

固体表面と原子、分子、イオンとの相互作用ダイナミクスの理解の基礎の確立を目指して

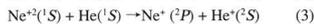
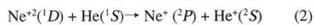
今井 敏博 (理工学・季村 峯生)

研究の目的

プラズマエッチングなどに代表される固体表面の加工において、原子分子レベルでの物理機構の解明と理解の重要性が高まっている。そのために、表面やその近傍での様々な現象を原子レベルで調べることが不可欠となる。本研究では、イオン-原子の衝突現象を理論計算により求め、イオンによるエッチング、薄膜生成、コーティング等の素過程のような微視的な現象の理解を深めることを目的とする。さらに、重粒子イオンを用いた医療応用への理解も目的とする。今回、Ne²⁺イオンとHe原子との1電子移行断面積、Ne⁺イオンとHe⁺との1電子移行断面積をもとめた。

研究成果

今回調べる反応過程は、



および、



であり、1 ~ 1000 keV の衝突エネルギーでの断面積を算出する。そして、計算には、衝突過程において原子-イオンが分子軌道 (Molecular Orbital) を描くものとし、比較的遅い衝突現象で有力な方法である、分子の電子状態を基底関数とした緊密結合法 (Close-Coupling Method) を用いて行った。その分子軌道において、衝突の初期状態、終状態である Ne²⁺(²P)+He(¹S) (1³Σ⁺, 2³Π), Ne²⁺(¹D)+He(¹S) (2¹Σ⁺, 2¹Π), Ne²⁺(¹S)+He(¹S) (3¹Σ⁺), Ne+(²P)+He(²S) (1³Σ⁺, 1³Π, 1¹Σ⁺, 1¹Π) という分子状態だけでなく、Ne*(²S)+He*(²S) (4¹Σ⁺), Ne*(²D)+He*(²S) (5¹S⁺), Ne(¹S)+He²⁺(6¹Σ⁺) という高い励起状態、2電子移行状態をも考慮し、より詳細な結果を求めた。

図1に Ne²⁺+He 衝突の断面積の結果を示す。ここで、50 keV 以上の高エネルギー衝突において、基底状態である、Ne²⁺(²P)+He(¹S) 衝突と他の励起状態 Ne²⁺(¹D)+He(¹S) 及び Ne²⁺(¹S)+He(¹S) 衝突と比較をすると、1000 keV では、基底状態の衝突による断面積が非常に大きく、励起状態の衝突による断面積はそれぞれ 17% 程の値しか持たない。しかし、50 keV 以下では、基底状態の断面積が際立って大きいということではなく、励起状態の衝突による断面積は、重要な役割を果たしていることが分かる。

図2に Ne⁺+He⁺ 衝突の計算結果を示す。先の Ne²⁺+He 衝突の結果と同じく、10 keV 以上の高エネルギー衝突において、基底状態 Ne²⁺(²P)+He(¹S) を生成する断面積が、他の励起状態 Ne²⁺(¹D)+He(¹S) 及び Ne²⁺(¹S)+He(¹S) を生成する断面積よりも大きく、1000 keV では、それぞれ 55%、10% 程の値になる。しかし、10 keV 以下の領域では、励起状態を生成する断面積は基底状態を生成する断面積と同じくらい大きさを持つため、励起の効果は無視できないと考えられる。

産業技術への貢献

表面に関わる産業において、外部からの粒子入射による相互作用や衝突過程により得られる情報をもとに、材料診断や薄膜生成、エッチングなどによる設計・加工といった技術の基幹をなしている。そして、原子レベルでの粒子を制御しながら表面を加工する技術は、これからのマクロレベルでの集積回路などの生成・加工といった分野で必要不可欠なものである。しかしながら、このような微視的なスケールでの現象は、ほとんどに理解されておらず、半経験的に応用されているのみである。そういった現象を調べ、理解を深めるには基礎科学による第一理論からの詳細な調査が必要となる。そのため、今回示したような原子衝突の立場から現象を示し、応用のデータやこの研究をもとにしたシミュレーション法を用いた表面設計などによって有益なモデルを提唱するということが求められており、基礎科学と工業技術への橋渡しをする必要がある。

研究発表

1. 今井敏博, 季村峯生 日本物理学会 第55回年次会 2000年9月22日
2. T. W. Imai, M. Kimura, J. P. Gu, G. Hirsch, R. J. Buenker and P. Stancil, Physical Review A 2001 投稿中

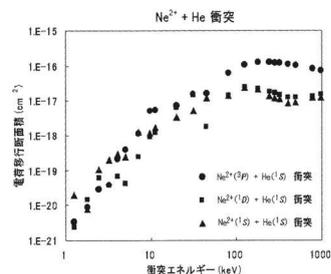


図1: Ne²⁺+He衝突の部分断面積

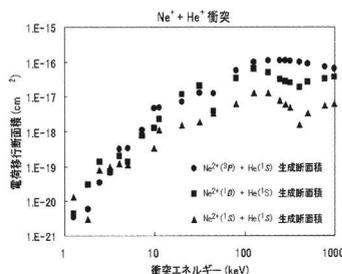


図2: Ne⁺+He⁺衝突の部分断面積

グループメンバー

氏名	所属	職
季村 峯生	工・共通講座	教授
今井 敏博	VBL	非常勤研究員

連絡先

電話: 0836-39-9111 (ext 8807)
 FAX: 0836-35-9492 (学科事務)
 E-mail: twimai@po.cc.yamaguchi-u.ac.jp