斜入射軽イオンスパッタリングの角度分布

山 村 泰 道, 滝 口 敬

(岡山理科大学理学部)

李 之 傑*

(内蒙古民族師範学院)

(1991年7月11日受理)

Angular Distributions of Sputtered Atoms at Oblique Incidence of Low-Energy Light-Ion

Yasunori Yamamura, Takeshi Takiguchi and Zhijie Li*

(Received July 11, 1991)

Abstract

The bombarding angle dependence and the angular distributions of the light-ion sputtering have been investigated by the computer simulation and the direct-knock-out model, where the Ni target is bombarded by 450eV and 1keV H. As a computer simulation code we adopted the ACAT code. The main feature of the light-ion sputtering at oblique incidence is found to be described by the direct-knock-out process. The interatomic potential is an important factor for the bombarding-angle dependence of the light-ion sputtering. In the case of 1keV $H^+ \rightarrow Ni$, the ACAT results of the bombarding-angle dependence and the angular distribution are in good agreements with experiments. The experimental angular distributions of 450eV $H^+ \rightarrow Ni$ at oblique incidence ($>80^\circ$) cannot be explained by both the ACAT simulation and the direct-knock-out model, and seems to be much influenced by the surface roughness.

Keywords :

light-ion sputtering, bombarding-angle dependence angular distribution of sputtered atom, direct-knock-out model, computer simulation,

軽イオンスパッタリング収量の入射角依存性とスパッター原子の角度分布をモンテカルロシミュレーション・コード ACAT と簡単ななじきだしモデルを用いて計算し、実験と比較検討した。軽イオンとしては軽水素、標的物質としては Ni を選び、入射エネルギーとしては 450eV と 1keV を用いた。

Okayama University of Science, Okayama 700.

* Permanent address : Inner Mongolia Normal University, Physics Division, 028043, China.

軽イオンが斜めに照射された場合のスパッタリング現象の主たる模相ははじきだしモデルで説明できる。スパッタリング収量の入射角依存性については2体間ポテンシャルを適切に選べば実験を再現できることがわかった。直接はじきだしモデルによる角度分布は非常にはっきりした優先放出角を持ち、その理論値は1keVの場合、シミュレーションの値、実験値とよい一致をみた。しかしながら、低エネルギーの450eVの場合にはACATによる角度分布も直接はじきだし過程による角度分布とともに実験よりはるかに大きい優先放出角を持ち、実験では表面荒さの影響を強く受けている可能性がある。

1. はじめに

プラズマ・壁相互作用 (PWI) に関する種々の問題の中でも入射する軽イオンによる第一壁やダイバータ板の物理スパッタリングによる損耗やスパッターされた不純物の炉心での蓄積等は、今日、核融合炉研究の中心的課題の1つである。特にダイバータ板は熱応力を軽減させるため、磁力線に対して85°以上の角度を持たしている場合がある。このことは軽イオンスパッタリング収量の入射角依存性のより正確な知見が要求されることを意味している。また、不純物の炉心への混入という観点からみれば、スパッター原子のエネルギー分布や角度分布の知見も必要となってくる。

軽イオンによるスパッタリングは中重イオンの場合と異なって入射イオンにより表面近傍に形成される衝突カスケードによるのではなく、固体内部で反射された軽イオンが表面から出る時に表面近傍の標的原子を叩き出すことによる^{1,2)}。すなわち、軽イオンのスパッタリング収量は反射係数と反射イオンによる表面近傍に付与されたエネルギーに比例することになる³⁾。

