つくばリポジトリ
©H. Kudo ilabook1 2005

# イ オ ン ビ ー ム 工 学 入 門

## — 論文を読むための基礎知識 —

Ver. 2024-08-26 (10th Edition)

工　藤　　博

加速されたイオンを物質に入射させると, 弾性・非弾性原子衝突を通じて多様な形態のエネルギー・運動量移行が起きる．その全体像を把握するには, 原子分子物理, 物性・固体電子論，原子核物理, 放射線工学等の複数の教科書を並列に読み，既存の知識をいわば再構成することが必要になる．そのため, 大学においても, イオンビームと物質の相互作用に関しての体系的な講義を組む機会は少なく, 必要に応じて市販のハンドブック等による概略説明に触れる程度で済ませるのが現状であろう．しかしながら, 核子あたり $10^3 \sim 10^6$ 電子ボルト (keV∼ MeV) の加速イオンによる最新の計測・分析・照射技術は応用物理分野のみにとどまらず, 生物，医療，環境，宇宙関連分野にまで及んでいる．そこで, 本テキストでは関連研究の最近の進歩を踏まえて, 応用原子物理の視点から, 汎用性の高い基礎的事項を体系として学べるように大学院修士課程の水準で構成した．

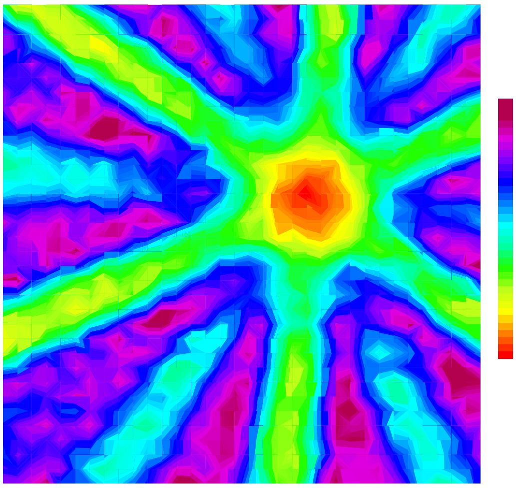

図 1: サファイアの “結晶格子像”．7 MeV $H^+$ イオンの衝突によって生成された高速 2 次電子を用いて $1° \times 1°$ の角度走査により観測された [1, 2], §8.3.

# 目 次


**1 2体の弾性衝突 5**
1.1 重心運動と相対運動の分離 . . . . . 5
1.2 実験室系における関係式 . . . . . 7
1.3 実験室系と重心系の角度変換 . . . . . 9

**2 散乱断面積 10**
2.1 微分散乱断面積 . . . . . 10
2.2 微分散乱断面積の変数変換と全散乱断面積 . . . . . 11

**3 剛体球による散乱 12**
3.1 重い剛体球 . . . . . 12
3.2 同種の剛体球間の衝突 . . . . . 13

**4 クーロン場による散乱 14**
4.1 重心系におけるラザフォード (Rutherford) 散乱 . . . . . 14
4.2 実験室系におけるラザフォード散乱 . . . . . 15
4.3 ラザフォード微分散乱断面積の変数変換 . . . . . 16
4.4 散乱計測と微分散乱断面積 . . . . . 17
4.5 原子核半径とクーロン障壁 . . . . . 19

**5 量子力学による散乱の扱い 20**
5.1 中心力場による球状波の生成 . . . . . 20
5.2 クーロン場による散乱 . . . . . 21
5.3 古典力学近似との比較 . . . . . 23

**6 原子の静電ポテンシャル 24**
6.1 水素原子と水素様イオン . . . . . 24
6.2 原子のトーマス・フェルミ (Thomas–Fermi) モデル . . . . . 26
6.2.1 原子ポテンシャル . . . . . 26
6.2.2 電子の密度分布 . . . . . 28
6.2.3 電子の運動量分布 . . . . . 30
6.3 原子衝突における相互作用ポテンシャル . . . . . 31
6.3.1 モリエールポテンシャル . . . . . 31
6.3.2 ZBL ポテンシャル . . . . . 32

**7 荷電ビームとクーロンシャドー 33**
7.1 古典力学によるクーロンシャドー . . . . . 33
7.2 古典力学による反転シャドー . . . . . 34
7.3 量子力学によるクーロンシャドー . . . . . 35
7.4 剛体球散乱との比較 . . . . . 37

