イオン - 固体相互作用 (2)

イオンスパッターとモンテカルロ法

山 村 泰 道

岡山理科大学理学部 〒700 岡山市理大町 1-1

(1990 年 7 月 11 日 受理)

Computer Studies on Ion-induced Sputtering

Yasunori YAMAMURA

Okayama University of Science
1-1, Ridai-cho, Okayama 700

(Received July 11, 1990)

単元素固体におけるイオン・スパッタリングの全収量と微分収量を主として ACAT コードによるシミュレーションを通して解説をする。まず、現存する荷電粒子と固体との相互作用をシミュレーションするコードを分類し、モンテカルロ法によるシミュレーション・コードの位置づけを行なった後、全収量については入射エネルギー依存性と入射角依存性の特徴を議論する。また、微分収量については放出粒子の角度分布とエネルギー分布を取り上げて実験、理論およびシミュレーションを比較することにより、現在、理解されていること、また、シミュレーション結果を踏まえて是非実験して欲しいことなどをまとめた。

1. はじめに

固体表面に荷電粒子、電子又は光などを照射すると、表面が損耗することはよく知られている。この現象はスパッタリングと呼ばれ、放電による壁の損耗、核融合炉におけるプラズマ対向材料の損耗などの原因となるほか、このスパッタリング現象を積極的に利用した二次イオン質量分析 (SIMS) や、コーティング膜作製など広い応用分野に関連している。

スパッタリングが生じるのは、固体表面近傍の原子が、粒子線のもつ運動エネルギーの一部を得て真空中に放出されることによる。したがって、一次的には、固体表面で起こる原子衝突現象を取り扱うこととなり、いわば表面近傍における照射損傷の問題であるといえる。したがって、スパッタリング現象を理解するためには、表面における原子の結合エネルギー、表面近傍に付与されたエネルギーの大きさ、および付与されたエネルギーがどのようにして原子放出のエネルギーに変換されるかを知らなければならない。

スパッタリングの研究は、その歴史も古く、その発端は一世紀以上も前のことである¹⁾。その後、加速器の発達や実用面からの要請もあって、多くの実験的、理論的

およびシミュレーション的研究がなされている。歴史的な記述は他の総説に譲って^{2,3)}、本稿では、モンテカルロ法による計算機シミュレーションによるスパッタリング現象の解析に焦点をあてて議論を展開する。

2. シミュレーション・コード

固体内原子衝突あるいは荷電粒子と固体との相互作用をシミュレーションするコードは、多くの研究者によって開発され、種々の問題に適用され多大の成果を得ている。特にスパッタリング現象の解析への応用は最も成果をあげたテーマの一つである。荷電粒子と固体との相互作用をシミュレーションするコードを分類することは難しいがその一例を表 1 に示している。

まず、イオンと固体の相互作用の観点から、基本的な素過程で分類するとエネルギー損失の過程（減速過程）と拡散過程とに分かれ、カスケードの発展の追跡の方法として空間発展的にフォローするか、時間発展的にフォローするかに大別される。また、粒子間の相互作用を取り扱う方法に二体間衝突近似と多粒子の相互作用を同時に解く分子動力学的手法がある。固体が結晶系か、非結晶もしくは多結晶系かによって、シミュレーション・コードは大きく異なってくる。例えば、有名な TRIM

表 1 荷電粒子と固体との相互作用をシミュレーションするコードの分類。

表 2 分子動力学法と2体間衝突近似にもとづくコードの特徴。

	MD	DYACAT DYACO CT	TRIM ACAT MARLOWE ACOCT
カスケード発展	時間的	時間的	空間的
衝突事象			
M+M	○	○	×
M+I	○	○	×
M+V	○	○	×
M+T	○	○	○
多体効果	○	△	×
入射粒子の種類			
単体イオン	○	○	○
分子イオン	○	○	×
クラスターイオン	○	○	×
計算時間	膨大	多	少