スパッタリング収量の入射角依存性に関する理論は1969年 Sigmund によって与えられた。すなわち、 $Y(\theta)/Y(0) = \cos^{-f}\theta$ ($f = 1 \sim 2$)⁴⁾。一方、山村等は1983年、種々の実験データを解析し次の半実験式を提案した⁵⁾。すなわち、 $Y(\theta)/Y(0) = X^f \exp[-\Sigma(X-1)]$ 、ここに $X = 1/\cos\theta$ 。スパッタリング収量の入射角依存性に関する実験データは1959年の Wehner の実験⁶⁾以来多くの報告があるが軽水、重水イオンに関するデータは1979年の Bay and Bohdansky の論文⁷⁾が最初で、以降、核融合炉におけるプラズマ・壁相互作用という観点から主として Max Plank 研究所 (Garching) を中心に測定データが報告された^{8,9)}。最近、Haasz 等によりグラファイトに関する軽イオンによるスパッタリング収量の入射角依存性の実験¹⁰⁾や Roth 等による低エネルギー(数百 eV)軽イオンによるスパッタリング収量の入射角依存性の実験の報告がある¹¹⁾。

微分スパッタリング収量、すなわち、角度分布とエネルギー分布に関する理論的報告^{12,13)}、また、シミュレーションによる解析¹⁴⁻¹⁷⁾、実験的報告は数多くあるが、軽イオンによるスパッター原子の角度分布に関して言えば、やはり、Max Plank 研究所 (Garching) を中心に測定データが報告されている^{9,18,19)}。しかしながら、軽イオンによるスパッター原子のエネルギー分布に関してあまり報告例がない^{20,21)}。

本報告では軽イオンスパッタリング収量の入射角依存性とスパッター原子の角度分布をモンテカルロシミュレーション・コード ACAT と簡単なはじきだしモデルを用いて、計算し、実験と比較検討することによ

りそれらの量に及ぼす2体間ポテンシャルの影響について考察する。軽イオンとしては軽水素, 標的物質としてはNiを, 入射エネルギーとしては450eVと1keV選んだ。

2. 直接はじきだし過程

軽イオンの入射角が小さいときは, 軽イオンによるスパッタリングは中重イオンの場合と異なって入射イオンにより表面近傍に形成される衝突カスケードによるのではなく, 固体内部で反射された軽イオンが表面から出る時に表面近傍の標的原子を叩きだすことによる。軽イオンを十分斜めから入射させた場合, 入射軽イオンと表面原子とののはじきだし過程が重要となる。はじきだし過程は図1に示すように大きく分けて直接

図1. 斜入射軽イオンスパッタリングのはじきだし過程.

過程と間接過程があり, 入射角が小さい場合には間接はじきだし過程しか起こりえず, 大きい場合には直接はじきだし過程が主である。また, 間接はじきだし過程には2種類の過程が考えられるが図における間接はじきだし過程(b)は確率的に低く無視できるであろう。以後の議論においては間接はじきだし過程と言えば間接はじきだし過程(a)を意味することにする。

図1における直接はじきだし過程は入射角 θ が約 70° 以上すれすれに照射した場合に重要な過程で, 一方, 間接はじきだし過程はそれにより小さい場合でも起こる。間接はじきだし過程は直接はじきだし過程の変形であって表面近傍の他の原子により入射イオンが散乱された後, はじきだし過程により原子がスパッターされる^{22,23)}。

まず, 理論的に取り扱いやすい直接はじきだし過程によるスパッタリングを考える。スパッター原子の飛び出す条件として面に対して垂直な表面ポテンシャルを仮定すると直接はじきだし過程により反跳原子が飛び出すことが出来るためには反跳角 δ は次の条件を満足しなければならない。

$$\cos^2 \delta \cos^2 (\theta + \delta) \geq q^2 \quad (1)$$

ここに, $q = (U_s / \gamma E)^{1/2}$ で, E は入射エネルギー, U_s は表面結合エネルギーで, また, γ は

$$\gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (2)$$

(2) 式における M_1, M_2 は入射イオンと標的原子の質量数である. (1) 方程式の解として

$$\delta_1 \leq \delta \leq \delta_2 \quad (3)$$

を得る²²⁾. ここに,

$$\delta_1 = \frac{\pi - \theta - \cos^{-1}(\cos \theta + 2q)}{2} \quad (4)$$

$$\delta_2 = \frac{\pi - \theta + \cos^{-1}(\cos \theta + 2q)}{2} \quad (5)$$

q が十分小さいと δ_1, δ_2 は簡単な表式で表されるがここでは比較的低エネルギー軽イオンを取り扱うため数値計算した結果を入射角の関数として図2に示す. $450\text{eVH}^+ \rightarrow \text{Ni}$ の場合 ($q=0.385$) には 76.8° から直接はじきだし過程が始まり, $1\text{keVH}^+ \rightarrow \text{Ni}$ の場合 ($q=0.259$) には 61.2° から直接はじきだし過程が始まる.

