固体表面によるイオンの非弾性散乱

大槻 義彦 (早大理工*)

(1982年5月18日受理)

Inelastic Scattering of Ions at the Surface

Yoshi-Hiko OHTSUKI

(Received May 18, 1982)

Abstract

Dynamical process of ion neutralization at the surface is studied in the theoretical point of view. Auger neutralization and resonance neutralization are reviewed. We discuss also the effect of the surface polarization on the motion of ions near the surface. Surface energy loss and "skipping motion" are studied in detail.

§ 1. 序

表面が只単にあるがままに存在しただけでは、実は何の物理的興味もない。それが、バルクな性質と大いに異なっていようがまいが、それだけではどうということはない。表面の存在が重要なのは、それがバルクな性質にある種の影響を与え、また表面外部に、何らかのディスターションを生じせしめるからである。

表面は実際に何事かをなす。ある場合には、オカネもうけにすらなるのである。化学触媒作用における表面の存在を例に出すまでもない。表面の作用によって、化学反応が促進されたり、阻害されたりする。このように表面とは生きたもの、動的なものである。表面にどうはたらきかけるかによって、表面の作動現象も異なってくる。

プラズマ壁相互作用において、壁表面の物理とは一体何か。この場合も、壁にはたらきかける、

Department of Physics, Waseda University Ohkubo 3, Shinjuku, Tokyo 160, JAPAN

* 名大プラズマ研究所客員部門

大 概

そのはたらきかけ方によって、壁表面の物理も変わってくるのである。つまり、壁近傍のプラズマの条件—温度とか粒子の種類、表面へのあたり方—などによって、表面効果の発現のしかたが異なるわけである。

最近急速に発展している表面物理をプラズマ壁相互作用に適用するときには、この点を充分考慮しなければならない。ただ単に、明らかとなりつつある表面の結晶構造や電子密度を、表面壁でのイオンの散乱、中性化などにそのまま持ち込んでもあまり役に立たない。むしろ、表面物理をバックグラウンドとして、プラズマ壁相互作用という別の物理を研究しなければならない。

ここでは、プラズマ壁相互作用によって重要な、軽イオンと表面の相互作用の基礎的諸問題について、解説をするが、この中で中性化の現象とか負イオン化の現象はプラズマ加熱の問題に関しても重要であると思われる。

§ 2. 表面におけるイオンの中性化

イオンが表面付近を通過するとき、電子を捕獲し、中性化したり、荷電状態が減少することがある。とくに、エネルギーが20 keV以下の陽子が固体を通過するときには、固体内部では電子を捕獲することはできないから、中性化は表面でのみ起こると考えられる。高速の陽子または陽子以外のイオンでも、表面チャネリングに近い条件では、その軌道は表面付近にのみ制限されるから、表面電子捕獲が重要になる。

現在までのところ、この種のイオンの中性化は、軽イオン、とくに陽子について詳しく研究されてきているので、ここでは陽子の中性化について説明していくことにする。固体表面の電子が陽子を中性化するために、その軌道に落ち込む過程として Auger 過程、共鳴遷移過程、放射過程などが考えられるので、順を追って説明してゆこう。

2.1 Auger 過程による中性化

これは表面付近を走る陽子の速さ、遅い場合（エネルギーにして1 keV以下）に起こる過程である。この場合、中性化確率は実験値によれば表面付近でおおよそ 10^{16} (sec^{-1})であり、イオンのエネルギー0.5 keVとすると、その速さは 10^{15} ($\text{\AA}/\text{sec}$)程度となるから、1 $\text{\AA}$ 走る時間は 10^{-15} (sec)程度である。この間に起こる中性化確率は $10^{16} \times 10^{-15} = 10$ となり、中性化はほぼ完全に終了する。したがって、表面からある距離sにおける中性化は、イオンが1 $\text{\AA}$ も走らないうちに起こるから、この間にイオンが静止していると考えてよいのである。よって、s

固体表面によるイオンの非弾性散乱

の関数として、静止しているイオンの中性化確率 $P(s)$ を求めて、これをもとに、イオンの軌道に関する和をとれば、表面付近を走るイオンの中性化現象を記述することができる。

中性化確率 $P(s)$ が求まったとすると、個数 N のイオンが dl だけ走るとき、中性化して N の減少する割合 $-\frac{dN}{dl}$ は

$$-\frac{dN}{dl} = N(P(s)/v)$$

よって、イオンの軌道に沿っての積分は

$$N = N_0 \exp\left(-\int_{\text{path}} \frac{P(s)}{v} dl\right) \quad (2.1.1)$$

ここに N_0 は入射ビームの数である。イオンが表面で散乱するとき、速度の垂直成分 $v_{\perp}$ が不変であるとする

$$N = N_0 \exp\left(-\int_{\text{path}} \frac{P(s)}{v_{\perp}} ds\right) \quad (2.1.2)$$

と書ける。あるいは全中性化確率 ϕ_0 は

$$\phi_0 = 1 - e^{-w}, \quad w = \int \frac{P(s)}{v_{\perp}} ds \quad (2.1.2)'$$

さてそこで、 $P(s)$ を求めることになるが、Auger 過程でこれを厳密に（量子力学的に）計算することはなかなか難しい。これまでのところ堀口、小山、大槻¹⁾ の計算しか存在しない。ここではこの論文に沿って $P(s)$ を求めてみよう。問題にする Auger 過程とは、表面付近で自由電子がイオンに捕獲され、同時に余分のエネルギーを別の自由電子に与えるプロセスをいう（図1参照）。

注意しなければならないのは、このプロセスは電子2個とイオン状態が関与する三体問題であるということである。このため計算はすこぶるやっかいである。一般に、行列要素を $H(s)$ とすると、遷移確率 $P(s)$ は

$$P(s) = \frac{4\pi}{\hbar} \frac{V^2}{(2\pi)^6} \iiint |H(s)|^2 \rho_f d\Omega'' d\underline{k} d\underline{k}' \quad (2.1.3)$$

と書ける。ここに V は考えている固体+真空の任意の部分の体積、 ρ_f は

$$\rho_f = \frac{m\hbar |k''|}{(2\pi\hbar)^3}$$

大 概

図1 Auger過程

で終状態の状態密度である。 Ω'' はAuger電子が放射される方向の立体角を意味する。 k 、 k' は関与する自由電子の波数、 k'' はAuger電子の波数である。Auger過程の量子力学的行列要素はHagstrum²⁾によって与えられた。イオンが表面から距離 s にある場合、行列要素 $H(s)$ の2乗 $|H(s)|^2$ は

$$|H(s)|^2 = |H_{fi}(s)|^2 + |J H'_{fi}(s)|^2 - \text{Re} \{ H_{fi}^*(s) H'_{fi}(s) \} \quad (2.1.4)$$

となる。ここに

$$H_{fi}(s) = \iint u_A^*(\underline{r}_2) u_G^*(\underline{r}_1 - s) \frac{e^2}{r_{12}} u_k(\underline{r}_1) u_{k'}(\underline{r}_2) d\underline{r}_1 d\underline{r}_2$$

$$H'_{fi}(s) = \iint u_A^*(\underline{r}_1) u_G^*(\underline{r}_2 - s) \frac{e^2}{r_{12}} u_{k'}(\underline{r}_2) u_k(\underline{r}_1) d\underline{r}_1 d\underline{r}_2$$

ここに、 $\underline{r}_1$ 、 $\underline{r}_2$ は自由電子1、2の位置ベクトルで、 $r_{12} = |\underline{r}_1 - \underline{r}_2|$ で、 J は交換演算子を意味する。

$u_A(\underline{r}_2)$ はAuger電子として放出される電子の波動関数で平面波

$$u_A^*(\underline{r}_2) = \exp(-i k'' \cdot \underline{r}_2) \quad (2.1.5)$$

で近似できる。一方、 $u_G(\underline{r}_1 - s)$ はイオンに束縛される電子の状態で、ここでは基底状態のみを考える。

$$u_G(\underline{R}) = (\pi a_B^3)^{-1/2} \exp(-R/a_B) \quad (2.1.6)$$

(a_B : Bohr 半径)

$u_{\mathbf{k}}$ は表面付近の自由電子気体の波動関数で、 $z > 0$ を真空、 $z < 0$ を固体内部の領域とし、表面の付近のポテンシャルを深さ W_0 のステップ型ととると、エネルギー $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ の電子に対し

$$u_{\mathbf{k}}(\underline{r}) = \sqrt{\frac{2}{V}} u_{k_z}(z) \exp i(\underline{k}_{\parallel} \cdot \underline{r}_{\parallel})$$

$$u_{k_z}(z) = \begin{cases} k_z (k_z^2 + \kappa^2)^{-1/2} e^{-\kappa z} & (\text{for } z > 0) \\ \frac{1}{2} \{ \exp i(k_z z + \gamma) + \exp(-i(k_z z + \gamma)) \} & \end{cases} \quad (2.1.7)$$

と書き表わすことができる。ここに

$$\begin{cases} k_z = \{ 2m(E_z + W_0) / \hbar^2 \}^{1/2}, & E_z = E - \hbar^2 |\underline{k}_{\parallel}|^2 / 2m, \\ \tan \gamma = \kappa / k_z, & \kappa = (-2mE_z / \hbar^2)^{1/2} \end{cases} \quad (2.1.8)$$

と書ける。これは、表面に平行な成分は平面波型、垂直な成分は表面から外部に離れるにつれて、 $e^{-\kappa z}$ の形で減衰するしみ出し型をとっていることに対応する。この波動関数の形については、さらに § 3 でもふれる。なお、 H'_{fi} は、終状態に 1 と 2 が入れ替わることを意味しており、交換効果をとり入れた形になっている。

(2.1.5), (2.1.6), (2.1.7) 式を (2.1.4) 式に代入し、積分を計算すると、

$$H_{fi}(s) = \frac{M_{fi}(s)}{q_{\parallel}} + N_{fi}(s) \quad (2.1.9)$$

の形になる。ここに $q_{\parallel} = |k'_{\parallel} - k''_{\parallel}|$ であるが、金属表面にある自由電子の波数の面成分 $\underline{k}'_{\parallel}$ とこれが Auger 電子になったときの面成分 $\underline{k}''_{\parallel}$ は対称性によってほとんど同じであると考えられる。よって (2.1.9) 式の第 2 項は無視してよい。(2.1.9) 式の第 1 項で、