**8 結晶によるイオンビームの散乱** **38**
8.1 シャドーコーンの干渉 . . . . . 38
8.2 遮へいクーロン場のシャドー . . . . . 39
8.3 イオンチャネリングと関連現象 . . . . . 40
8.4 イオンチャネリングの連続モデル . . . . . 40
8.4.1 連続ポテンシャルと軌道のスケーリング . . . . . 40
8.4.2 チャネリングの臨界角 . . . . . 42
8.4.3 チャネリングイオンの粒子性 . . . . . 43
8.4.4 チャネリングイオンの統計平衡分布 . . . . . 43

**9 イオンの固体内荷電状態** **45**
9.1 平衡荷電状態と平均電荷 . . . . . 45
9.2 平均電荷の半経験式 . . . . . 46
9.3 特別な条件下での荷電状態 . . . . . 47

**10 結晶場による共鳴干渉励起** **48**
10.1 共鳴干渉励起の条件 . . . . . 48
10.2 RCE の遷移確率 . . . . . 49
10.3 RCE の観測 . . . . . 50

**11 物質の阻止能** **52**
11.1 阻止能の概念 . . . . . 53
11.2 高速荷電粒子の阻止能 . . . . . 54
11.2.1 半古典的考察 . . . . . 54
11.2.2 Bethe の阻止能公式 . . . . . 55
11.3 低速荷電粒子の阻止能 . . . . . 60
11.4 荷電粒子の核的阻止能 . . . . . 61
11.5 阻止能の補足事項 . . . . . 62
11.5.1 阻止能の Bragg 則 . . . . . 62
11.5.2 イオン荷電状態と阻止能 . . . . . 62
11.5.3 阻止断面積の $Z_1, Z_2$ 振動 . . . . . 62

**12 イオン後方散乱分析** **63**
12.1 後方 1 回散乱過程 . . . . . 63
12.2 ラザフォード後方散乱分光 . . . . . 64
12.3 180° 散乱強度の異常増加 . . . . . 66

**13 イオン誘起電子放出** **68**
13.1 イオン・原子衝突による電子放出 . . . . . 68
13.2 運動学的電子放出の 2 体衝突モデル . . . . . 69
13.2.1 静止電子へのエネルギー移行 . . . . . 70
13.2.2 エネルギー移行と軌道速度 . . . . . 70
13.2.3 軌道電子の電離 . . . . . 71
13.2.4 水素様原子の電離 . . . . . 72
13.2.5 非水素様原子の電離 . . . . . 74

13.2.6 電子スペクトルの $Z_1^2$ スケーリング . . . . . . . . . . . . . . . . . . 74
13.3 固体ターゲットと $Z_1^2$ スケーリング . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 74
13.4 0° 電子分光 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 75

**14 荷電粒子と固体の誘電応答 77**
14.1 固体中のプラズマ振動 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 77
14.2 振動電場と誘電関数 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 78
14.3 誘電応答とフーリエ変換 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 80
14.4 荷電粒子の物質透過と誘電応答 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 81
14.4.1 誘電応答による阻止能 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 82
14.4.2 非弾性散乱の平均自由距離 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 83
14.4.3 ウェイク . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 84
14.4.4 分子・クラスター入射における近接効果 . . . . . . . . . . . . . . . 86
14.5 Lindhard の誘電関数 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 87
14.5.1 自由電子気体と一次摂動 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 87
14.5.2 電荷の生成と $\varepsilon(k,\omega)$ . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 89
14.5.3 $\varepsilon(k,\omega)$ の解析表現 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 90
14.5.4 プラズマ振動の分散関係 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 92

**15 付録 94**
15.1 固体原子の熱振動変位 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 94
15.2 孤立原子と固体原子によるイオン散乱 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 96
15.3 水素様イオンの軌道電子速度 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 97
15.4 実験室系から入射イオン静止系への断面積変換 . . . . . . . . . . . . . . . 99
15.5 等速で直進する点電荷のつくる電磁場 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 100
15.6 加速器による元素・物質分析のミニ技術史 . . . . . . . . . . . . . . . . . 101