反跳角 δ は重心系の散乱角 Θ と $\delta = (\pi - \Theta)/2$ の関係を通して散乱における衝突係数 p に直接関係している. すなわち, 散乱ポテンシャルをべき乗近似を採用すると衝突係数と反跳角 δ の間には

$$2 \epsilon \cot \delta = \left(k_m \frac{a}{p} \right)^{1/m} \quad (6)$$

図2. $450\text{eVH}^+ \rightarrow \text{Ni}$ と $1\text{keVH}^+ \rightarrow \text{Ni}$ において直接はじきだし過程が可能な反跳角 δ の領域の入射角依存性.

の関係が近似的に存在する。ここに、上式における m は散乱ポテンシャルのべき乗近似のべきである。したがって、 δ_1 、 δ_2 に対応する衝突係数を p_1 、 p_2 とすると次式を満足しなければならない。

$$p_1 < p < p_2 < R_0 \cos \theta \quad (7)$$

ここに、 R_0 は標的の平均格子定数である。スパッタリング収量の入射角依存性を入射角に対してプロットすると通常、 $\theta = 70^\circ \sim 80^\circ$ の近傍にピークを持つ。その収量の最大値を与える入射角を θ_{opt} とすると、その角度は $p_2 = R_0 \cos \theta$ に対応している。 q が十分小さい時には次のような簡単な表式で表される。

$$\theta_{\text{opt}} = 90^\circ - 57.3 \frac{a}{R_0} \sqrt{\frac{1}{\epsilon q}} \quad (8)$$

ここにおいて、(6) 式の $m=1/2$ を用いた。

次に、スパッター原子の飛び出す条件として面に対して垂直な表面ポテンシャルを仮定してと直接はじきだし過程によるスパッター原子の角度分布 $Y(\theta_s)$ について考察する。簡単な計算の後、反跳角 δ と出射角 θ_s の間には次の関係があることがわかる。すなわち、

$$\sin^2 \theta_s = \frac{\cos^2 \delta \sin^2(\theta + \delta)}{\cos^2 \delta - q^2} \quad (9)$$

ここで、反跳角 δ が衝突係数 p の関数であることを考えれば、直接はじきだし過程によるスパッター原子の角度分布 $Y(\theta_s)$ はイオンビームが一様であるので形式的に

$$Y(\theta_s) \propto \left| \frac{d\theta_s}{dp} \right|^{-1} \quad (10)$$

与えられ、散乱に関してやはりべき乗を仮定すれば角度分布 $Y(\theta_s)$ は次式となる。

$$Y(\theta_s) \propto \left| \frac{\sin 2\theta_s (\cos^2 \delta - q^2)^2 \tan^{1-m} \delta}{\cos^3 \delta \sin(\theta + \delta) \{ \cos^3 \delta \cos(\theta + \delta) - q^2 \cos(\theta + 2\delta) \}} \right| \quad (11)$$

したがって、直接はじきだし過程によるスパッター原子の角度分布の優先放角 θ_{pre} は次の超越方程式の

解として与えられた反跳角 δ_m を (9) 式に代入すればよい.

$$\{\cos^3 \delta_m \cos(\theta + \delta_m) - q^2 \cos(\theta + 2\delta_m)\} = 0 \quad (12)$$

図3は数値計算した優先放出角 θ_{pre} と δ_m を入射角の関数としてプロットしている. また, 図4には

図3. 450eVH⁺→Niと1keVH⁺→Niにおける直接はじきだし過程による優先放出角とそれを与える反跳角 δ_m の入射角依存性.