$M_{fi}(s)$ は

$$M_{fi}(s) = \sum_{j=1}^4 M_{fi}^{(j)}(s) \quad (2.1.10)$$

$$M_{fi}^{(1)}(s) = J_1 \left[\frac{-\exp(us)}{u^2} \right] \{ T_{1,i}(s+u^{-1}) + T_{2,i} \} + e^{-\kappa s} f(s) \quad (2.1.11)$$

大 概

$$M_{fi}^{(2)}(s) = \sum_{n=1}^2 J_{2,n} \left[\frac{-\exp(-us)}{u^2} \{ I_{2,n}(s+u^{-1}) + I_{2,n} \} + e^{-\kappa s} f_n(s) \right] \quad (2.1.12)$$

$$M_{fi}^{(3)}(s) = \sum_{n=1}^3 J_{3,n} \frac{\exp(-us)}{u^2} \{ G_{1,n}(s+u^{-1}) + G_{2,n} \} \quad (2.1.13)$$

$$M_{fi}^{(4)}(s) = \sum_{n=1}^4 J_{4,n} \frac{\exp(-us)}{u^2} \{ L_{1,n}(s+u^{-1}) + L_{2,n} \} \quad (2.1.14)$$

ここに

$$T_{m,1} = \pi \left[\{ q_{||} + \kappa' + i k_z'' \} \{ q_{||} - \kappa + u \} \right]^{-1} \quad (m=1, 2) \quad (2.1.15)$$

$$f(s) = 4\pi e^{-qu^s} \left[(\kappa' - q_{||} + i k_z'') \{ q_{||} + \kappa \}^2 - u^2 \right]^{-1} \quad (2.1.16)$$

$$I_{m,n} = 4\pi i \left[\{ k_z'' + (-1)^n k_z' - i q_{||} \} \{ q_{||} - \kappa + u \}^m \right]^{-1} \quad (\text{for } m=1, 2) \quad (2.1.17)$$

$$f_n(s) = 4\pi e^{-qu^s} \left[\{ q_{||} - i (k_z'' + (-1)^n k_z') \} \{ (q_{||} + \kappa)^2 - u^2 \}^2 \right]^{-1} \quad (2.1.18)$$

$$G_{m,n} = \pi \left[(q_{||} + \kappa' + i k_z'') \{ q_{||} + u - i (-1)^m k_z \}^m \right]^{-1} \quad (\text{for } m=1, 2) \quad (2.1.19)$$

$$L_{m,n} = \pi i \left[\{ (k_z'' + (-1)^n k_z') - i q_{||} \} \{ q_{||} + u + i \varepsilon k_z \}^m \right]^{-1} \\ (\varepsilon = \begin{cases} 1 & \text{for } n=1, 2 \\ -1 & \text{for } n=3, 4 \end{cases}) \quad (2.1.20)$$

ここで $u^2 = z_0^{-2} + Q_{||}^2$, $Q_{||} = | \underline{k}_{||} + k_{||}' - k_{||}'' |$ とおいた。また, $J_1, J_{2,n},$

$J_{3,n}, J_{4,n}$ は定数である (式は複雑なので省略する)。ここで重要なのは, $H_{fi}(s)$ には

$$(s+A) e^{-us}$$

と

$$e^{-(\kappa + q_{||} + u)s}$$

の形の線形結合が現われるということである。

(2.1.9), (2.1.10) 式を (2.1.3) 式に代入し, $P(s)$ を求める積分はきわめて複雑

である。ここでは、表面付近の自由電子のうち、Fermi 面付近にある電子で、面に垂直な速度を持つ電子のみが、ここで問題となる Auger 過程に寄与すると仮定する。これは、この種の電子のみが表面から強くしみ出し、イオンに捕獲されるのであらうと考えられる³⁾ からである。すなわち、 $\underline{k}=\underline{k}'=(0, 0, k_F)$ とおく。このとき $H_{fi}(s)=H'_{fi}(s)$ となることに注意しよう。

かくして、求める $P(s)$ は $|M_{fi}(s)|^2$ の部分を積分の外に出して、

$$P(s) = \frac{4\pi}{\hbar} \cdot \frac{V^2}{(2\pi)^6} \left[|M_{fi}(s)|^2 \rho_f \right]_F \int \frac{1}{|k_{||}''|^2} d\underline{k} d\underline{k}' d\Omega'' \quad (2.1.21)$$

ここに $\left[\right]_F$ とは $\underline{k}=\underline{k}'=(0, 0, k_F)$ 、 $q_{||}=0$ とした値を意味する。この積分は $k_{||}'' \approx 0$ の付近で発散するが、これは電子間の相互作用をはだかのクーロン・ポテンシャルととったため、これを遮蔽定数 λ で遮蔽されたものを選べば発散はさけられる。また定義によって

$$\frac{4}{(2\pi)^6} \iint d\underline{k} d\underline{k}' = n^2 \quad (2.1.22)$$

(n : 自由電子密度)

である。かくして $P(s)$ が次の形に求められる。

$$P(s) = A \left\{ e^{-2\kappa_0 s} + (B_s + C) e^{-(\kappa_0 + a_B^{-1})s} + (Ds^2 + Es + F) e^{-2a_B^{-1}s} \right\} \quad (2.1.23)$$

ここに A, B, C, D, E, F はこれまでの計算から求まる定数である (式が複雑であるから省略する)。 κ_0 は κ の Fermi 面における値である。

ところで、Hagstrum²⁾ は 1954 年に、 $P(s)$ に関する半径験式を提出し、今日まで広く用いられている。それは

$$P(s) = A' e^{-\eta s} \quad (2.1.24)$$

というものである。この形は、Horiguchi 達の式 (2.1.23) と比べると、その相異点は明白である。 η は Hagstrum の場合 $\eta = 2a_0^{-1}$ 程度と選ばれ、 A' は「実験と一致するように」決められた。それを表 2.1 に示す。

図 2 は、Hagstrum の式の $P(s)$ と Horiguchi 達の式の $P(s)$ で陽子を Au に入射させた場合について計算したものを比較してある。 $E_0 = 10.3 \text{ keV}$, $E_F = 5.5 \text{ eV}$, $n = 5.90 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ととった。

大 概

イオン	$\eta = 2 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ としたとき	$\eta = 5 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ としたとき
He^+	7.1×10^{16}	1.5×10^{20}
$\text{N}^{\text{e}+}$	4.8×10^{16}	1.6×10^{20}

表 2.1 Hagstrum の A' の値

$$(P(s) = A' e^{-\eta s})$$

2.2 共鳴捕獲

表面付近を走る陽子のエネルギーが 50 keV ぐらいになると、イオンの速度は前節で検討したものより 10 倍大きくなる。つまり、1 Å 走る間に、中性化される確率は 1 程度以下になり、中性化の起こる間に、イオンは静止しているとみなすわけにはゆかない。このため、このエネルギー領域で問題とされる共鳴捕獲の取り扱い、前節のように $P(s)$ を量子力学的に導出して、これより $-\frac{dN}{dI}$ を求めるというわけにはいかないのである。

共鳴捕獲の計算は最初、時間に依存した摂動論を用いて Trubnikov & Yablinskii⁴⁾ によってなされた。なお、イオンを静止させた仮定のもとでは Cobas & Lamb⁵⁾

Hagstrum⁶⁾ などの計算がある。しかしこれらの計算では、あいまいなパラメータが数個含まれているとか、実験値と大きくずれているとかが問題になっている。Kitagawa &

Ohtsuki⁷⁾ はイオン速度を考慮し、時間に依存した Schrödinger 方程式を解くという Bates の方法⁸⁾ を用いて、陽子の中性化収率を計算し、比較的实验と合う結果を得た。ここではこの理論を中心に共鳴捕獲を議論しよう。

イオンは $\vec{v}$ の速さで走っているとして、電子の位置ベクトルを $\vec{r}$ とする。時間座標の原点をイオンが表面に存在する時刻ととる。イオンと電子のクーロン相互作用 $V(\vec{r}, t)$ は

図 2 Auger 過程による中性化確率

$$V(\underline{r}, t) = \frac{-e^2}{|\underline{r} - \underline{v}t|} \quad (2.2.1)$$

となる。また電子は結晶表面で、深さ E_0 のステップ形の表面ポテンシャルを受けることは前節と同じである。われわれのシュレーディンガー方程式は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} &= H\Phi \\ H &= \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r}, t) + (-W_0)\theta(-z) \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

となる。

そこで、電子の状態関数 $\Phi(\underline{r}, t)$ は、部分的に固体内自由電子状態 $\phi_1(\underline{r}, t)$ 、部分的にイオンの基底状態にあるはずである。ここに、前節と同様に、励起状態に存在する確率は無視する。すると、

$$\Phi(\underline{r}, t) = C_1(t)\phi_1(\underline{r}, t) + C_2(t)\phi_2(\underline{r}, t) \quad (2.2.3)$$

と書けるであろう。ここに、 $\phi_1(\underline{r}, t)$ は自由電子の波動関数で前節の(2.1.7)式を用いれば

$$\phi_1(\underline{r}, t) = u_k(\underline{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(-W_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)t\right) \quad (2.2.4)$$

と書くことができる。一方、 $\phi_2(\underline{r}, t)$ は原子の基底状態に捕獲された電子の波動関数 $\phi_0(|\underline{r} - \underline{v}t|)$ によって

$$\phi_2(\underline{r}, t) = \phi_0(|\underline{r} - \underline{v}t|) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(m\underline{v} \cdot \underline{r} - \frac{1}{2}m v^2 t - W_0 t\right)\right\} \quad (2.2.5)$$

と表わされる。 $\exp\left\{i\left(m\underline{v} \cdot \underline{r} - \frac{1}{2}m v^2 t\right)/\hbar\right\}$ の部分は、速度 $\underline{v}$ で運動している系を静止系でみたためにつく因子(ガリレイ変換因子)である。⁹⁾

さて、(2.2.3)式を(2.2.2)式に代入し

$$\begin{cases} C_2'(t) = C_2(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int^t \frac{h_{22} - s_{21} h_{12}}{1 - |s|^2} dt\right) \\ h_{22} = \langle \phi_2 | (-W_0)\theta(-Z) | \phi_2 \rangle \\ h_{12} = \langle \phi_1 | (-W_0)\theta(-Z) | \phi_2 \rangle \\ s_{12} = \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = s_{21}^*, \quad |s|^2 = s_{12} s_{21} \end{cases} \quad (2.2.6)$$