M: 運動している粒子
 I: 格子間原子
 V: 格子欠陥
 T: 標的原子

コードはカスケードを空間的に二体衝突近似の許で追跡するコードで非結晶系にのみ適用できる⁴⁾。一方、MARLOWE コードは本質的には TRIM 的ではあるが結晶系に対するコードである⁵⁾。

表において白ぬきの文字で書かれたコードは岡山理科大学の山村研究室で開発されたコードである。ACAT⁶⁾とACOCT⁷⁾コードは本質的にはTRIMやMARLOWEコードと同じであるがDYACAT⁸⁾とDYACOCT⁹⁾コードは二体間衝突近似の範囲内でカスケードを時間的にフォローするプログラムで結晶の時間的変化も考慮し

てカスケードの発展を追跡している。その他のコードとの比較を表2にあげている。表2においてM+M衝突は運動している粒子間の衝突を意味しており、M+V衝突は粒子と空孔との散乱すなわち、散乱せずに直進することを意味している。これらDYACATとDYACOCTは高密度カスケードに伴う非線形効果の解析に適している¹⁰⁾。

多元系物質のスパッタリングは単元素系に比較して解析は格段に難しくなる。すなわち、照射と共に表面近傍の濃度比が変化することを評価しなければならない。表1におけるTRIDYN¹¹⁾やEVOLVE¹²⁾は衝突によって照射と共に表面濃度が変化する効果が含まれている。しかしながら、より重照射の場合とか高温の場合には照射誘起拡散や照射誘起偏析を考える必要がある¹³⁾。表1のACAT-DIFFUSEコードは減速過程と拡散過程を繰り返し計算することにより照射誘起拡散や照射誘起偏析をも評価できるようにしたコードである¹⁴⁾。

3. スパッタリングへの応用

スパッタリング現象は、理論的にはボルツマン方程式を解くことによって、理解される。しかしながら、減速過程を含む半無限体系のボルツマン方程式は一般的にいて複雑な数値計算によってのみ解が得られる。ここにより簡便なモンテカルロ法によるシミュレーションがスパッタリングに応用される原因がある。荷電粒子と固体の相互作用のモンテカルロ法によるシミュレーションとはボルツマン方程式を逐次的に確率的に解く方法で、衝突におけるあらゆる可能性の中から乱数による無作為

抽出で一つの可能性を決定しサンプリングの理論を用いてボルツマン方程式を解く方法がある。

モンテカルロ法によるシミュレーションといった場合通常、結晶系は非晶系を意味している。また、スパッタリングに関連した物理量として全収量と微分収量（例えば、角度分布やエネルギー分布）がある。この章では、まず、全収量の入射エネルギー依存性、入射角依存性について議論し、微分スパッタリング収量としてエネルギー分布、角度分布について考察する。本稿においては紙面の都合上、非晶系の単元素固体スパッタリングに話を限ることとする。

現時点では、垂直入射の場合の収量はどのコードでも誤差範囲約 20% で再現できるが、問題は 2 体間相互作用

用ポテンシャルである。現在、多くのポテンシャルが提唱されているが軽イオンから重イオンまで使えるポテンシャルはなく、よりよい一致のためには、しばしば、遮蔽半径に補正を加えなければならない。一般によく使われているものにモリエール・ポテンシャル¹⁵⁾、Kr-C ポテンシャル¹⁶⁾等がある。ACAT や ACOCT コードにおいては 7 種類のポテンシャルが使用できる。本文における計算ではおもに Firsov¹⁷⁾ の遮蔽半径とモリエール・ポテンシャルを用いている。

また、電子のエネルギー損失の評価の方法には大きく分けて 2 つある。Lindhard-Scharff の経路に沿って積分していく所謂、非局所モデル¹⁸⁾と衝突係数に依存した Firsov の局所モデルがある¹⁹⁾。最近は局所モデルとし