図4. 450eVH⁺→Ni($\theta=80^\circ$)と1keVH⁺→Ni($\theta=70^\circ, 80^\circ$)の場合の直接はじきだし過程による角度分布.

(11) 式を用いた角度分布 $Y(\theta_s)$ の計算結果をしめしてある. 図には450eVH⁺→Ni($\theta=80^\circ$)と1000eVH⁺→Ni($\theta=70^\circ$ と $\theta=80^\circ$)の場合についての結果を示した. この図からわかるように直接はじきだし過程によるスパッター原子の角度分布は鋭いピークをもつ.

優先放出角 θ_{pre} に関する簡単な表式は q が小さい時限り $\delta_m \sim \delta_2$ がいえるので

$$\theta_{pre} = \sin^{-1} \sqrt{(\cos \theta + q)(\cos \theta + 2q)} \quad (13)$$

と言う近似表式を得る.

間接はじきだし過程は2個以上の表面原子が関与するが, 図1においてA原子により $\Delta\theta$ だけ入射角が傾いてB原子に入射することに対応するので, およそ次の条件が成立すればB原子はスパッターされる.

$$p_1(\theta + \Delta\theta) \leq p_B \leq p_2(\theta + \Delta\theta) \quad (14)$$

ここに, B原子に対する衝突係数 p_B は次式で与えられる.

$$p_B = \cos(\theta + \Delta\theta) R_0 - p_A \cos \Delta\theta \quad (15)$$

ゆえに間接はじきだし過程は直接はじきだし過程より小さい入射角で表面原子がスパッターされる機構であり, $\Delta\theta$ は 0° から $90^\circ - \theta$ まで許されるので当然, 間接はじきだし過程による角度分布 $Y(\theta_g)$ は図4に示される角度分布を重ね合わせた分布となり直接はじきだし過程の分布と比べて幅広くなることが予想される。

3. 計算結果と議論

物理スパッタリングを計算機にてシミュレーションすることは多くの研究者によってなされてきたが, 中でも Max Plank 研究所 (Garching) の Eckstein 等は実験グループとタイアップして TRIM コードを用いて多くの研究成果を報告している^{24,25)}。しかしながら, $\theta > 70^\circ$ の場合には, まだ, 必ずしも良い一致をみない場合がある。本報告においては山村等によって開発された ACAT コードを用いてシミュレーションを行う。ACAT コードは他のモンテカルロ・コードと異なって平均自由行程の概念を用いてなく, 図5のように固定を一辺 R_0 の単位立方格子に分け, その中に標的原子が無作為に分布していると仮定している。本来, 平均自由行程を定義しにくい表面近傍のスパッタリング等の現象のシミュレーションに適していると期待できる。ACAT コードの詳細は既に他の論文に発表しているので本計算に必要な点だけを述べる。

本報告において用いたイオンは軽水素Hで, 標的物質はNiであり, 入射エネルギーは比較的低い450eVと1000eVを選んだ。水素原子の固体中での電子的エネルギー損失はZieglerのテーブルの半実験式と数値を用いて評価した。2体間ポテンシャルとしては, WilsonのKr-Cポテンシャル, Moliereポテンシャルを採用しているが, 遮蔽半径 a の値としては通常に0.100Åを用いる。図6は垂直入射 ($\theta = 0^\circ$) の場合のスパッタリング収量の入射エネルギー依存性をプロットしたものである。ポテンシャルとしてはKr-Cポテンシャルを用いた。実験は旧プラ研グループにより提唱されきた半実験式の結果である。ACAT値は実験と良い一致を示している。垂直入射の場合のスパッタリング収量のポテンシャル依存性は殆どない。すなわち, 450eV $H^+ \rightarrow Ni$ に対しては $Y(Kr-C) = 0.011$, $Y(Moliere) = 0.011$ である。

図5. ACATコードにおける非晶系固体のシミュレーション。

図6. 垂直入射の場合の $H^+ \rightarrow Ni$ のスパッタリング収量 (atoms/ion) のエネルギー依存性。ただし, ACATのポテンシャルはKr-C ($a=0.100\text{\AA}$) である。