大 概

で定義される $C_2'(t)$ についてまとめると,

$$\ddot{C}_2' + \left(\frac{i}{\hbar} [\epsilon_1(t) + E_1 - \epsilon_2(t) - E_2] - \frac{\dot{\epsilon}_{21}'(t)}{\epsilon_{21}'(t)} \right) \dot{C}_2' + \frac{\epsilon_{12}(t) \epsilon_{21}(t)}{\hbar^2} C_2' = 0 \quad (2.2.7)$$

なる2階の微分方程式が得られる(これまでのやり方は, 本質的にBatesの方法を採用している)。ここで

$$\epsilon_{12}(t) = \frac{1}{1 - |s|^2} (h_{12} - s_{12} h_{22}) \quad (2.2.8)$$

$$\epsilon_{21}(t) = \frac{1}{1 - |s|^2} (d_{21} - s_{21} d_{11}) \quad (2.2.9)$$

$$\epsilon_{12}'(t) = \epsilon_{12}(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} (E_2 - E) t \right) \quad (2.2.10)$$

$$\epsilon_{21}'(t) = \epsilon_{21}(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} (E_2 - E) t \right) \quad (2.2.11)$$

$$\epsilon_2(t) - \epsilon_1(t) = \frac{1}{1 - |s|^2} (h_{22} - d_{11} - s_{21} h_{12} + s_{12} d_{21}) \quad (2.2.12)$$

$$d_{ij} = \langle \phi_i | V | \phi_j \rangle \quad (2.2.13)$$

$$E = -W + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.2.14)$$

$$E_2 = E_n + \frac{1}{2} m v^2 \quad (2.2.15)$$

である。なお, Trubnikov & Yablinskii の場合は $C_1(t)$ を定数と仮定しており(2.2.7)式でいえば, $C_2'(t)$ に関し1階の微分方程式を解くことに相当している。

さて, 微分方程式(2.2.7)はこのままでは解析的に解くことはできない。そこで Kitagawa & Ohtsuki は次の仮定を置く, つまり, イオンの表面との相互作用の時間 t はきわめて短かく,

$$\Delta E t \ll \hbar \quad (2.2.15)$$

とする。ここに ΔE は関与するエネルギー変化である。エネルギー 50 keV の陽子線の速さは 10^{16} Å/sec で、0.1 Å 程度の表面層と相互作用する時間は 10^{-17} sec 程度である。また ΔE は数 eV 程度であるから

$$\frac{\Delta E t}{\hbar} \sim \frac{10 \times \frac{10^{-18}}{6} \cdot 10^{-17}}{10^{-34}} \sim 0.1$$

である。よって (2.2.15) の条件はかろうじて満たされていることになる。

そこで、(2.2.12) 式の $\epsilon_1^{(t)} - \epsilon_2(t)$ を t で展開すると

$$\begin{cases} \epsilon_1(t) - \epsilon_2(t) \cong \{ \epsilon_1(0) - \epsilon_2(0) \} + A_2 t \\ A_2 = \left. \frac{\partial \{ \epsilon_1(t) - \epsilon_2(t) \}}{\partial t} \right|_{t=0} \end{cases} \quad (2.2.16)$$

となる。一方、イオンが表面から分離されている場合には $|s_{21}|$ 、 $|s_{12}|$ は 1 に比べて小さいことは明らかである。よって $\epsilon_{12}(t)$ 、 $\epsilon_{21}(t)$ 、 $\epsilon_2(t) - \epsilon_1(t)$ 中の s_{12} 、 s_{21} 、 $|s|^2$ は省略しよう。こう考えると (2.2.10)、(2.2.11) からわかるように、 $\epsilon_{12}(t)$ 、 $\epsilon_{21}(t)$ の t 移存性は小さくなるので、これを $\epsilon'_{12}(0)$ 、 $\epsilon_{21}(0)$ で近似する。よって (2.2.7) 式の第 2 項の中で $\dot{\epsilon}'_{21}(t) = 0$ とおいてよい。さらに (2.2.16) の条件より $\epsilon_{12}(t) \epsilon_{21}(t) \cong \epsilon_{12}(0) \epsilon_{21}(0)$ とおく。

このようにして、(2.2.7) 式は

$$\ddot{C}'_2 + \left(\frac{i}{\hbar} [E_1 - E_2 + \epsilon_1(0) - \epsilon_2(0) + A_2 t] \right) \dot{C}'_2 + \frac{\epsilon_{12}(0) \epsilon_{21}(0)}{\hbar^2} C'_2 = 0$$

そこで、 $\tau = [E_1 - E_2 + \epsilon_1(0) - \epsilon_2(0)] / A_2 + t$ を定義すると、 $d\tau = dt$ であるから

$$\frac{d^2 C'_2}{d\tau^2} + \frac{i}{\hbar} A_2 \tau \frac{dC'_2}{d\tau} + \frac{\epsilon_{12}(0) \epsilon_{21}(0)}{\hbar^2} C'_2 = 0 \quad (2.2.17)$$

が得られる。この微分方程式を初期条件 (電子は $t = -\infty$ で状態 1 にあり、2 にはない)

$$|C'_1(-\infty)| = 1$$

$$|C'_2(-\infty)| = 0$$

で解き、 $t = \infty$ での $C'_2(t)$ の値 $C'_2(\infty)$ を求めればよい。これは、Landau - Zener の

方法⁹⁾を用いればよい。それによれば、中性化確率 ϕ_0 は

$$\begin{cases} \phi_0 = |C_2'(\infty)|^2 = 1 - e^{-w} \\ w = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) \left| \frac{\varepsilon_{12}(0)\varepsilon_{21}(0)}{A_2} \right| \end{cases} \quad (2.2.18)$$

となる。

そこでもう少し具体的に(2.2.18)式を求めておこう。イオンは面に垂直な方向に対して角度 θ で走ると仮定すると $\underline{v} = (0, v \sin \theta, v \cos \theta)$ である。これより

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{\partial}{\partial t} \{ \langle \phi_2 | (-W_0) \theta(-Z) | \phi_2 \rangle - \langle \phi_1 | V | \phi_1 \rangle \} \Big|_{t=0} \\ &\cong - \left[\frac{W_0}{2a_B} + \left(\frac{2}{V} \right) \frac{k_z^2}{k_z^2 + \kappa^2} \cdot \frac{\pi e^2}{\kappa} \right] v \cos \theta \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

さらに、 $|\varepsilon_{12}(0)\varepsilon_{21}(0)|$ は

$$\begin{aligned} |\varepsilon_{12}(0)\varepsilon_{21}(0)| &= |h_{12}(0)d_{21}(0)| \\ &= \frac{2\pi e^2 W_0}{V a_B^4} \frac{1}{\alpha^3} \left| \left[\frac{1}{\alpha + i \left(\frac{mv \cos \theta}{\hbar} - k_z \right)} \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha + i \left(\frac{mv \cos \theta}{\hbar} - k_z \right)} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{e^{+2i\gamma}}{\alpha + i \left(\frac{mv}{\hbar} \cos \theta + k_z \right)} \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha + i \left(\frac{mv}{\hbar} \cos \theta + k_z \right)} \right) \right] \right. \\ &\quad \times \left[\frac{1}{\alpha - i \left(\frac{mv}{\hbar} \cos \theta - k_z \right)} + \frac{e^{-2i\gamma}}{\alpha - i \left(\frac{mv}{\hbar} \cos \theta + k_z \right)} \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\left(\frac{2k_z e^{i\gamma}}{\sqrt{k_z^2 + \kappa^2}} \right)}{\alpha + \kappa + i \frac{mv}{\hbar} \cos \theta} \right] \right| \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

ここに $\alpha = \left[a_B^{-2} + k_x^2 + \left(k_y - \frac{mv}{\hbar} \sin \theta \right)^2 \right]^{1/2}$ である。

さて、次に問題となるのは、捕獲される電子の波数はどの範囲のものかという点である。もし理論が首尾一巻していれば、これは自動的に決まるものである。Kitagawa & Ohtuki は

Fermi 球全部にわたって積分した。あとで述べるように、このようにして求めた中性化収率は、実験値とよく一致する。しかし、比較的低エネルギー（ H^+ で 5 keV 程度）について、電子密度の関数として中性化収率を詳しく調べてみると、波数全部について積分するのは必ずしもよくないことがわかる。むしろ、ここで Bohr の速度基準

$$\hbar \underline{k} = m \underline{v}$$

をとった方がよい。

こうとすると、(2.2.20) 式はもっと簡単になり、

$$\begin{aligned} |\varepsilon_{12}(0)\varepsilon_{20}(0)|^2 &= 4\pi n W_0 \left[4 + \frac{1}{F} + \frac{3}{F^2} + \frac{8}{W_0 F} \left\{ v^2 \cos^2 \theta \kappa \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{F} \left((1 + 2\kappa) v^2 \cos^2 \theta - W_0 \right) \right\} \right] \\ &\times \left[1 + \frac{1}{F} + \frac{4}{GW_0} v^2 \cos^2 \theta + \frac{2}{W_0 F} \left\{ (1 + 2\kappa) v^2 \cos^2 \theta - W_0 \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{2 v^2 \cos^2 \theta}{W_0^2 FG} \left\{ (v^2 \cos^2 \theta (1 + 2\kappa) - W_0 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (v^2 \cos^2 \theta + \kappa(1 + \kappa)(\kappa - 2(v^2 \cos^2 \theta - W_0))) \right\} \right] \\ F &= 1 + 4 v^2 \cos^2 \theta \\ G &= 1 + 2\kappa + 2W_0 \end{aligned} \quad (2.2.21)$$

なお、上の計算で $1/v = n$ と選んだ。また (2.2.21) 式は原子単位で表示してある。

ところで n の選び方はなかなか難かしい。ここでは、「水素 1 s 波動関数の領域にある実効的な電子数」を選ぶことにしよう。これには当然電子間の動的相関の効果が考慮されている。これを “enhancement factor” G で表す。 G を表面付近で、イオンの速度の関数として求めることは重要なことであるが、あまり定量的にはなされていない。