**あとがき 107**

# 1　2体の弾性衝突

我々が見たり触れたりする日常的な世界 (‘マクロ’ 的世界) では，完全弾性衝突は存在しないと言っていい．ビリヤード球どうしの衝突ですら運動エネルギーの一部は球の内部振動へと移行し，音あるいは熱として発散する．ところが，電子あるいは原子核などの核子間の衝突では，移行エネルギーよりも核子内部の量子化された振動エネルギー間隔 (核準位間エネルギー) がずっと大きければ，衝突前後で内部エネルギーは不変であり，したがって完全弾性衝突が起きる．この意味で古典力学で最初に習う弾性衝突の理想形は，マクロ的世界ではなく原子・核子を対象とするミクロな世界で実現されている．

## 1.1　重心運動と相対運動の分離

図 2 に示すように，位置ベクトル $r_1$，$r_2$ の 2 質点間に働く力が $f(|r_1 - r_2|)$ と書けるとき，2 質点の運動方程式は

$$M_1 \frac{\mathrm{d}^2 r_1}{\mathrm{d}t^2} = f(|r_1 - r_2|)\,, \tag{1}$$

$$M_2 \frac{\mathrm{d}^2 r_2}{\mathrm{d}t^2} = -f(|r_1 - r_2|) \tag{2}$$

である．(1)，(2) を辺々加え，あるいはそれぞれを $M_1$，$M_2$ で割って辺々引くと

$$\frac{\mathrm{d}^2(M_1 r_1 + M_2 r_2)}{\mathrm{d}t^2} = 0\,, \tag{3}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2(r_1 - r_2)}{\mathrm{d}t^2} = \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) f(|r_1 - r_2|) \tag{4}$$

が得られる．2 質点の重心 $R_{\mathrm{g}}$ が

$$R_{\mathrm{g}} = \frac{M_1 r_1 + M_2 r_2}{M_1 + M_2} \tag{5}$$

で与えられることに注意し，さらに換算質量 (reduced mass)$M_r$ を

$$\frac{1}{M_{\mathrm{r}}} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \tag{6}$$

で定義する．これらを用いれば (3) および (4) はそれぞれ

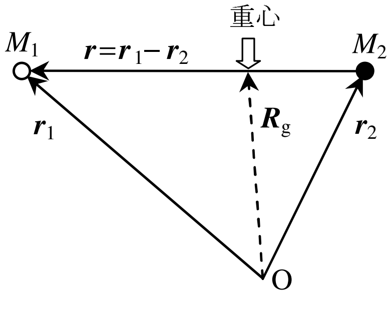


図 2: 2 質点の位置ベクトル．$R_{\mathrm{g}} = r_2 + M_1 r/(M_1 + M_2)$ =[(5)]

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2 R_\mathrm{g}}{\mathrm{d}t^2} &= 0\,, \qquad (7)\\
M_\mathrm{r}\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2} &= f(|r|) \qquad (8)
\end{aligned}
$$

と書ける．ここで $r = r_1 - r_2$ は図 2 に示される相対位置ベクトルである．

(7) は $\mathrm{d}R_\mathrm{g}/\mathrm{d}t$ が一定，すなわち重心が等速直線運動することを意味する．特に重心速度が 0 の系（観測者が重心に位置する系）を重心系という．(5) の時間微分から明らかなように，重心系では 2 質点の運動量の和は常に 0 である．また，(8) は相対運動が換算質量 $M_\mathrm{r}$ の仮想質点の運動方程式に従うことを示している．

次に運動エネルギーの関係について考える．図 2 で

$$
\begin{aligned}
r_1 &= R_\mathrm{g} + \frac{M_2 r}{M_1+M_2}\,, \qquad (9)\\
r_2 &= R_\mathrm{g} - \frac{M_1 r}{M_1+M_2} \qquad (10)
\end{aligned}
$$

であるから，2 質点の速度はそれぞれ

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}r_1}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}R_\mathrm{g}}{\mathrm{d}t} + \frac{M_\mathrm{r}}{M_1}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\,, \qquad (11)\\
\frac{\mathrm{d}r_2}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}R_\mathrm{g}}{\mathrm{d}t} - \frac{M_\mathrm{r}}{M_2}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} \qquad (12)
\end{aligned}
$$

である．(11)，(12) により実験室系における全運動エネルギー $E_\mathrm{kin}$ は

$$
\begin{aligned}
E_\mathrm{kin} &= \frac{M_1}{2}\left|\frac{\mathrm{d}r_1}{\mathrm{d}t}\right|^2 + \frac{M_2}{2}\left|\frac{\mathrm{d}r_2}{\mathrm{d}t}\right|^2\\
&= \frac{M_1+M_2}{2}\left|\frac{\mathrm{d}R_\mathrm{g}}{\mathrm{d}t}\right|^2 + \frac{M_\mathrm{r}}{2}\left|\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right|^2 \qquad (13)
\end{aligned}
$$

のように書き換えられる．(13) の第 1 項は重心の運動エネルギー，第 2 項は重心系における運動エネルギーを表す．後者は紛れもなく相対運動の運動エネルギーであり，さらにこれは重心上から見た 2 質点の運動エネルギーの和に等しい (問題 1–2 参照).