垂直入射の場合のスパッタリングは中重イオンの場合と異なって入射イオンにより表面近傍に形成される衝突カスケードによるのではなく、図7のように固体内部で反射された軽イオンが表面から出る時に表面近傍の標的原子を叩き出すことによる。すなわち、軽イオンのスパッタリング収量は反射係数と密接な関係がある。本報告では図7のような過程をランダム過程と呼ぼう。図7における d はスパッターを引き起こした後方散乱イオンの最大侵入深さとして定義される量で、 d に注目するとランダム過程かはいじだし過程によるのかの識別がつく。

3.1 軽イオンスパッタリング収量の入射角依存性

図8, 9, 10は4keV, 1keV, 450eV H^+ イオンをNiターゲットに照射した場合のスパッタリング収量の入射角依存性をプロットしたものである。図においては実験とACAT(Kr-C)による計算結果を比較してある。ここに、遮蔽半径 a の値は0.100Åである。図における実線は次の半実験式を用いて実験値をベストフィットしたものである。すなわち、

$$Y(\theta)/Y(0) = T^f \exp[-\Sigma(X-1)] \quad (16)$$

図8. 4keV $H^+ \rightarrow Ni$ の場合の実験ならびにACATシミュレーション(Kr-C, $\alpha=0.100\text{\AA}$)の規格化されたスパッタリング収量 $Y(\theta)/Y(0)$ の入射角依存性。図における実線は半実験式(16)であり、各々のパラメータは表1を参照。

軽イオンスパッタリング機構

図7. 軽イオンスパッタリングの機構の特徴。図においては d はスパッターを引き起こした後方散乱イオンの最大侵入深さである。

図9. 1keV $H^+ \rightarrow Ni$ の場合の実験ならびにACATシミュレーション(Kr-C, $\alpha=0.100\text{\AA}$)の規格化されたスパッタリング収量 $Y(\theta)/Y(0)$ の入射角依存性。図における実線は半実験式(16)であり、各々のパラメータは表1を参照。

ここに, $T = (1 + A \sin \theta) / \cos \theta$, $X = 1 / \cos \theta$. T に含まれる $\sin \theta$ の項ははじきだし過程の寄与, すなわち, p_2^2 に対応している. それぞれの実験値に対する最適値は表1に示してある. 表1からわかるとおりエネルギーが増すにつれてはじきだし過程の寄与が大きくなっている.

図8, 9, 10を見て気付くことは4keV, 1keV については実験値と ACAT(Kr-C)の値の一致は満足すべきものである. しかしながら, 450eV については実験値と ACAT(Kr-C)の値の間には大きな差がある. ここで2つのことを指摘しなければならない. まず, ピーク近傍の $Y(\theta)/Y(0)$ 値が実験値に比べて大きいこと, また, ACAT データの θ_{opt} の値が実験値に比べて大きい方にずれていることである. これら3つの図からいくつかのことが考えられる. まず, 1keV, 4keV の場合に比べて低エネルギーの450eV ケースやすれすれの入射角の場合には表面一層の原子との相互作用が大きく, 表面の粗さの影響を検討する必要がある. さらに, ACAT データの θ_{opt} の値が実験値に比べて大きい方にずれていることは2体間ポテンシャルが KR-C($a=0.100\text{\AA}$)より遠距離まで及んでいる可能性がある.

まず, 2体間ポテンシャルのスパッタリング収量の入射角依存性に及ぼす影響を知るために Moliere ポテンシャル ($a=0.100\text{\AA}$)と Moliere ポテンシャルでも遮蔽定数を変えた場合, すなわち, $a=0.116\text{\AA}$ の結果を図11に示した. 図において Moliere-1 は $a=0.100\text{\AA}$ に対応し, Moliere-2は $a=0.116\text{\AA}$

図10. 450eV $H^+ \rightarrow Ni$ の場合の実験ならびに ACAT シミュレーション (Kr-C, $a=0.100\text{\AA}$) の規格化されたスパッタリング収量 $Y(\theta)/Y(0)$ の入射角依存性. 図における実線は半実験式 (16) であり, 各々のパラメータは表1を参照.