結局、1 s 電子軌動のサイズを Bohr 半径 a_B 程度であるとする

$$n = \frac{1}{\left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right)} \times \frac{1}{a_B^3} \times \frac{1}{G} \times n_0$$

大 概

となる。ここに n_0 は平均の電子密度である。

2.3 コメント

陽子および軽イオンの中性化率は数多くの研究者によって、広いエネルギー範囲にわたって測定されている。陽子 H^+ をはじめ、 H_2^+ 、 H_3^+ 、 He^+ などについては 100 eV ぐらいから数 10 MeV の範囲について、主に金属表面での中性化率が調べられた。それによれば、計算を試みるまでもなく、

- (1) 反射型の実験では、中性化は表面でだけ起こり、バルクの影響は少ない。
 - (2) 透視型でも数 10 keV 以下のエネルギーを持つ陽子では表面効果が顕著である。
- などが明らかになっている。

図3 共鳴過程による中性化収率の比較

図3にはエネルギー約 10 keV から 150 keV の陽子の中性化率 (neutral fraction) に関する反射型の実験データ¹⁰⁾とAuに関するKitagawa & Ohtsuki の理論値 (出射角 30°) を比較してある。実験値はBe とMo (Au とほぼ同じ値) について示した。V, Cu, Nb, Ta などについてのデータも発表されているが、これはBe とMo の中間ぐらいに位置しているので、ここでは省略した。同じ図に Yablinskii and Trubnikov の理論⁴⁾を用いた計算値も示した。なお、Zaidins¹¹⁾とBrandt & Sizmann¹²⁾も中性化率の公式を提出しているが、結果だけが発表され、理論としての展開経路が発表されていないので、ここで何もコメントすることができない。しかし、Zaidins の式は、この低エネルギー領域で、実験と合うといわれている。¹⁰⁾

Kleber & Zwiegel¹³⁾ は金属中陽子の遮蔽に参加したすべての電子が、陽子が表面を出

ときに中性化されると考えた。その上、イオン化の状態にある確率 P_{ion} と、全励起状態にある確率 $P_{ion} + P_{ex}$ の比は、イオン化収率 ϕ^+ と $1 - \phi_0$ の比に等しいと仮定した。すなわち、

$$\frac{P_{ion}}{P_{ion} + P_{ex}} = \frac{\phi^+}{1 - \phi_0} = f$$

左辺を原子物理の立場から計算し、 f として $f = 0.28$ を求め、これより

$$\phi^+ = 0.28 (1 - \phi_0)$$

一方 ϕ_0 は遮蔽電子の数から求め $\phi_0 = 1 - 2 (mv / \hbar k_{TF})^2$ よって

$$\phi^+ = 0.28 \times 2 \left(\frac{mv}{\hbar k_{TF}} \right)^2$$

が得られる。上の式で m は電子の質量、 k_{TF} は Thomas - Fermi 波数である。

図3を見れば明らかなように、Kitagawa & Ohtsuki の理論は、陽子のエネルギーが 20 keV 以下では実験とよく合うことがわかる。高エネルギーの領域で、実験と合わないのは、バルクの効果が効きはじめること（実験は反射型といっても出射角 30° でなされた）によるものと思われる。この領域では、Cross の理論を表面の効果を考慮して発展させたものを用いるべきである。

なお、Rausch & Thomas¹⁴⁾ は H^+ の Mo 表面での中性化率（とくに励起状態への中性化）を数 keV ~ 200 keV の範囲で測定したが、30 keV で Kitagawa & Ohtsuki の式と Cross の式を実験値に規格化し、低エネルギーで Kitagawa & Ohtsuki の式、高エネルギーで Cross の式を用いると、測定したすべてのエネルギー範囲で実験とよく合うことを示している。

陽子のエネルギーが 10 keV 以下になると共鳴過程のほかに、Auger 過程も重要になる。図4には Au の場合のイオンの生き残り率（非中性化率） $\phi^+ = 1 - \phi_0$ をエネルギー数 keV の範囲について示す。図4(a)は Auger 過程による ϕ^+ である。このとき積分の軌道は折れ曲った直線軌道を選んだ。これと、すでに計算した共鳴過程の場合の e^{-W} をもとにして、非中性化率の合計 ϕ_{tot}^+ は

$$\phi_{tot}^+ = e^{-W} \exp \left\{ - \int_{path} \frac{P(s)}{v_{\perp}} ds \right\}$$

なる式で計算できる。図4(b)には Matschke¹⁵⁾ による $H^+ \rightarrow Au$ の実験値と上のように

図4 (a) H⁺収率の横エネルギー ($E_{\perp}$)の依存性 (Auger 過程)
(b) 中性化における H⁺収率のエネルギー依存性

して得られた計算値 ϕ_{tot}^+ を比較してある。ただし、上の計算式において積分路は、Matschke の実験に合うように入射ビームについて面に垂直に ($v_{\perp} = v$)、反射ビームについて散乱角 $\theta = 135^{\circ}$ ($v_{\perp} = v/\sqrt{2}$) ととった。ただし中性化は結晶表面にある散乱原子による散乱後に起こると仮定した。計算は (2.2.21) 式を用い G としては 5 程度の値を選んだ。Auger 過程の影響は、このエネルギーの範囲で小さく、共鳴励起の e^{-w} だけでも、実験をはば説明できることがわかる。ごく最近 Gemmingen & Sizmann¹⁶⁾ はすれ入射の場合について精度の高い実験を行って、Kitagawa & Ohtsuki の行列要素 $|\epsilon_{12}(0)|$ $|\epsilon_{21}(0)|$ の用いた計算値と比較した。図 5 に彼等の実験と理論の比較を示す。彼等の場合 G は 5.3 と選ばれた。

図5 すれすれ入射の場合の中性化における H⁺ 収率

§ 3. 表面の動力学的ポテンシャル

イオンが表面付近を通るとき、表面特有の分極を

励起し、この分極によって表面の動力学ポテンシャルが作られる。イオンの速度が十分遅い場合には、このポテンシャルは静的な鏡像ポテンシャルまたは仕事関数であり、バルクな場合の遮蔽ポテンシャルに対応する。イオンの速度が速い場合には、ポテンシャルは複雑であり、動的な鏡像ポテンシャルのはかに表面特有のウェイクポテンシャルも発生する。あるイオンが作った動力学ポテンシャルの影響をそのイオン自身が受けて、イオンの特別な運動がみられるはずである。

動力学表面分極は、表面でのバルク・プラズモンの反射と表面プラズモン励起、表面での励起子の励起などによって理解することができる。そこでこの章ではまず、表面プラズモンの理論から話を進めよう。

3.1 表面プラズモン

電子ガスが表面で切断されているとすると、表面を含む図6のような閉曲面 Γ について、この内部に自由電荷がなければ、電気変位

$\vec{D}$ の総和は0である。すなわち

$$\int_{\Gamma} \vec{D}_n \cdot d\vec{s} = 0 \quad (3.1.1)$$

これより、真空中で $\vec{D}_n^{(0)}$ 、金属中で $\vec{D}_n^{(1)}$ とすれば

$$\vec{D}_n^{(0)} + \vec{D}_n^{(1)} = 0$$

$\vec{D}^{(\nu)} = \epsilon_{\nu} \vec{E}$ で誘電率 ϵ_{ν} を定義すると、上式は

$$\epsilon_0 \vec{E}_n + \epsilon_1 \vec{E}_n = 0$$

これより $\epsilon_0 + \epsilon_1 = 0$ が得られる。 $\epsilon_0 = 1$, $\epsilon_1 = 1 - \omega_p^2 / \omega^2$ を代入すると、

$$1 + 1 - \omega_p^2 / \omega^2 = 0$$

(3.1.2)

$$\therefore \omega = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$$

が得られる。これは Ritchie¹⁷⁾ によって初めて導入された表面プラズモンの角振動数である。

図6 表面付近の電気変位

表面プラズモンの性質をもう少し定量的に調べてみよう。表面付近に電場が存在し、その表面に垂直な成分（ z 成分、 $z > 0$ が固体内部）は

$$E_z = e^{i(K_x x - K_z z - \omega t)} \quad (3.1.3)$$

と書けるとする。ここに、 x 軸は表面に平行で z 軸と垂直な座標軸である。（3.1.3）式を波動方程式に代入すると、

$$K_x^2 + K_z^2 = \frac{\epsilon}{c^2} \omega^2$$

すなわち

$$K_z = \left[\epsilon \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 - K_x^2 \right]^{1/2} \quad (3.1.4)$$

が得られる。

いま、 $\epsilon_0 (\omega/c) < K_x$ ，すなわち $\omega/K_c \equiv v_{\text{phase}} < c$ のとき、（3.1.4）の K_{z0} は虚数 $i\kappa$ になり、これを（3.1.3）に代入すれば

$$E_z = e^{i(K_x x - \omega t)} e^{+\kappa z}$$

の形となるが、これは $z < 0$ ， $|z| \gg \kappa^{-1}$ で急速に0になる。すなわち表面プラズモン励起による電場は表面付近に局在している。一方、逆の場合、 $v_{\text{phase}} > c$ ， K_z は実数で、結晶からはるかに遠くまで、電場が存在する。電場が表面に局在している場合を無放射型表面プラズモン、局在していない場合を放射型表面プラズモンと呼ぶ。無放射型表面プラズモンはRitchieによって導入されたプラズモン振動 $\omega_p/\sqrt{2}$ に対応するが、放射型表面プラズモンは複雑で、これはKliwer & Fuchs¹⁸⁾など¹⁹⁾によって調べられた。

（3.1.3）の形をMaxwellの方程式に代入し、（3.1.1）と同じような連続の式に代入すれば、厚さ d の平行板金属に関して*

$$(\epsilon_1 K_{z0} + \epsilon_0 K_{z1}) + (\epsilon_1 K_{z0} - \epsilon_0 K_{z1}) e^{iK_{z1}d} = 0$$

