr. and Meth. B 316 (2013) 222–231.
- 2, S. Ikegami, "A new screening length for small angle multiple scattering", Nucl. Instr. and Meth. B 311 (2013) 14–19.
- 1, T. Kaneko and S. Ikegami, "Average charge of MeV/atom carbon cluster ions impacted on foils", Nucl. Instr. and Meth. B 258 (2007) 57–60.

紀要

S. Ikegami and T. Kaneko, "Multiple Scattering in Solids based on Statistical Model", Bull. Okayama Univ. Sci. A 42 (2006) 21–27.

学会発表

平成 18 年 9 月 16th International Workshop on Inelastic Ion–Surface Collisions (IISC–16, Austria) ポスター発表

受賞

平成 19 年 3 月 20 日 理学研究科研究奨励賞（岡山理科大学大学院）