以上は古典力学による扱いであるが量子力学の場合も同様であり，2 体問題を相対運動と重心運動に分けることができ，さらに相対運動は換算質量 $M_\mathrm{r}$ の 1 体問題に帰着する．実際，2 体間の相互作用ポテンシャルを $V(|r|)$，重心運動と相対運動の波動関数をそれぞれ $\psi_\mathrm{g}$，$\psi_\mathrm{r}$，それらに対応するエネルギー固有値をそれぞれ $E_\mathrm{g}$，$E_\mathrm{r}$ とすれば，Schrödinger 方程式は

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2(M_1+M_2)}\nabla^2\psi_\mathrm{g} &= E_\mathrm{g}\,\psi_\mathrm{g}\,, \qquad (14)\\
-\frac{\hbar^2}{2M_\mathrm{r}}\nabla^2\psi_\mathrm{r} + V(r)\,\psi_\mathrm{r} &= E_\mathrm{r}\,\psi_\mathrm{r} \qquad (15)
\end{aligned}
$$

で与えられる．全運動エネルギーは $E_\mathrm{g}+E_\mathrm{r}$ である．これは古典力学の場合の (13) に対応する．

一般に “重心系での”運動，“重心系での”運動方程式，“重心系での”運動エネルギー... という表現がよく用いられるが，これらは散乱現象に関しては相対運動の (4)，(15) などと等価 (図 3 で $\theta_\mathrm{c} = \theta$) であるため，実際上は相対運動に置き換えて理解することも可能である．

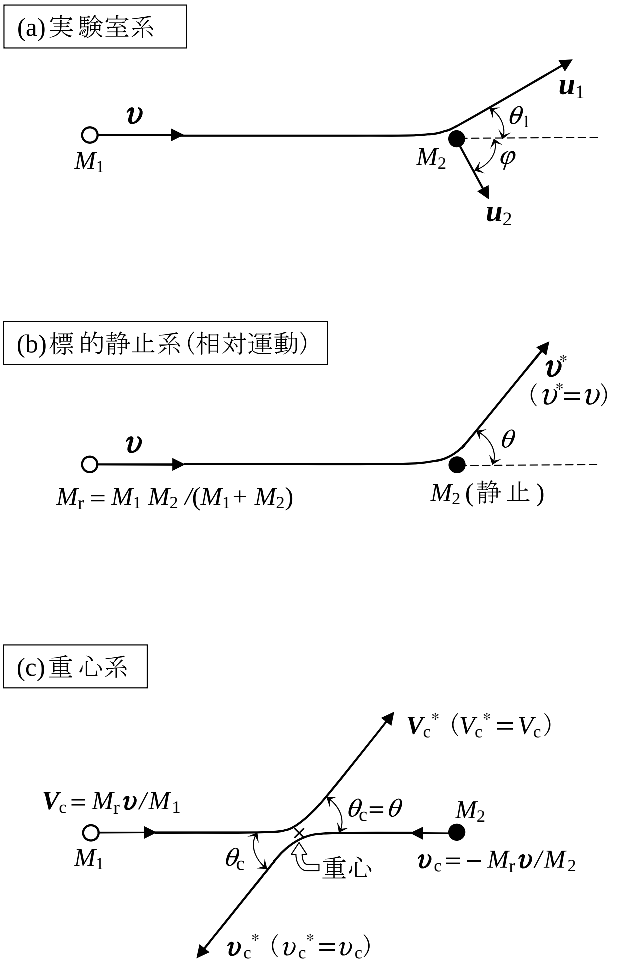


図 3: 2 質点の弾性散乱 (2 質点は紙面上を運動している)．(b) では $M_1$ の運動は換算質量 $M_r$ の仮想質点の運動方程式で扱われる (§ 1.1)