ただし $K_{z\nu}$ （ $\nu = 0, 1$ ）はそれぞれ真空、金属での波数である。この式より

$$\epsilon_1 K_{z0} - iK_{z1} \tan(K_{z1}d/2) = 0 \quad (3.1.5)$$

* p偏光の場合

そこで $K_x \ll \omega/c$ として K_x の一次の項まで考えれば (3.1.5) 式より

$$\omega = \omega_p \left[1 + \frac{1}{8} (K_p d)^2 \frac{K_x^2}{K_p^2} \right] \quad \text{for } K_p d / 2 \ll 1$$

$$\omega = \omega_p \left[1 + \frac{1}{2} \frac{K_x^2}{K_p^2} \right] \quad \text{for } K_p d / 2 \gg 1$$

$$(K_p = \omega_p / c)$$

が得られる。 $K_x = 0$ のとき、 $\omega = \omega_p$ であることに注意しよう。

表面プラズモンの分散関係 (半無限の金属) を詳しく計算すると図7のようになる。 K_x が小さいところでは、放射型表面プラズモンは光子の分枝プラズモンの分枝にはっきりと別かれてい
るが、 K_x がある程度大きくなると、光子とプラズモンは強く結合し、新しい放射型表面プラズモン分枝となる。すでに述べたように、非放射型表面プラズモンは $\omega < cK_x$ の領域 (斜線の部分) に現われる。一方放射型表面プラズモンは $\omega > cK_x$ の領域に現われる。無放射型表面プラズモンと光子との衝突の際に何か他の現象が関与し、運動量移送に幅が生じる場合がある。たとえば、表面での回折、表面のデコボコ

などに新たな運動量 $\hbar h$ がつけ加わると、 K_x に図の矢印の1から2への移動が起こる。ここは放射型表面プラズモンの領域となり放射型となる。イオン線で励起された無放射型表面プラズモンは、直接光子に崩壊することは決してあり得ないが、表面に周期的なデコボコがあると、励起された表面プラズモン $\omega_p / \sqrt{2}$ は放射光となって放出される。

図7 表面プラズモンの分散関係

表面プラズモンの量子化は、通常のパルク・プラズモンの量子化と同じようにやればよい。イオン線と表面プラズモンとの相互作用ハミルトニアンについても同様である。これについては以下の小節で述べる。

3.2. 表面動力学的ポテンシャル

大 概

イオンが表面に対して任意の角度で入射、または放出される場合の、プラズモン、表面プラズモンによる表面動力学的ポテンシャルを導いたのは鈴木、北川、大槻²⁰⁾である。これ以前にも、表面動力学的ポテンシャルは、その一部としての鏡像ポテンシャルの研究として、多くの研究があった。^{21) - 28)}この中でも、Ritchie は鏡像ポテンシャルが表面プラズモンの励起に関係づけられることを示した。Muscat & Newns²⁹⁾はすれすれ入射の電子線に対する鏡像ポテンシャルの寄与について計算した。ここでは、鈴木達の方法によって、鏡像ポテンシャル、表面ウェイクポテンシャルを含む一般的な表面動力学的ポテンシャルを導こう。

一般に、空間 $\underline{r}_2$ 、時間 t_2 に電荷分布 $\rho_{ext}(\underline{r}_1, t_2)$ が存在すると、これによって媒質は分極を起し、空間 $\underline{r}_1$ 、時間 t_1 にポテンシャル $\varphi_{eff}(\underline{r}_1, t_1)$ が発生する。線型応答理論では、このポテンシャルは電荷分布 $\rho_{ext}(\underline{r}_2, t_2)$ の線型結合の形に書ける。

$$\varphi_{eff}(\underline{r}_1, t_1) = \int d\underline{r}_2 \int dt_2 w(\underline{r}_1, \underline{r}_2; t_1 - t_2) \rho_{ext}(\underline{r}_2, t_2) \quad (3.2.1)$$

ここに $w(\underline{r}_1, \underline{r}_2; t_1 - t_2)$ は応答関数と呼ばれるものである。

応答関数は、1回の分極のみではなく、多重の分極を考慮して求める。このためには、ダイアグラムの方法をとるのが便利である(図8参照)。1回の分極は、図の中で一つのループ $\bigcirc$ で表わされる。分極が1回も起こらない場合、ポテンシャルはクーロン・ポテンシャルであり、このとき波型 $\sim$ で表わす。すると二重の波型 $\sim \sim$ で表わされる多重の分極の結果生じる応答関数 $w(\underline{r}_1, \underline{r}_2; t_1 - t_2)$ はまとめて、図8(b)のように書くことができる。図

図8 表面ポテンシャルを求めるダイアグラム

の中で、1, 2, ……という記号は、空間・時間座標を表わし、たとえば(1) = $(\underline{r}_1, t_1)$ を意味する。

図8(b)を式で書けば、次の積分方程式となる。

$$w(12) = v(12) + \int w(13) P(34) v(42) d(34) \quad (3.2.2)$$

ここに $v(12)$ はクーロン・ポテンシャルで、

$$v(12) = \frac{-e}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|} \cdot \delta(t_1 - t_2) \quad (3.2.3)$$

また $P(12)$ は分極伝播関数と呼ばれるものである。³⁰⁾ $P(12)$ を Fourier 展開し、運動量 $\underline{q}$ と角振動数 ω で表わせば、近似的に

$$P(\underline{q}_1, \underline{q}_2; \omega) = -\frac{\underline{q}_1 \underline{q}_2}{mv^2} n(\underline{q}_1 + \underline{q}_2) \quad (3.2.4)$$

ここに $n(\underline{q}_1 + \underline{q}_2)$ は電子密度の Fourier 成分である。

さて、表面の効果をとり入れるのには、電子密度をステップ関数型、すなわち

$$n(\underline{r}) = \begin{cases} n_0 & (\text{固体内部}, z > 0) \\ 0 & (\text{固体外部}, z < 0) \end{cases} \quad (3.2.5)$$

$$\equiv n_0 \theta(z)$$

ととることとする。これによって、 $w(\underline{r}_1, \underline{r}_2; t_1 - t_2)$ が求まる。³¹⁾ それは

$$\begin{aligned} w(\underline{r}_1, \underline{r}_2; t_1 - t_2) = & \frac{1}{[(\rho_1 - \rho_2)^2 + (z_1 - z_2)^2]^{1/2}} \delta(t_1 - t_2) \\ & - \frac{1}{[(\rho_1 - \rho_2)^2 + (z_1 - z_2)^2]^{1/2}} \omega_p \sin \omega_p(t_1 - t_2) \theta(t_1 - t_2) \theta(z_1) \\ & + \frac{1}{[(\rho_1 - \rho_2)^2 + (|z_1| + |z_2|)^2]^{1/2}} \omega_p \sin \omega_p(t_1 - t_2) \theta(t_1 - t_2) \theta(z_1) \\ & - \frac{1}{[(\rho_1 - \rho_2)^2 + (|z_1| + |z_2|)^2]^{1/2}} \omega_s \sin \omega_s(t_1 - t_2) \theta(t_1 - t_2) \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

第1項は通常のクーロン相互作用の部分、第2項はバルク・プラズモン（その角振動数 ω_p ）励起を通しての相互作用である。ここに ρ は表面に垂直な軸をもつ円柱座標をとったときの軸と垂直な座標を表わす（図9参照）。第3項と第4項は、表面に存在することによって現われる項で、第3項は表面でのプラズモンの反射によるもの、第4項は表面プラズモン（その角振動数 ω_s ）によるものである。（3.2.5）を（3.2.2）に代入すれば、 φ_{eff} が得られることになる。

いま、イオンが表面に垂直なベクトルと θ の角をなして入射するものとする。つまり $\rho_{\text{eff}}(\underline{r}_2, t_2)$, $\underline{v} = (0, v \sin \theta, v \cos \theta)$ とする。このとき図9に示すような円柱座標 (ξ_+, ρ_+, ξ_-) , (ξ_-, ρ_-) を次のように定義しよう。

図9 (ξ_+, ξ_-) 座標のとり方

$$\begin{cases} \xi_+ = -z \cos \theta + y \sin \theta \\ \rho_+^2 = x^2 + \eta_+^2 \quad (\eta_+ = z \sin \theta + y \cos \theta) \end{cases} \quad (3.2.7)$$

および

$$\begin{cases} \xi_- = z \cos \theta + y \sin \theta \\ \rho_-^2 = x^2 + \eta_-^2 \quad (\eta_- = -z \sin \theta + y \cos \theta) \end{cases} \quad (3.2.8)$$

これらの座標を用いると、イオンが表面に斜めに入射する場合の動力的ポテンシャル φ_{eff} を $(\xi_{\pm}, \rho_{\pm})$ の関数として求めることができる。問題はきわめて複雑になるので二つの場合にわけて考える。すなわち、入射イオンが表面にはいる前 ($t_2 < 0$) と固体内部にはいったとき ($t_2 > 0$) とである。

(A) イオンが表面にはいる前

このとき、動力的ポテンシャルは

$$\begin{cases} \varphi_{eff} = v - u_s^- - w_s^- \theta (v t - \xi_-) & (z < 0 \text{ の領域で}) \quad (3.2.9A) \\ \varphi_{eff} = v - u_s^+ - w_s^+ \theta (v t - \xi_+) & (z > 0 \text{ の領域で}) \quad (3.2.9B) \end{cases}$$

と書ける。(ここで座標は本来1の記号をつけるべきであるが省略した。)上の式で v は通常のクーロン・ポテンシャルで、 $u_s^{\pm}, w_s^{\pm}$ は

$$u_s^{\pm} = \int_0^{k_c} dk \frac{(w_s/v)^2}{k^2 + (\frac{\omega_s}{v})^2} J_0(k \rho_{\pm}) e^{-k |\xi_{\pm} - v t|} \quad (3.2.10)$$

$$w_s^{\pm} = 2 \left(\frac{\omega_s}{v} \right) \sin \omega_s \left[t - \frac{\xi_{\pm}}{v} \right] \int_0^{k_c} dk \frac{k}{k^2 + \left(\frac{\omega_s}{v} \right)^2} J_0(k \rho_{\pm}) \quad (3.2.11)$$

と定義される。

イオンが表面の外に存在するから、バルク・プラズモン励起は関与せず、 φ_{eff} には表面プラズモンの角振動数のみが現われることに注意しよう。 $u_s^{\pm}$ は表面プラズモンによる遮蔽項であり、表面プラズモンが関与するのであるから、 u_s^{-} は通常の鏡像ポテンシャルである。これは $\theta = 90^\circ$ ととれば、最近 Lucas³²⁾ によって求められた“自己イメージ・ポテンシャル”と同じものである。 $w_s^{\pm}$ はウェイク・ポテンシャルを表わすが、表面プラズモンが関与するから、“表面ウェイク”と呼ばれるべきものである。注意しなければならないのは、 $\theta (v t - \xi_{\pm})$ の因子である。これは、いまの場合、イオンの位置またはその鏡像位置 $v t$ よりうしろにのみ値をもつということである。