図 1 スパッタリング収量の入射エネルギー依存性（実験値に関する文献は文献 23 を参照）。

てはよく Oen-Robinson モデルが使われる²⁰⁾。ACAT コード等においては Oen-Robinson 局所モデルを採用し、電子の阻止能断面積としては通常 Lindhard-Scharff のそれを用いるが、水素とヘリウムに対しては、Ziegler の表にある公式とパラメーターを使用している²¹⁾。

3.1 スパッタリング収量のエネルギー依存性

スパッタリング収量、すなわち、入射イオン1個当たり放出される原子数 Y はシグムンドによつての理論公式があたえられたが²²⁾、一方、より低エネルギー領域まで有用な半実験式が名大プラ研のグループによってあたえられている^{23,24)}。

$$Y = 0.042 \frac{\alpha^*(M_2/M_1)Q(z_2)S_n(E)}{U_s \{1 + 0.35U_s s_e(\varepsilon)\}} [1 - \sqrt{E_{th}/E}]^{2.8} \quad (1)$$

ここに、 U_s は表面結合エネルギーで $S_n(E)$ は核的阻止能、 M_1 , M_2 はイオンと標的原子の質量、 E は入射エネルギー、 $s_e(\varepsilon)$ は還元された電子的阻止能¹⁸⁾、 ε は還元された LSS エネルギーである。 Q は低エネルギー反跳原子の阻止能に関する補正項で Z_2 (標的原子の原子番号) だけの関数、 $\alpha^*(M_2/M_1)$ は M_2/M_1 のみの関数とともに文献 24 にあたえられている。ここに、 $\alpha^*(M_2/M_1)S_n(E)$ は表面近傍に付与されるエネルギーをあたえる。また、 E_{th} はスパッタリングのしきい値で小数回衝突モデルにより次の理論式であたえられる²⁵⁾。

$$E_{th} = \begin{cases} \frac{U_s}{\gamma} \frac{1}{\sin^{12}\left(\frac{2\pi+\theta}{6}\right)} & M_1 \geq M_2 \\ \frac{U_s}{\gamma} \left[\frac{M_2 + M_1}{M_2 + M_1 \cos \frac{\pi-\theta}{3}} \right]^6 & M_1 \leq M_2 \end{cases} \quad (2)$$

ここに、 θ は入射角で表面の法線方向から測られている。また、 γ は弾性散乱におけるエネルギー付与因子である。

図1は ACAT コードで計算されたスパッタリング収量を式(1)の半実験式(実線)と実験値²³⁾と比較してある。しきい値近傍のエネルギー依存性は激しい。

3.2 スパッタリング収量の入射角依存性

イオンの入射方向が垂直方向からずれるにしたがつて、少数回衝突に起因するスパッター原子の放出が観測される。スパッタリング収量の入射角依存性の特徴は図2に示されているように、入射角 θ が小さい時はカスケードがより表面で発達するので $\cos^{-f}\theta$ ($f=1\sim 2$) で増加するが入射角 θ が大きくなると表面にある隣接する原子の遮蔽効果により衝突係数が制限され表面層を通過しにくくなり、最後にはすべての入射イオンは殆どエネルギーを固体に付与することなく反射され、収量は急激

図2 典型的な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。

に減少する。このことは逆にスパッタリング収量の入射角依存性は表面状態に強く影響をうけることを意味している。

スパッタリング収量の入射角依存性を表す半実験式として次の式が山村等によって提案されている^{26,27)}。

$$\frac{Y(\theta)}{Y(0)} = x^f \exp[-\Sigma(x-1)] \quad (3)$$

ここに、 $x=1/\cos\theta$ で $Y(\theta)/Y(0)$ の最大値をあたえる θ の値 θ_{opt} は $\theta_{opt} = \cos^{-1}(\Sigma/f)$ であたえられる。(3)式の指数関数は表面層を突き抜ける確率を意味している。 θ_{opt} は軽イオンに対しては直接はじき出しモデルでは記述できるが、一方、重イオンの場合はより複雑である²⁷⁾。