表1. $H^+ \rightarrow Ni$ 軽イオンスパッタリング収量の入射角依存性の実験値に対する半実験式 (16) の最適値

Energy	A	f	Σ
450eV	0.014	1.57	0.423
1 keV	0.314	1.53	0.258
4 keV	0.459	1.50	0.167

図11. 450eV $H^+ \rightarrow Ni$ の場合の実験ならびに ACAT シミュレーション (Moliere) の規格化されたスパッタリング収量 $Y(\theta)/Y(0)$ の入射角依存性. 図における実線は半実験式 (16) であり, 各々のパラメータは表1を参照.

に対応している。Moliere-2と実験値との一致はよい。なお、Moliere-2ポテンシャルの垂直入射の収量は $Y(\text{Moliere-2}) = 0.014$ である (表2 参照)。

表2. いろいろな2体間ポテンシャルに対する $450\text{eV H}^+ \rightarrow \text{Ni}$ のスパッタリング収量。

ポテンシャル \ 入射角	0°	60°	80°
Kr-C ($\alpha=0, 100\text{\AA}$)	0.010	0.024	0.037
Moliere ($\alpha=0, 100\text{\AA}$)	0.011	0.024	0.033
Moliere ($\alpha=0, 116\text{\AA}$)	0.014	0.030	0.030

3.2 軽イオンによるスパッター原子の角度分布

ACAT シミュレーションによる角度分布を入射角が 0° , 60° , 80° の場合について図12に示した。

図12. $450\text{eV H}^+ \rightarrow \text{Ni}$ ならびに $1\text{keV H}^+ \rightarrow \text{Ni}$ の場合における実験の角度分布と ACAT シミュレーション (Kr-C , $\alpha=0, 100\text{\AA}$) の角度分布の比較。入射角として 0° , 60° , 80° を選んでいる。

軽イオンスパッタリングの機構から考えていくらエネルギーが低くても角度分布が under-cosine 分布を取ることはない。図12において○は実験値であり、 $E=450\text{eV}$ の実験は Bohdansky 等のものであり、一方、 $E=1\text{keV}$ それは Roth 等の実験である。 $E=450\text{eV}$ で $\theta=80^\circ$ のケースを除いて ACAT シミュレーションと実験値の一致はよい。 $\theta=60^\circ$ では、はじきだし過程によらないので分布は巾広い形である。 $E=450\text{eV}$ で $\theta=80^\circ$ のケースは後に詳しく議論することしよう。

角度分布へ与える2体間ポテンシャルの影響をみるために図13に Kr-C ($\alpha=0, 100\text{\AA}$) と Moliere-2 ($\alpha=$

0.116Å)を用いてシミュレーションした結果を $\theta = 60^\circ$ と $\theta = 80^\circ$ の場合について示した。表2に示したようにスパッタリング収量は異なるが最大値を1として規格化した分布はあまり変わらない。特に $\theta = 80^\circ$ の場合に関しては同じように巾の狭い分布をしている。これは直接はじきだし過程の特徴であり、直接はじきだし過程による角度分布はあまり2体間ポテンシャル依存性がない。すなわち、図4の分布はポテンシャルに関係なく決まっている。しかしながら、 $E=450\text{eV}$ で $\theta = 80^\circ$ の場合、Kr-C($a=0.100\text{\AA}$)とMoliere-2($a=0.116\text{\AA}$)による優先放角は約 70° であり、実験の約 45° とかなり差がある。

はじきだし過程の分布に対する寄与の割合を知るために図7で定義されたスパッターを引き起こした後方散乱イオンの最大侵入深さ d をパラメーターとして分布を整理して図14, 15に示した。図14は450eVの場合であり、図15は1keVの場合である。図において $0 < d < 2.5\text{\AA}$ はNiの平均定数 R_0 が $2.22\text{\AA}$ であることを考えれば、はじきだし過程である。 $\theta = 60^\circ$ の場合は理論的にいっても間接はじきだし過程であり、 $\theta = 80^\circ$ は直接はじきだし過程であると言える。 $E=450\text{eV}$ で $\theta = 60^\circ$ ではランダム過程がかなりの寄与をしており、とくに後方にスパッターされる原子はランダム過程によることが明らかである。このことは図15の $E=1\text{keV}$ で $\theta = 60^\circ$ のケースではより顕著である。