たとえば、(3.2.9 A) 式についていえば、ウェイク・ポテンシャルは、 ξ_- 軸において、その鏡像イオンの位置 $v t$ よりうしろ、すなわち図10の点線のうしろにできるのであるから、 $z < 0$ という領域で影をつけた部分 s (1) に発生することになる。したがって、もとのイオン自身は表面に並行に走るとき以外は影の部分にはいていないから、自らの作ったウェイク・ポテンシャルの影響を受けない。一方、(3.2.9 B) からわかるように、 $z > 0$ の領域では、 $z < 0$ の場合と同じ形の表面ウェイク・ポテンシャルを図3の影をつけた部分 s (2) に作っている。なお、(3.2.9 B) 式の鏡像ポテンシャル u_s^{+} とは何だろうか。

これは、図10の⊖で表わしている $z < 0$ に対する鏡像ポテンシャルとは異なる。これは次のように解釈される。⊕のイオンのため、自由電子が表面付近に集合する。すると、考えている $z > 0$ の表面付近では、その分だけ自由電子雲が減少している。したがって、 $z > 0$ にあるイオンはあたかも、もとのイオンのほか

図10 ウェイク・ポテンシャルの発生領域

大 槻

に、そのイオンの位置に逆符号の鏡像電荷が存在するように(鏡像-鏡像)表面に向って引力を受けるのである。この力のポテンシャルが u_s^+ である。

なお、イオンが自分の作った動力的ポテンシャルから作用を受けるが、これまでの議論から、それは

$$\varphi_{\text{eff}}^{\text{self}} = v - u_s^- - \omega_s^- \theta(vt - \xi_-)$$

とくに平行に走るとき以外は

$$\varphi_{\text{eff}}^{\text{self}} = v - u_s^-$$

であることがわかる。ここで注意しなければならないのは、 u_s^- が、電磁気学でいう通常の鏡像ポテンシャル φ_s と少しちがっているということである。 φ_s は鏡像電荷との電荷の力に逆ってイオンを z だけ引き離すのに要する仕事として得られる。つまり、イオンに働く力を F_s とすると

$$\varphi_s = F_s \cdot \Delta z$$

しかし、実際は Δz だけイオンを引き離せば、その鏡像電荷も $-\Delta z$ だけ移動する。よってイオンと鏡像電荷は $2\Delta z$ だけ離れる。このことはわれわれの理論の中に自動的に含まれている。よってこのときの仕事 u_s^- は

$$u_s^- = F_s \cdot 2 dz$$

上の2式を比較すれば、 $\varphi_s = \frac{1}{2} u_s^-$ であることがわかる。よって、イオン自身に働く鏡像力は u_s^- からではなく $\varphi_s = \frac{1}{2} u_s^-$ から $F_s = -\frac{\partial \varphi_s}{\partial z} = -\frac{1}{2} \frac{\partial u_s^-}{\partial z}$ と求めなければならないのである。

(B) イオンが固体にはいつてから

次にイオンが固体に入射し、固体表面を通過した後の動力的ポテンシャルを考えよう。このときは

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{eff}} = & v - u_s^+ - \omega_s^+ \theta(vt - \xi_+) \theta(\xi_+) \\ & - \omega_s^- \theta(-\xi_-) - x_s^- + x_s^+ \quad (z < 0) \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

$$\begin{aligned}\varphi_{\text{eff}} &= (v - u_p^+) - (u_s^- - u_p^-) \\ &= -\omega_p^+ \theta(vt - \xi_+) \theta(\xi_+) - (\omega_s^- - \omega_p^-) \theta(vt - \xi_-) \theta(\xi_-) \\ &= -\omega_s^+ \theta(-\xi_+) + x_p^+ - x_p^- - x_s^+ + x_s^- \quad (z > 0) \quad (3.2.13)\end{aligned}$$

となることがわかる。ここに u_p^+ とか ω_p^+ などは、 ω_s を ω_p で置き換えた式である。また、新たに現われた x というポテンシャルは

$$\begin{aligned}x_{s,p}^{\pm} &= \cos(\omega_{s,p} t) \int_0^{k_c} dk \frac{(\omega_{s,p}/v)^2}{k^2 + (\omega_{s,p}/v)^2} J_0(k\rho_{\pm}) e^{-k|\xi_{\pm}|} \\ &+ \text{sgn}(\xi_{\pm}) \frac{\omega_{s,p}}{v} \sin(\omega_{s,p} t) \int_0^{k_c} dk \frac{k}{k^2 + (\omega_{s,p}/v)^2} J_0(k\rho_{\pm}) e^{-k|\xi_{\pm}|} \quad (3.2.14)\end{aligned}$$

となる。^{*} ここに $\text{sgn}(x)$ とは x と同じ符号にするという意味である。また s のときは $\omega_{s,p}$ は ω_s のこと、 p のときは $\omega_{s,p}$ が ω_p となる。

式 (3.2.12) について考えれば、鏡像ポテンシャルは u_s^+ となり、これは (3.2.9B) 式のそれと同じであるから、イオンと同じ位置にあるマイナスの鏡像電荷によるものと解釈できる。つまり、 $z < 0$ からみれば鏡像電荷は内部から表面に走ってきて、ここで反射され、イオンと一緒に進む。さらに、イオンの後方には、表面ウェイク・ポテンシャル ω_s^+ が作られる。この領域を図 11 の影の部分

分 $s(1)$ で示す。これに加えて、 $t < 0$ に作られたウェイク・ポテンシャルは、プラズモンの減衰を無視すれば、まだ残っている。これが ω_s^- である。これは ξ_- 軸の後方であるから ($\theta(-\xi_-)$ という因子に注意)、図 11 のもう一つの影の部分 $s(2)$ である。ここで注意しなければならないのは

図11 イオンが固体内に侵入したあとにできるウェイク・ポテンシャルの領域

^{*}ここで述べた式はSuzuki 達の式を項別に分けて書き下したものであるが、彼らの (3.2.10) の第1項 $J_0(k\rho_{\pm}) e^{-k|vt \pm \xi_{\mp}|}$ は $J_0(k\rho_{\pm}) e^{-k|vt \mp \xi_{\mp}|}$ に、第2項 $\theta(\xi)$ は $\theta(\mp \xi)$ に訂正すべきである。

大 概

$\chi_s^{\pm}$ というポテンシャルの存在である。このポテンシャルの面白いところは、これはイオンが表面を通過してからの経過時間 t のみに依存し、イオンがどこにいるかに無関係 ($v t$ に依存しない) であるという点である。これは、イオンが表面に達した瞬間にのみ励起されたポテンシャルということができ、“波紋ポテンシャル”とでも呼ぶべきものである*。

次に $z > 0$ の (3.2.13) 式について考察しよう。 $v - u_p^+$ は、通常バルク・プラズモンによる遮蔽を通してのクーロン・ポテンシャルの減少を表わしているが、さらに鏡像ポテンシャル u_s^- は反射プラズモンによる遮蔽 u_p^- によって減少している。さらに、バルク・プラズモン、反射プラズモン、表面プラズモンによるウェイク・ポテンシャル ω_p^+ , ω_+ , ω_s^- が現われる。波紋ポテンシャルも複雑である。図 11 には $z > 0$ でのポテンシャル領域を示してある。鏡像イオンは表面で反射し、結晶外を進むことに注意しよう。これによるウェイク・ポテンシャルは $S(1)$ の領域にある。なお、 $S(2)$ は $t < 0$ のとき発生した表面ウェイク・ポテンシャル ω_s^+ の領域である。さらに図 11 には通常バルク・プラズモンのウェイク・ポテンシャルを B なる領域で示してある。

注意しなければならないのは、イオンそのものに働く力のことである。まず鏡像電荷に引かれて外側に働く力は弱められている。それに反して、鏡像電荷の作るウェイク・ポテンシャル、通常バルク・ウェイク・ポテンシャル、反射プラズモン・ウェイク・ポテンシャル全部が働き、引きもどされるような力が発生する。

次にイオンが固体中を走ってきて、表面から外に射出される場合を考えよう。ここで注意しなければならないのは、いまの場合、(A)(B) で求めたポテンシャルを $\underline{v}$ を $-v$ としたものにはなっていないという点である。具体的に、図 13 のように座標を選んでやると

(c) イオンが固体内部にあるとき：

$$\varphi_{\text{eff}} = v - u_s^+ - \omega_s^+ \theta(v t - \xi_+) \quad (z < 0) \quad (3.2.15)$$

$$\varphi_{\text{eff}} = (v - u_p^+) - (u_s^- - u_p^-) - \omega_p^+ \theta(v t - \xi_+) - (\omega_s^- - \omega_p^-) \theta(v t - \xi_-) \quad (z > 0) \quad (3.2.16)$$

(D) イオンが外に出たあと：

*ただしこの波紋は伝播することなく、単なる振動である。これはプラズモンの分散を無視したためである。

固体表面によるイオンの非弾性散乱

図12 鏡像イオンの反射とそれにとまう
ウエイク・ポテンシャル

図13 イオンが固体内から外に出ようとするとき
のウエイク・ポテンシャル

$$\varphi_{eff} = v - u_s^- - w_s^- \theta(vt - \xi_-) \theta(\xi_-) - w_s^+ \theta(-\xi_+) - x_s^+ + x_s^- \quad (z < 0) \quad (3.2.17)$$

$$\varphi_{eff} = v - u_s^+ - w_s^+ \theta(vt - \xi_+) \theta(\xi_+) - w_p^+ (-\xi_+) - (w_s^- - w_p^-) \theta(-\xi_-) - x_p^+ + x_p^- - x_s^- + x_s^+ \quad (z > 0) \quad (3.2.18)$$