図3, 4に1 keV $H^+ \rightarrow Ni$ と 1.05 keV $Ar^+ \rightarrow Si$, Ge の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てある。Si や Ge のような共有結合性の強い物質ではイオン照射のためランダムな結晶になり、ACAT などのモンテカルロ法のモデルに近い実験値²⁸⁾とシ

図3 1 keV $H^+ \rightarrow Ni$ 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 4 1.05 keV $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Si, Ge}$ 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 6 モデル化された種々の表面。

ミュレーションの結果の一致はよい。一方、図 3 の Ni のような金属では照射によって表面にコーン状、あるいは、ピラミッド状の突起が発達するので、例えば、図 3 で $\theta=80^\circ$ 近傍で ACAT コードで実験値²⁹⁾を再現するには表面の粗雑さを考慮しなければならない³⁰⁾。一例として、図 5 に 1.05 keV $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Ta}$ の実験値と表面の粗雑さを考慮したシミュレーションの結果を比較している。この計算では表面の粗さを階段関数でモデル化している (図 6 参照)。このように表面の粗さを考慮すればよい一致を得る場合が多い。

一方、 $Y(\theta)/Y(0)$ の値が $\text{H}^+ \rightarrow \text{Ni}$ と $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Ta}$ を較べるとおおきく異なるのは全収量に占める低次の反跳原子のスパッターされる割合によって説明される。図 7 に $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Ta}$ の場合を図 8 には $\text{H}^+ \rightarrow \text{Ni}$ の場合を例にとってスパッターされた反跳原子の世代別の入射角依存性を示している。若い一次二次の反跳原子は入射方向の記憶が薄れるほど衝突をしていないので若い反跳原子の割合が高いほど入射角依存性は激しい。

スパッタリング収量の入射角依存性の観点から、とくに興味深いのは入射エネルギーがしきい値近傍の場合である。式 (2) からわかるように M_1/M_2 が大きい場合には E_{th} は θ に対して強い減少関数となる (図 9 参照)。

図 5 1.05 keV $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Ta}$ のスパッタリング収量 $Y(\theta)$ の入射角依存性の表面状態の違いによる変化。Smooth surface とは完全に平坦な表面で、Random surface は通常の ACAT の表面で平均格子定数の半分の凹凸がある。

図 7 1.05 keV $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Ta}$ (Rough surface) の場合のスパッター原子の世代別入射角依存性。

図 8 1 keV $\text{H}^+ \rightarrow \text{Ni}$ (Random surface) の場合のスパッター原子の世代別入射角依存性。

図9 $H^+ \rightarrow Ni$, $Ar^+ \rightarrow Cu$, $Hg^+ \rightarrow Ni$ におけるスパッタリングのしきい値 (eV)。

その結果、理論的には垂直入射では収量が観測されなくても斜入射の場合には有限の原子がスパッターされる可能性がある。現在このような低エネルギーのイオン源ができないので実験的には検証されていないがシミュレーションではこの事実を示すことができる (図10参照)⁶⁾。

3.3 微分スパッタリング収量

微分スパッタリング収量を観測すれば固体内に発達した反跳原子のエネルギー分布や角度分布のより詳細な情報が得られる。トンプソンは衝突カスケードがスパッタリングの原因であると考え放出原子のエネルギー分布が高エネルギー側では $1/E_0^2$ (E_0 は反跳原子のエネルギー) に比例することを示した³¹⁾。また、シグムンドはよく発達したカスケード ($E \gg E_0$) は等方的であることよりスパッタリング収量の微分量として次の式を得た³²⁾。

$$\frac{d^2Y(E, \theta, E_s, \theta_s)}{dE_s d\Omega_s} = \frac{3}{2\pi^3} \frac{F_D(E, \theta, 0)}{NC_0} \frac{E_s \cos \theta_s}{(E_s + U_s)^3} \quad (4)$$