図14は450eVで $\theta = 80^\circ$ の場合には表面一層でスパッタリングが起こっていること意味しており、当然表面の状態に強く依存していること

図13. 450eVH⁺→Ni(60°, 80°)の場合におけるACATシミュレーションの角度分布, Kr-C($a=0.100\text{\AA}$)とMoliere-2($a=0.116\text{\AA}$)の比較.

図14. 450eVH⁺→Ni($\theta = 60^\circ, 80^\circ$)の角度分布におけるはじきだし過程とランダム過程の寄与, ACATシミュレーション(Kr-C, $a=0.100\text{\AA}$)の結果.

が予想される。表面に発達したトポグラフィ、すなわち、表面の粗さをシミュレーションに取り入れる方法はいろいろ提案されているが定量的、一般的な取り扱いが困難である。表面の粗さの角度分布への影響は、まず、隣の原子による遮蔽効果が弱まり優先放出角がより小さくなることが考えられる。また、収量が減少することも考えられる。しかしながら、 $E=450\text{eV}$ で $\theta=80^\circ$ の場合に限って言えば、直接はじきだし過程の理論による優先放出角（この理論には隣の原子による遮蔽効果は含まれていない）とシミュレーションの優先放出角が完全に一致していることから、隣の原子による遮蔽効果によって実験とシミュレーションの分布が一致しないとは言えない。

図12, 13, 14からもわかるようにシミュレーションの優先放出角は用いた2体間ポテンシャルに関係せず、ほぼ、 70° であり理論値 72° と良く一致している。間接はじきだし過程による優先放出角は理論的に言って直接はじきだし過程による優先放出角より大きいはずである。また、図12の $E=450\text{eV}$ で $\theta=80^\circ$ の場合の実験の分布の特徴は分布の巾が比較的広いこと、そして、後方にスパッターされた原子がかなり存在することである。このことから、次のこと考えられる。入射角は 80° でも表面の粗さのため、図16に示すように実質的にはいろいろな角で表面を叩いている可能性がある。そこで、例えば、図17に示すように入射角に分布を持たすことによって、ここでは、粗さは (Δ_1/Δ_2) で特徴づけているが、表面の粗さをシミュレーションすることも可能である。その結果は図18に示した。ここに、ポテンシャルは Zr-C ($a=0.100\text{\AA}$) で、図における random surface というのは

図15. $1\text{keV H}^+ \rightarrow \text{Ni}$ ($\theta=60^\circ, 80^\circ$)の角度分布におけるはじきだし過程とランダム過程の寄与。ACATシミュレーション (Kr-C , $a=0.100\text{\AA}$)の結果。

図16. 表面粗さの模式図。

図17. 表面粗さを考慮した入射イオンビームの角度の広がり。

図5にあるACAT表面のことである。rough ($40^\circ/5^\circ$)は実験程, 優先放出角は小さくないが約 10° ACAT(random surface)小さくなっているし, 分布の中も大きくなっている。なお, $E = 450\text{eV}$ で $\theta = 80^\circ$ の場合の収量は $Y(\text{random surface}) = 0.037$ であり, $Y[\text{rough}(40^\circ/5^\circ)] = 0.026$ である。

4. まとめ

イオンとしては軽水素, 標的物質としてはNiを選び, 軽イオンスパッタリング収量の入射角依存性とスパッター原子の角度分布をモンテカルロ・シミュレーションコードACATと簡単なはじきだしモデルを用いて計算し, 実験と比較検討した。入射エネルギーとしては450eVと1keVを用いた。