となる。

ここでたとえば、(3.2.16)式と(3.2.13)式とを比較してみよう。鏡像ポテンシャル

大 槻

の部分は全く同じである。ちがうのは、当然のことであるが、(3.2.13)式に現われる残存している表面プラズモン・ウェイク・ポテンシャルが、(3.2.16)式には現われないことである。このポテンシャルは(3.2.17)式に移っている。その他のウェイク・ポテンシャルの領域も異なったものになる。それを図示したものが図13の影の部分である。それを図12と比較してみれば、S(1)の領域のちがいは明りようである。イオン自身に働く力を考えた場合、入射のときは鏡像電荷ウェイク・ポテンシャルは入射イオンに作用するが、射出の場合、このポテンシャルは働かない。

最後に、イオンが表面に沿って走る場合について φ_{eff} の形をまとめておこう。表面から、イオンは $z=s$ を走るとすると

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{eff}} = & v - u_s^- - w_s^- \theta(vt - y) - \{ u_p^+ + w_p^+ \theta(vt - y) \\ & - u_p^- - w_p^- \theta(vt - y) \} \theta(z) \theta(s) \end{aligned} \quad (3.2.19)$$

となる。ここで

$$\left\{ \begin{aligned} u_p^+ &= \int dk \frac{(w_p/v)^2}{k^2 + (\omega_p/v)^2} J_0(k\sqrt{x^2 + (z-b)^2}) e^{-k|y-vt|} \\ w_p^+ &= 2 \frac{\omega_p}{v} \sin \omega_p(t - \frac{y}{v}) \int dk \frac{k}{k^2 + (\omega_p/v)^2} J_0(k\sqrt{x^2 + (z-b)^2}) \\ u_{s,p}^- &= \int dk \frac{(\omega_{s,p}/v)^2}{k^2 + (\omega_{s,p}/v)^2} J_0(k\sqrt{x^2 + (|z| + |b|)^2}) e^{-k|y-vt|} \\ w_{s,p}^- &= 2 \frac{\omega_{s,p}}{v} \sin \omega_{s,p}(t - \frac{y}{v}) \int dk \frac{k}{k^2 + (\omega_{s,p}/v)^2} J_0(k\sqrt{x^2 + (|z| + |b|)^2}) \end{aligned} \right. \quad (3.2.20)$$

である。これらの表面動力学的ポテンシャルによって、イオンの表面散乱にどのような効果が期待できるかを次の節で議論しよう。

§ 4. 水切り運動、表面でのエネルギー損失、光放射

4.1 水切り運動

表面にすれすれに入射した陽子線が、上に述べた表面動力学的ポテンシャルの影響で水切り運動することはOhtuki³³⁾によって提案され、コンピューター・シミュレーションによって見

い出された。³³⁾ 入射イオンは表面の第一層、第二層原子によって散乱されるが、表面に対して小角度の場合には、表面動力学のポテンシャルによって、表面の内側に再び引きもどされるのである。例として、 Ni 表面から表面に対して $\theta_i = 1^\circ$ で射出される 30 keV 陽子に働く表面動力学のポテンシャルを z の関数として図 14 に示す。 $z < 0$ で表面より十分離れた点のポテンシ

図14 固体表面付近のポテンシャル. $z > 0$
が固体内部 $30\text{ KeV} \rightarrow Ni$ 表面

ルの様子は、通常の静電的鏡像ポテンシャルまたは仕事関数と一致する。イオンを固体内に引きもどそうという力は $z = +2\text{ Å}$ 付近と -2 Å 付近と 2 回働く。表面 $z = 0$ では、一旦力は消失する。

この力を考慮した表面におけるイオン散乱の軌道を計算機シミュレーションを行った結果を図 15 に示す。これは、

30 keV 陽子を Ni (100) 面に入射させたもので、入射角 θ_i を 0.5° から 5.0° まで変化させている。 $\theta_i = 0.5^\circ$ ではほとんどの陽子は 1 個ないし数回の水切り運動をするのがみられる。その一つの周期は 1000 Å 以下である。なお、陽子の中性化の確率を考慮しているので、途中で陽子は水素原子になってしまい、軌道はそこで途切れている。 $\theta_i = 0.75^\circ$ になると、数千 Å 以上の長い周期の水切り運動をすることがわかる。しかし、 $\theta_i = 2^\circ$ 以上では、水切り運動はみられない。なお、このような水切り運動によって、鏡面反射、つまり表面チャネリングの位置は大きくずれて、反射角 (射出されるイオンの方向と表面の角) α は $\alpha = \theta_i$ ではなく、 $\alpha \approx \frac{1}{2} \theta_i$

図15 水切り運動のシミュレーション

付近にすることが示された。

このほか表面動力学的ポテンシャルが関与する現象としてはいろいろなことが考えられる。たとえば、表面散乱される原子イオンから放出される光子のだ円偏光の問題⁹⁾への関与、表面散乱イオンによって励起される2次電子放出に対する関与などである。

4.2 表面のエネルギー損失、阻止能

これまでの力は仮想的プラズモン励起によるもので保存力であったが、実際のプラズモン励起によってイオンはエネルギーを失う。

バルク中を走るイオンのエネルギー損失は、原子内電子の一電子励起である。この場合、プラズモン励起が問題となることはなかった。しかし、表面散乱では事態は一変する。これを明らかにするためにまず最初に、表面付近に働くまさつ力について考察しよう。この問題は最初Richie³⁴⁾によって、最近Lucas³²⁾によって議論されたが、ここでは、3.2節の伝播関数 $W(\underline{r}_1, \underline{r}_2; t_1 - t_2)$ によって議論しよう。エネルギー損失は一般的に伝播関数 $W(\underline{r}_1, \underline{r}_2; t_1 - t_2)$ の虚数部分から得られることが知られているから、³⁰⁾それを求めると

$$\begin{aligned}
 W^{\text{Im}}(\underline{r}_1, \underline{r}_2; t_1 - t_2) \\
 = - \left[\frac{\omega_p \sin \omega_p (t_1 - t_2)}{\sqrt{(\rho_1 - \rho_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}} - \frac{\omega_p \sin \omega_p (t_1 - t_2)}{\sqrt{(\rho_1 - \rho_2)^2 + (|z_1| + |z_2|)^2}} \right] \theta(z_1) \\
 - \frac{\omega_s \sin \omega_s (t_1 - t_2)}{\sqrt{(\rho_1 - \rho_2)^2 + (|z_1| + |z_2|)^2}} \quad (4.2.1)
 \end{aligned}$$

となる。³⁵⁾これを3.2節と同様に、 $\varphi_{\text{eff}}(\underline{r}_1, t_1)$ を求める式(3.2.1)式に代入する。ここで得られたポテンシャル $\varphi_{\text{eff}}(\underline{r}_1, t_1)$ は保存場ではないので(いま求めようとしているのはまさつ力である)、これより電場 E を求めて、まさつ力 F_{eff} を求める。すなわち

$$F_{\text{eff}} = Z_1 e E$$

これは阻止能 $\frac{dW}{d\xi_+}$ にほかならない。すなわち

$$\frac{dW}{d\xi_+} = F_{\text{eff}} \quad (4.2.2)$$

いま簡単のために、イオンが表面に平行に y 方向に表面から $z = s$ の位置を走る場合を考える

と、(4.2.2)式は

$$\begin{aligned}
 -\frac{dW}{dy} = & \frac{(z_1 e)^2 \omega_p^2}{v^2} \log \left(\frac{k_c + q_0}{(\omega_p/v)} \right) \theta(s) \\
 & - \frac{(z_1 e)^2 \omega_p^2}{v^2} \theta(s) \int_0^{k_c(P)} \frac{dk}{\sqrt{k^2 + (\omega_p/v)^2}} \exp \left\{ -2 |s| \sqrt{k^2 + (\omega_p/v)^2} \right\} \\
 & + \frac{(z_1 e)^2 \omega_s^2}{v^2} \int_0^{k_c(s)} \frac{dk}{\sqrt{k^2 + (\omega_s/v)^2}} \exp \left\{ 2 |s| \sqrt{k^2 + (\omega_s/v)^2} \right\}
 \end{aligned}
 \quad (4.2.3)$$

ここに $k_c(p, s) = \sqrt{q_0^2 - (\omega_{p,s}/v)^2}$ (q_0 : カット波数) である。この式で第1項はバルク・プラズモンによる部分、第2項は、表面が存在するために、バルク・プラズモンの部分を減少させる項、第3項が表面プラズモンによる部分である。結晶の外部では、第3項のみが寄与し、 $s=0$ に関して対称的であり、 $s=0$ 付近のせまい範囲でのみ値を持っている。たとえば、 $100 \text{ keV } H^+$ を N_i 表面に沿って走らせた場合の阻止能を図16に示す。この図を見れば明らかなように、表面すれすれに走る陽子に対する阻止能は $3 \text{ eV}/\text{\AA}$ ぐらいであるから、たとえば、表面チャネリングの場合、表面に存在する平均の軌道の長さを $400 \text{ \AA}$ とすると、 1.2 keV である。一方、一電子励起ではチャネリングの平均阻止能を用いると 400 eV ぐらいとなる。これによって、表面散乱の条件では一電子励起の阻止能より、表面およびバルク・プラズモンによる阻止能が重要であることがわかる。

これを具体的に計算機シミュレーションによって示したのが図17である。²⁹⁾

これは、 100 keV 陽子線を $N_i(100)$ 面に、面と $\theta_i = 0.5^\circ$ ですれすれ入射させた場合のエネルギー損失スペクトルである。実線はすべての方向に散乱されてきた陽子線のエネルギー損失スペクトル、点線は鏡面反射の条件で、測定角 $\Delta\phi = 0.15^\circ$ ととったものである。平均のエネルギー損失の値は約 1.7 keV であり、きわめて大きい。

図16 表面付近を走るイオンに対する阻止能

図17 表面散乱された陽子のエネルギー・スペクトル

すれすれ入射の条件でなされた実験は数多くあるが、図18にはAndrä 達による150 keV $\text{He}^+ \rightarrow \text{Au}$ の場合のエネルギー損失スペクトルを示す。平均のエネルギー損失値は約3 keVと大きい値となり、理論の傾向と一致する。

図18 150 Kev He^+ イオンのエネルギー損失スペクトル

4.3 表面散乱での光放射

内部軌道電子を持つイオンが固体膜を透過

すると、イオンは励起され、固体を離れた直

後に、励起されたイオンから光が放射される。この光を分析し、イオンの原子状態を研究する分野はビーム・フォイル分光法 (beam foil spectroscopy) と呼ばれている。ところが、最近イオンの入射方向と表面のなす角を小さくして実験すると、透過の場合も反射の場合も、放射光は偏光 (だ円偏光) していることが見い出された。^{36) 37)}