ここに、 $F_D(E, \theta, 0)$ は表面に付与されたエネルギーで、 E_s , θ_s は、それぞれ、スパッターされた原子のエネルギー、および放出角度である。

3.3.1 スパッター原子の角度分布

最初に垂直入射 ($\theta=0^\circ$) の場合を議論する。実験結果をまとめると図11のように低エネルギーの時は under-cosine 分布を示し、数 keV では cosine 分布をもち、高エネルギーイオンに対しては over-cosine 分布を示す³³⁾。

低エネルギーではカスケードが十分発達していないので内部のほとんどの反跳原子は入射方向の速度ベクトルを持っており³⁴⁾、分布は under-cosine になる。一方、エネルギーが十分高いと(4)式から分かるように分布は cosine になるはずだが実験は必ず、over-cosine 分布になる。このことについて2つの説明がある。ひとつは、missing plane モデル³⁵⁾、すなわち、表面近傍における散乱の非対称性であり、いまひとつは幾何学的非対称性に基づく表面数層におけるカスケード原子の非対称性によるという考え方である³⁶⁾。しかしながら、入射角依存性の場合と同様にスパッター原子の角度分布も表面状態に強く依存するので、解析の際には充分な配慮が必要である。悪い真空度の許では表面の汚染のため実験は必ず over-cosine 分布をしめす³⁷⁾。

垂直入射のスパッター原子の角度分布のフィティング公式として $\cos^n \theta$ がよく用いられるが³⁸⁾、ここでは、理論から予想される次の式を用いて角度分布を整理する^{34, 36)}。

$$\frac{dY(E, \theta, \theta_s)}{d\Omega_s} = A \cos \theta_s (1 + B \cos^2 \theta_s) \quad (5)$$

ここに、 A と B はフィティング・パラメーターで、 B はより深い層からの寄与を意味し、 $B=0$ は cosine 分布を意味している。図12は1960年代から1989年までの実験に対して B を求め、 $\gamma E/U_s$ についてプロットしたものである³⁹⁾。残念ながら、この図の実験値のデータが

図10 $H^+ \rightarrow Ni$, $Ar^+ \rightarrow Cu$, $Hg^+ \rightarrow Ni$ における種々の入射エネルギーに対する入射角依存性。

図 11 低, 中, 高エネルギーイオンによるスパッター原子の角度分布の特徴。低エネルギーイオン (—), 中エネルギーイオン (---), 高エネルギーイオン (---)。

図 12 半実験式(5)の B パラメータの $\gamma E/U_s$ プロット (実験値は文献 39 参照)。

らだけではばらつきが大きく, 大きな $\gamma E/U_s$ に対しての関数関係が明白ではない。関数関係を明らかにするため ACAT コードを用いて計算し結果を 2 重マークで同じ図にプロットしてある。この図からわかる事は $\gamma E/U_s$ が大きくなると B はほぼ一定値をとり, しかる後, ゆるやかに減少する。また, 表面の粗さは over-cosine 分布の度合いをさげる事がわかる。

軽イオンの場合はスパッタリングの機構が重いイオンと違って発達したカスケードによるのではなく, むしろ, 固体内部で反射された入射軽イオンが表面を通過する際に表面原子をはじき飛ばしスパッターさせる結果である。したがって, しきい値近傍の場合でも under-cosine 分布にはならない²⁵⁾。図 13 にいくつかのシミュレーションの結果を示している。

入射角を傾けた場合角度分布は図 14 に示すように若

図 13 軽イオンスパッタリングの角度分布。

図 14 斜入射イオンの角度分布の特徴。

い世代 (一次, 二次) の反跳原子による部分 (F 原子) と発達したカスケード原子による部分 (R 原子) とに分離して考えられる。この両者の角度分布への寄与の割合は入射角とイオンのエネルギーによる。

