

## 固体中における電子阻止能の研究

先端計測ユニット 表面化学分析グループ 田沼 繁夫

### 1. 背景・目的

固体中における電子の阻止能(Stopping power, SP)は、非弾性散乱を記述する基本的なパラメータの一つであり、各種電子分光法において電子輸送をシミュレートする場合に不可欠な物理量である。また、放射線計量における基本的物理量でもある。SPの値は10keV以上ではいわゆる相対論的 Bethe の式が一般に用いられている。しかし、10keV以下が表面電子分光では重要である。そこで、我々は Penn の単極近似(SPA)を用いて、元素固体のSPを計算してきた。[1,2]しかし、200 eV以下の低エネルギー領域へ拡張するためにLindhardの複素誘電関数と実測したELFを用いるFull Penn Algorithmを用いて41元素固体(Li, Be, graphite, diamond, glassy C, Na, Mg, Al, Si, K, Sc, Ti, V, Cr, Fe, Co, Ni, Cu, Ge, Y, Nb, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, In, Sn, Cs, Gd, Tb, Dy, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Bi)について10 eV - 30 keVの範囲で計算した[3]。同時に、相対論補正も組み込み、10keV以上の計算結果の正確さの向上を図った。

### 2. 研究成果

相対論的非弾性微分散乱断面積(DCS) 500 keV以下のエネルギー領域では次式で与えられる。

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dQ} \approx \frac{d^2\sigma_L}{dW dQ} = \frac{1}{v^2} \frac{1+Q/c^2}{Q(1+Q/2c^2)} \frac{1}{\pi N} \text{Im} \left( \frac{-1}{\varepsilon(Q, \omega)} \right)$$

ここで、 $Q$ はリコイルエネルギーで、 $Q(Q+2c^2) = (cq)^2$ で与えられる。 $v$ は電子の速度、 $c$ は光の速度、 $N$ は単位体積中の原子の数、 $\text{Im}$ の項はエネルギー損失関数(ELF)である。

これより、エネルギー $E$ を持つ電子が固体中において単位距離を走行するときのエネルギー損失確率 $P$ は次式であたえられる。

$$p(T, \omega) = \frac{2}{\pi v^2} \int_{q_-}^{q_+} \frac{dq}{q} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] = \frac{(1+T/c^2)^2}{1+T/(2c^2)} \frac{1}{\pi T} \int_{q_-}^{q_+} \frac{dq}{q} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right]$$

ここで、 $q_{\pm} = \sqrt{T(2+T/c^2)} \pm \sqrt{(T-\omega)(2+(T-\omega)/c^2)}$ 。従って、衝突阻止能( $S$ )は次式で計算される。

$$S = \int_0^{\omega_{\max}} \omega p(T, \omega) d\omega$$

ここで  $\omega_{\max} = T - E_f$  ,  $E_f$  はFermi エネルギーである。

Penn の完全なアルゴリズムでは、 $\text{ELF}(q, \omega)$ は次式で与えられる。

$$\text{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] = \int_0^{\infty} d\omega_p g(\omega_p) \text{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon^L(q, \omega; \omega_p)} \right]$$

ここで、 $g(\omega) = \frac{2}{\pi\omega} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right]$ ,  $\text{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon^L(q, \omega; \omega_p)} \right] = \frac{\varepsilon_2^L}{(\varepsilon_1^L)^2 + (\varepsilon_2^L)^2}$ 。L は Lindhard のモデル誘電関数を表す。

FPA, SPA による Graphite, Al, Cu および Au の計算値を相対論的 Bethe の式, 実測値と共にエネルギーの関数として示す。実線は FPA, 鎖線は SPA による実測した ELF からの計算値。点線は一般式である相対論的 Bethe の式による計算値。マークは実測値である。

図から明らかなように, FPA による SP の値は, 10eV - 30 keV の広いエネルギー範囲で実測値によく一致している。一方, Bethe の式は 10 keV 以上では FPA, SPA および実測値に一致しているが, 10 keV (元素によって異なるが) のエネルギー領域では, エネルギー依存が他の計算値・実測値と大きく異なり, 一般式の限界が明らかである。

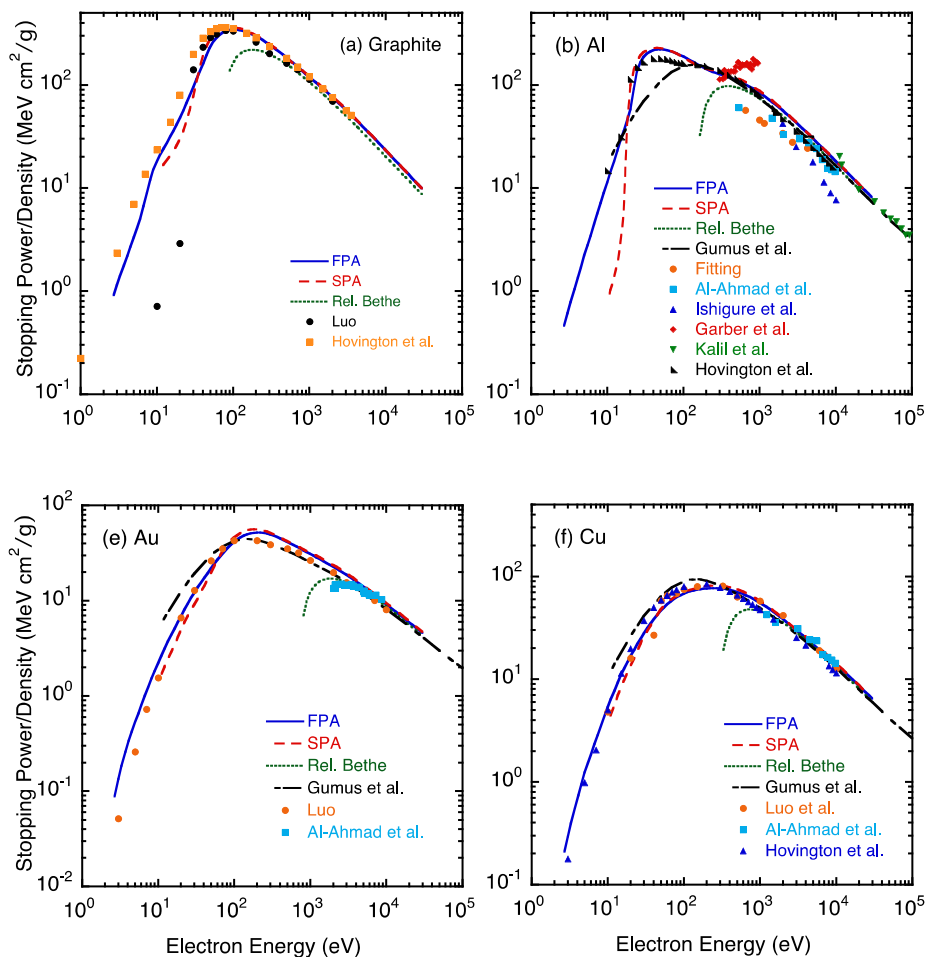


図. Graphite, Al, Cu, Au における電子阻止能のエネルギー依存性. 実線が FPA, 鎖線が SPA による計算値. 記号は実測値

参考文献

[1] S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn, *Surf. Interface Anal.* **2005**, 37, 978.  
 [2] S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn, *J. Appl. Phys.*, **2008**, 103, 063707.  
 [3] H. Shinotsuka, S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, **2012**, 270, 7