この現象は理論的には最初 Eck³⁸⁾, Hermann³⁹⁾, Schröder & Kupfer⁴⁰⁾ などによって考察された。Eck, Schröder & Kupfer の理論は表面での電子捕獲の際、表面ポテンシャルが作用し、種々の角運動量子数で指定される準位に、アンバランス的に捕獲される

ためであると考え。これに反し、Hermann は、もともとイオンにあった軌道電子が、表面付近で再配列されるためであると考えた。これら二つのモデルは、すでに2章で述べたように、両方意味があると思われる。すなわち、低エネルギーの H^+ の透過、反射、 H_2^+ のように軽いイオンの反射では、表面での電子捕獲を、もっと重いイオンの透過、反射ではHermann 流の流れ方をする必要はある。

残念ながら上記の理論は、定性的な結論を与えるだけで、実験と詳細に比較することはできない。筆者のグループ⁴¹⁾は最近、 H^+ 、 H_2^+ などをAuに入射させる場合について、§2で述べたKitagawa & Ohtsukiの方法で円偏光の度合 S/I をイオンのエネルギーの関数として求めた。図19にはこの計算結果をTolk達⁴²⁾の実験と比較してある。理論と実験はこのエネルギーの範囲でよく一致する。

図19 円偏光の度合 (S/I) のエネルギー依存性

励起イオンからの直接の光放射でなくても、表面の分極を通して光が放出される場合がある。たとえば50 keVぐらいの電子ビームを薄い固体膜を通過させると、真空紫外線が放出されることが知られており、これは遷移放射 (transition radiation) と呼ばれている。遷移放射にはプラズモンのエネルギー付近にピークが存在し、これは§3で述べた放射型表面プラズモンの励起と考えることができる。

遷移放射の理論はGinzburg & Frank⁴³⁾に発展され、多くの研究者⁴⁴⁾⁻⁴⁷⁾が詳しい計算を行った。電子線の場合、Maxwellの方程式を解くことにより、 $[\hbar\omega, \hbar\omega + d(\hbar\omega)]$ の範囲で入射電子方向に対して θ の方向に放出される光子数は

$$\frac{d^2 N}{d(\hbar\omega) d\Omega} = \frac{1}{\pi^2} \cdot \frac{e^2}{\hbar e} \cdot \frac{1}{\hbar\omega} \cdot |\epsilon - 1|^2 \left(\frac{v}{c}\right)^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta \cdot M$$

$$M = \left| \frac{\sin\left(\frac{\omega}{v} \frac{d}{2}\right)}{i \frac{c}{\omega} L^+} + \frac{i \cos\left(\frac{\omega}{v} \frac{d}{2}\right)}{i \frac{c}{\omega} L^-} \right|^2$$

$$L^+ = \epsilon_1 K_{z0} - i K_{z1} \tan\left(\frac{K_{z1} d}{2}\right)$$

$$L^- = \epsilon_1 K_{z0} + i K_{z1} \cot\left(\frac{1}{2} K_{z1} d\right)$$

ここに K_{z1} は $K_{z1} = \left[\left(\frac{W}{c} \right)^2 \epsilon_1 - K_x^2 \right]^{1/2}$ である。(3.1節参照)。Mの+は $\theta < \pi/2$, -は $\pi > \theta > \pi/2$ の場合に対する。

上式で, L^+ , L^- は $\omega = \omega_p$ 付近で0に近くなり, Mはこの点でピークを持つ。図20は Hattendorf⁴⁸⁾によって得られた実験結果で, 80 keV電子線を 600 Åの銀の薄膜に入射させた場合の $\theta = 160^\circ$ 方向の光子数 $\frac{d^2 N}{d(\hbar\omega) d\Omega}$ を示す。

図20 80 Kev 電子線による表面下の
光放射

謝 辞

この小論は筆者が1980, 1981年度, プラズマ研究所客員部分に招を受け, この間にプラズマ壁相互作用やプラズマ加熱における表面での負イオン化の現象に興味を持ったことから生れた。われわれはここ10年間ほど, イオンと固体表面の相互作用について基礎的研究を行ってきたが, これらの成果が, プラズマ・核融合の基礎としても重要であるということに目をむけてくれたのが, プラズマ研究所の客員部門であった。したがって, プラズマ研究所長 垣花秀武先生はじめ, 理論部門のスタッフ, 市川芳彦教授 寺嶋由之介教授, 大林治夫教授, 百田弘教授, それに理研の核融合グループの方々に心から感謝申し上げる。

参 考 文 献

- 1) S. Horiguchi, K. Koyama and Y. H. Ohtsuki; *phys. stat. sol. (b)* **87** 757 (1978).
- 2) H. D. Hagstrum; *Phys. Rev.* **122** 83 (1961).
- 3) C. Rau and R. Sizmann; *Phys. Letters A* **43** 317 (1973).
- 4) B. A. Trubnikov and Y. N. Yablinskii; *JETP* **25** 1089 (1967).
- 5) A. Cobas and W. E. Lamb; *Phys. Rev.* **65** 327 (1944).
- 6) H. D. Hagstrum; *Phys. Rev.* **96** 336 (1954).
- 7) M. Kitagawa and Y. H. Ohtsuki; *Phys. Rev. B* **13** 4682 (1976).
- 8) D. R. Bates; *Proc. Roy. Soc. A* **247** 294 (1958).
- 9) C. Zener; *Proc. Roy. Soc. A* **137** 696 (1932).
- 10) R. Behrish, W. Eckstein, P. Meischner, B. M. U. Scherzer and H. Verbeek; "Atomic Collision in Solids" ed. by S. Datz et al. (Plenum 1975) p. 315.
- 11) C. S. Zaidins, Ph. D. Thesis, Cal. Inst. Techn. 1967.
- 12) W. Brandt and R. Sizmann; *Phys. Lett.* **37A** 115 (1971).
- 13) J. Zwiegel, Thesis (Technical University of Munich, 1979).
- 14) E. O. Raush and E. W. Thomas; in Proceedings of "Atomic Collision in Solids" (Moscow, 1977).
- 15) F. E. P. Matschke, Report of Max-Planck-Inst. für Plasma-physik, Garching (1977).
- 16) U. Gemmingen and R. Sizmann; private communication, to be published.
U. Gemmingen, Thesis (University of Munich, 1980).
- 17) R. H. Ritchie; *Phys. Rev.* **106** 874 (1957), R. Pabst, *Rad. Effects* **37** 105 (1978).
- 18) K. L. Kliewer and R. Fuchs; *Phys. Rev.* **153** 498 (1967).
- 19) for example, H. Raether; *Physics of Thin Films* **9** 145 (1977).
- 20) K. Suzuki, M. Kitagawa and Y. H. Ohtsuki; *phys. stat. sol. (b)* **82** 643 (1977).
- 21) J. A. Appelbaum and D. R. Hamann; *Phys. Rev. B* **6** 1121 (1972).

- 22) N. D. Lang and W. Kohn ; Phys. Rev. B7 3541 (1973).
- 23) R. H. Ritchie ; Phys. Lett. 38A 189 (1972).
- 24) J. C. Inkson ; Surf. Sci. 28 69 (1971).
- 25) R. Ray and G. D. Mahan ; Phys. Lett. 42A 301 (1973).
- 26) J. Harris and R. O. Jones ; J. Phys. C6 3585 (1973), ibid C7 3751 (1974).
- 27) C. H. Hodges ; J. Phys. C8 1849 (1975).
- 28) J. Heinrichs ; Phys. Rev. B8 1346 (1973).
- 29) J. P. Muscat and D. M. Newns ; Surf. Sci. 64 641 (1977) see also R. Nunez,
P. M. Echenique and R. H. Ritchie ; J. Phys. C13 4229 (1980).
- 30) L. Hedin and S. Lundquist ; Solid. State Phys. 23 33 (1969).
- 31) M. Ichikawa ; Theses, Waseda University (1974).
- 32) M. Schmeits and A. A. Lucas ; Surf. Sci. 64 176 (1977).
A. A. Lucas ; Phys. Rev. B20 4990 (1979).
- 33) Y. H. Ohtsuki ; Annual Meeting of Phys. Soc. of Japan (1978).
Y. H. Ohtsuki, K. Koyama and Y. Yamamura ; Phys. Rev. B20 5044 (1979).
- 34) R. H. Ritchie ; Phys. Rev. 106 874 (1957).
- 35) R. Kawai, Y. H. Ohtsuki and N. Itoh ; Surface Science 114 137 (1982).
- 36) H. G. Berry, L. T. Cvrtis, D. G. Ellis and R. M. Schectmann ; Phys. Rev. Lett.
32 751 (1974).
H. G. Berry, G. Gabrielse and A. E. Livingston ; Phys. Rev. A16 1915 (1977).
- 37) H. J. Andrä ; Phys. Lett. 54 315 (1975).
H. J. Andrä and J. D. Solver ; Phys. Rev. Lett. 37 1212 (1976).
- 38) T. G. Eck ; Phys. Rev. Lett. 33 1055 (1974).
- 39) R. M. Herman ; Phys. Rev. Lett. 35 1626 (1975).
- 40) H. Schröder and E. Kupfer ; Z. Physik A279 13 (1976).
- 41) Y. H. Ohtsuki, W. Goto, T. Tazunoki and R. Kawai ; Rad. Effects, to be published.

- 42) N. H. Tolk, J. C. Tully, J. S. Kraus, W. Heiland and S. H. Neff ; Phys. Rev. Lett. 41 643 (1978), Phys. Rev. Lett. 42 1475 (1979).
- 43) W. Ginzburg and I. Frank ; Zh. Eksp. Theor. Th Fiz. 16 15 (1946).
- 44) V. E. Pafomov ; ibid, 6 829 (1958).
- 45) R. H. Ritchie and H. B. Eldrige ; Phys. Rev. 126 1935 (1962).
- 46) J. C. Ashley ; Phys. Rev. 155 208 (1967).
- 47) E. Kröger ; Z. Phys. 235 403 (1970).
- 48) H. D. Hattendorf ; phys. stat. sol. 42(a) 489 (1977).