イオンのエネルギーがあまり大きくない場合は分布のピーク値すなわち優先放出角 β は少数回散乱によって決定される。直接はじきだしモデルによる理論計算によれば優先放出角 β は次式のようにスケーリングされる⁴⁰⁾。

$$W = \sqrt{(1+x)(1+2x)} \quad (6)$$

ここに, $W = \frac{\sin \beta}{\cos \theta}$, $X = \sqrt{\frac{U_s}{\gamma E}} \frac{1}{\cos \theta}$ である。

図 15 に実験値をスケーリングした値をプロットしてある。実線は(6)式である。Xの小さいところでWがほぼ0に近い値をとる実験データが存在するのは入射エネルギーが大きいため, 表面原子との散乱断面積が小さく直接はじきだしによるスパッタリングが起こっていないことを意味している。そのようなエネルギーの場合はスパッター原子はバルクで発達したカスケードの結果であり, すなわち, R原子の寄与のみであることを意味している。図 16 に 1 keV $H^+ \rightarrow Ni$ の場合の実験値⁴¹⁾と ACAT による結果とを比較してある。このように, ACAT コードによっておよその分布は再現できる。実験において, 例えば, $\theta=40^\circ$ の分布はF原子とR原子に対応するかなり顕著な二つのピークを持っている。当然, R原子の寄与の少ない低エネルギーイオンの角度分布には後方にスパッターされる可能性のあるR原子は観測されない (図 17 参照)。

以上のように, 斜入射の場合の角度分布はF原子の寄与とR原子の寄与の割合で理解できるが, その相対的

図 15 斜入射イオンの角度分布 (実験値) の優先放出。角 β のスケージング。実線は式(6)。

図 16 1 keV $H^+ \rightarrow Ni$ の角度分布の ACAT データと実験値との比較。

な割合はイオンと標的物質の組み合わせ、入射エネルギー、入射角度の関数である。

3.3.2 スパッター原子のエネルギー分布

(4)式は放出原子のエネルギー分布は放出角には依存せずトンプソン公式に従う事を示している。これは線形理論の特徴である。(4)式の成立条件のひとつに $\gamma E \gg U_s$ があるが、この条件を満足するような場合は実験もシミュレーションの結果も線形理論すなわちトンプソンの公式と良い一致を示す(図 18 参照)。この公式は現在、むしろ表面の結合エネルギーを実験的に決めるひとつの方法として定着している⁴²⁾。

しかしながら、厳密に言えば角度分布のところ述べて F 原子と R 原子のエネルギー分布は異なる。簡単のため、いま、分布を $E_s/(E_s + U_s)^m$ ($m=3$ はトンプソン公

図 17 しきい値近傍のイオンによるスパッタリングの角度分布。

図 18 1 keV $Ar^+ \rightarrow Nb$ (垂直入射) の規格化されたエネルギー分布。実線はトンプソンの公式。

図 19 2 keV $Ar^+ \rightarrow Nb$ における斜入射 (入射角: 70°) の場合の規格化されたエネルギー分布とトンプソン公式の比較。受け角 -65° のグラフはエネルギー軸を 20 eV ずらしている。

式) でフィティングする。F 原子がスパッターされる場合は理論的に言って $m < 3$ であり、この関数は $U_s/(m-1)$ で最大値をもつので、 $U_s/2$ より高エネルギー側にピークがくる。また、R 原子は $m > 3$ である。故に、F 原子の寄与の大きい斜入射の場合はトンプソンの公式からずれることが予想される(図 19 参照)。図 19 は $\theta = 70^\circ$ で 2 keV Ar イオンを Nb に照射した場合の分布 ($\theta_s = -65^\circ, 15^\circ$) をトンプソン公式と比較してある。 $\theta_s = -65^\circ$ の場合の平均の世代数は 3.14 で、 $m = 3.29$ であり、 $\theta_s = 15^\circ$ の平均の世代数は 2.55 で $m = 2.68$ である。ちなみに、図 18 の 1 keV $Ar^+ \rightarrow Nb$ の場合の世代数は 2.74 で、 $m = 3.03$ である。平均的に