軽イオンが斜めに照射された場合のスパッタリング現象の主たる様相ははじきだし過程で説明できる。はじきだし過程には直接過程と間接過程があり, 入射角が小さい場合には間接はじきだし過程しか起こりえず, 大きい場合には直接はじきだし過程が主である。本報告でのイオンのエネルギーは比較的低いので数値計算することにより, はじきだし過程による角度分布やその優先放出角を求めた。

スパッタリング収量の入射角依存性については2体間ポテンシャルを適切に選べば実験を再現できることがわかった。直接はじきだしモデルによる角度分布は非常にはっきりした優先放出角を持ち, その理論値は1keVの場合, シミュレーションの値, 実験値とよい一致をみた。しかしながら, 低エネルギーですれすれ角で照射した場合はスパッタリングは表面第一層でしか起こっていないくて現実の角度分布は表面荒さに強く影響されていることがわかった。

450 eV H $\rightarrow$ Ni

図18. 表面粗さを考慮した場合の450eVH $^+$ $\rightarrow$ Ni ($\theta = 80^\circ$)の角度分布。

参 考 文 献

- 1) R. Weissmann and R. Behrisch : Rad. Eff. **19** (1973) 69.
- 2) U. Littmark and S. Fedder : Nucl. Instr. Meth. **194** (1982) 607.
- 3) Y. Yamamura, N. Matsunami and N. Itoh : Rad. Eff. **71** (1983) 65.
- 4) P. Sigmund : Phys. Rev. **184** (1969) 383.
- 5) Y. Yamamura, Y. Itikawa and N. Itoh : IPPJ-AM-26, Institute of Plasma Physics, Nagoya Univ. (1983).
- 6) G.K. Wehner : J. Appl. Phys. **30** (1959) 1762.
- 7) H.L. Bay and J. Bohdanský : Appl. Phys. **19** (1979) 421.
- 8) J. Bohdanský, G.L. Chen, W. Eckstein, J. Roth and B.M.U. Scherzer, J. Nucl. Mater. **111&112** (1982) 717.
- 9) J. Roth, J. Bohdanský and W. Ottenberger : IPP 9/26 (1979).
- 10) A.A. Haars, J.W. Davis and C.H. Wu : J. Nucl. Mater. **162-164** (1989) 915.
- 11) J. Roth, J. Bohdanský and W. Ottenberger : J. Nucl. Mater. **165** (1989) 193.
- 12) Y. Yamamura and K. Muraoka, Nucl. Instr. Meth. **B42** (1989) 175.
- 13) M. Vicanek, J.J. Jimenez Rodriguez and P. Sigmund : Nucl. Instr. Meth. **B36** (1989) 124.

- 14) W. Eckstein and J. P. Biersack : Appl. Phys. **A37** (1985) 95.
- 15) Y. Yamamura, C. Mossner and H. Ochsner : Rad. Eff. **103** (1987) 25.
- 16) Y. Yamamura and T. Takiguchi : Rad. Eff. Def. in Solids(to be published).
- 17) T. Okutani and R. Shimizu, Jpn J. Appl. Phys. **21** (1982) 570.
- 18) H.L. Bay, J. Bohdanský, W.O. Hofer and J. Roth : Appl. Phys. **21** (1980) 327.
- 19) J. Bohdanský, G.L. Chen, W. Eckstein and J. Roth : J. Nucl. Mater. **103&104** (1981) 339.
- 20) H.L. Bay and W. Berres, Nucl. Instr. Meth. **B2** (1984) 606.
- 21) W. Berres, D. Rusbuldt, E. Hintz and H.L. Bay : Appl. Phys. **B35** (1984) 83.
- 22) Y. Yamamura, Nucl. Instr. Meth. **230** (1984) 578.
- 23) Y. Yamamura : Rad. Eff. **80** (1984) 193.
- 24) W. Eckstein and J. P. Biersack : Nucl. Instr. Meth., **B7/8** (1984) 727.
- 25) W. Eckstein : IPP-Report, No. 58, Garching (1986).
- 26) Y. Yamamura, C. Mossner and H. Ochsner : Rad. Eff. **105**, (1987) 31.