図 20 $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Cu}$ と $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Nb}$ 垂直入射におけるエネルギー分布のパラメーター m の出射角依存性。

図 21 低エネルギーイオン (300 eV $\text{D}^+ \rightarrow \text{Au}$) によるスパッター原子のエネルギー分布とトンプソンの公式。Y(0) は垂直入射を、Y(60) は入射角 60° を意味している。

いって世代が若いほど m は小さい。図 20 に垂直入射の場合の出射角 θ_e によってエネルギー分布がどのように変化するかをパラメーター m をとって示している。この図からわかるように 2 keV, 5 keV の場合には線形理論のいうエネルギー分布は出射角によらずトンプソン公式を満足するという結論を支持している。

トンプソンの公式からずれるいまいひとつの場合は γE が U_s に較べてあまり大きくない場合である。その例を図 21 に 300 eV $\text{D}^+ \rightarrow \text{Au}$ の例を示した。トンプソンの公式からのずれは顕著である。この場合高エネルギー部分がほとんどないのは $\gamma E = 12 \text{ eV}$ であることを考えれば当然である。

図 22 1 keV $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Cu}$ のエネルギー分布の時間依存性エネルギー分布。

最後に DYACAT コードによる時間スケールで見たエネルギー分布の例を紹介する。図 22 は 1 keV $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Cu}$ の場合である。初期には高エネルギー原子 (F 原子) がスパッターされ、後期衝突期にスパッターされるのは低いエネルギーをもつ原子 (R 原子) ばかりである⁴³⁾。

4. む す び

単元素固体のイオン・スパッタリングについて実験、理論およびシミュレーションを比較することにより、現在、理解されていることをまとめた。実験データが最も不足しているのは、低エネルギーそれもしきい値の数倍のエネルギー領域である。この領域は核融合炉壁の腐食の評価に関連して重要であるがデータは皆無である。モンテカルロ・シミュレーションという事でいまひとつ興味ある非線形スパッタリングについては議論しなかった⁴⁴⁾。また多元素固体のスパッタリングについては議論をする余裕がなかったが、現在、表 1 における EVOLVE, TRIDYN, ACAT-DIFFUSE 等のコードは多元素固体スパッタリングの特徴である選択スパッタリングやバルクで同時に起こっている化学組成の変化のシミュレーションも可能なコードとして完成しつつあることを付記して本稿を終わりたい⁴⁵⁾。

文 献

- 1) W. R. Grove: Ann. Phys. (Germany) **93**, 417 (1852).
- 2) R. Behrisch, ed.: Sputtering by Ion Bombardment (Springer Verlag, Berlin, 1981).
- 3) H. H. Andersen: Nucl. Instr. Meth. **B 18**, 1 (1987).

- 4) W. Eckstein and J. P. Biersack : Appl. Phys. **A 37**, 95 (1985).
- 5) M. T. Robinson and I. M. Torrens : Phys. Rev. **9**, 5008 (1974).
- 6) Y. Yamamura and Y. Mizuno, IPPJ-AM-40, Inst. Plasma Physics, Nagoya University (1985).
- 7) Y. Yamamura and W. Takeuchi : Nucl. Instr. Meth. **B 29**, 461 (1987).
- 8) Y. Yamamura : Nucl. Instr. Meth. **B 33**, 493 (1988).
- 9) Y. Yamamura, I. Yamada and T. Takagi : Nucl. Instr. Meth. **B 37/38**, 902, (1989).
- 10) Y. Yamamura : Nucl. Instr. Meth. **194**, 151 (1982).
- 11) W. Moller and W. Eckstein : Nucl. Instr. Meth. **B 2**, 799 (1984).
- 12) M. L. Roush, T. S. Andreadis and O. F. Goktepe : Radiat. Eff. **55**, 119 (1981).
- 13) N. Itoh and K. Morita : Radiat. Eff. **80**, 163 (1984).
- 14) Y. Yamamura : Nucl. Instr. Meth. **B 28**, 17 (1987).
- 15) G. Moliere : Z. Naturforsch. **2 A**, 133 (1947).
- 16) W. D. Wilson and C. L. Bisson : Phys. Rev. **B 3**, 3984 (1971).
- 17) O. B. Firsov : Sov. Phys. -JETP **6**, 534 (1958).
- 18) J. Lindhard and M. Scharff : Phys. Rev. **124**, 128 (1961).
J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiott, Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **33**, No. 14 (1963).
- 19) O. B. Firsov : Sov. Phys.-JETP **9**, 1076 (1959).
- 20) O. S. Oen and M. T. Robinson : Nucl. Instr. Meth. **132**, 647 (1976).
- 21) H. H. Andersen and J. F. Ziegler : "The Stopping and Ranges of Ions in Matter", Vol. **3**, Pergamon Press (1977), J. F. Ziegler : *ibid*, Vol. **4** (1977).
- 22) P. Sigmund : Phys. Rev. **184**, 383 (1969).
- 23) N. Matsunami, Y. Yamamura, Y. Itikawa, N. Itoh, Y. Kazumata, S. Miyagawa, K. Morita, R. Shimizu and H. Tawara, At. Data Nucl. Data Tables **31**, 1 (1984).
- 24) N. Matsunami, Y. Yamamura, N. Itoh, H. Tawara and K. Kawamura : IPPJ-AM-52, Inst. Plasma Physics, Nagoya University (1987).
- 25) Y. Yamamura and J. Bohdansky : Vacuum **35**, 561 (1985).
- 26) Y. Yamamura : Nucl. Instr. Meth. **230**, 578 (1984).
- 27) Y. Yamamura, Y. Itikawa and N. Itoh : IPPJ-AM-26, Inst. Plasma Physics, Nagoya University (1983).
- 28) C. Mossner, Diploma Thesis, Univ. Kaiserslautern (1985).
- 29) H. L. Bay and J. Bohdansky : Appl. Phys. **19**, 421 (1979).
- 30) Y. Yamamura, C. Mossner and H. Oechsner : Radiat. Eff. **103**, 25 (1987).
- 31) M. W. Thompson and R. S. Nelson, Philo. Mag. **18**, 377 (1968).
- 32) P. Sigmund, "Inelastic Ion-Surface Collisions", ed. N. H. Tolk, J. C. Tully, W. Heiland and C. W. White (Academic Press, New York, 1977) p. 121.
- 33) J. L. Vossen : J. Vac. Sci. Technol. **11**, 875 (1974).
- 34) Y. Yamamura : Radiat. Eff. **55**, 49 (1981).
- 35) H. H. Andersen : Nucl. Instr. Meth. **B 33**, 464 (1988).
- 36) Y. Yamamura and K. Muraoka : Nucl. Instr. Meth. **B 42**, 175 (1989).
- 37) M. Szymonski, W. Huang and T. Onsgaad : Nucl. Instr. Meth. **B 14**, 263 (1986).
- 38) H. H. Andersen, B. Stenum, T. Sorensen and H. J. Whitlow : Nucl. Instr. Meth. **B 6**, 459 (1985).
- 39) Y. Yamamura, T. Takiguchi and H. Tawara : NIFS-DATA-1 (1990).
- 40) 山村泰道 : 未発表
- 41) J. Roth, J. Bohdansky and W. Ottenberger : IPP 9/26 (1979).
- 42) J. Dembowski, H. Oechsner, Y. Yamamura and M. Urbassek : Nucl. Instr. Meth. **B 18**, 464 (1987).
- 43) Y. Yamamura : Nucl. Instr. Meth. **B 45**, 707 (1990).
- 44) H. L. Bay, H. H. Andersen, W. O. Hofer and O. Nielsen : Nucl. Instr. Meth. **132**, 301 (1978).
- 45) S. T. Nakagawa and Y. Yamamura : Nucl. Instr. Meth. **B 33**, 780 (1988).