**問題 1.1–1** (13) を導け．
**問題 1.1–2** (11)，(12) より重心系における $M_1, M_2$ の速度 $V_c, v_c$ はそれぞれ $M_r v/M_1$, $-M_r v/M_2$ であることを示せ．ただし $v = \mathrm{d}r/\mathrm{d}t$ である．
**問題 1.1–3** 図 3(c) において 2 質点の運動エネルギーの和が相対運動のエネルギーに等しいことを確かめよ．

## 1.2 実験室系における関係式

実際の衝突実験に対応する実験室系では，図 3(a) のように，衝突前に静止していた $M_2$ は衝突後に跳ね飛ばされ (反跳され)，$M_1$ は散乱される．図 3(a) において，エネルギーおよび運動量保存則は

$$\frac{M_1 v^2}{2} = \frac{M_1 u_1^2}{2} + \frac{M_2 u_2^2}{2}\,, \tag{16}$$
$$M_1 v = M_1 u_1 \cos\theta_1 + M_2 u_2 \cos\varphi\,, \tag{17}$$
$$0 = M_1 u_1 \sin\theta_1 - M_2 u_2 \sin\varphi \tag{18}$$

と書ける．$u_1$，$u_2$，$\theta_1$，$\varphi$ の 4 個を未知のパラメータと考えれば，(16)–(18) 式から次のような関係式が得られる．

- $\theta_1$ と $\varphi$ の関係 (図 4)

$$\tan\theta_1 = \frac{M_2\sin 2\varphi}{M_1 - M_2\cos 2\varphi} \tag{19}$$

ただし, $0 < \theta_1 \leq \pi, 0 \leq \varphi < \pi/2$.

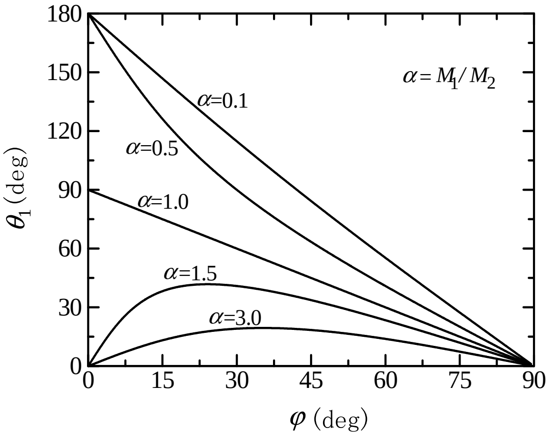


図 4: $\theta_1$ と $\varphi$ の関係

- $M_2$ の得る運動エネルギー（$u_2$ と $\varphi$ の関係）

$$T = \frac{M_2 u_2^2}{2} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1+M_2)^2} E\cos^2\varphi \tag{20}$$

ただし, $E = M_1 v^2/2$.

- $M_2$ の得る最大運動エネルギー ($\varphi = 0^\circ$)

$$T_m = \frac{4M_1 M_2}{(M_1+M_2)^2} E \tag{21}$$

- 散乱後の $M_1$ の運動エネルギー $E'$（$u_1$ と $\theta_1$ の関係）

$$E' = \frac{M_1 u_1^2}{2} = kE\,, \tag{22}$$

$$k = \left(\frac{M_1\cos\theta_1 \pm \sqrt{M_2^2 - M_1^2\sin^2\theta_1}}{M_1+M_2}\right)^2 \tag{23}$$

ここで $M_1 \leq M_2$ のときは根号の符号は $+$，$M_1 > M_2$ のときは $+$，$-$ どちらも有りうる．

**問題 1.2–1** (23) で $M_1 = M_2$ のとき $k = \cos^2\theta_1\ (0 \leq \theta_1 \leq \pi/2)$ であることを確かめよ．
**問題 1.2–2** (23) で $M_1 > M_2$ のとき根号の $+$，$-$ はどのような場合に対応するかを調べよ．

## 1.3 実験室系と重心系の角度変換

重心系では観測者は2質点の重心に位置していて，衝突前後の状況は図3(c)に示されている．実験室系および重心系における角度の関係は，図3(b)に示す標的静止系を仲介役として速度ベクトルの関係から求められる．実験室系[図3(a)]で，散乱後の$M_1$を$M_2$から見ればその速度は$u_1-u_2$であるが，これは$M_2$を基準にした$M_1$の相対運動[図3(b)]そのものであるから，

$$v^* = u_1 - u_2 \tag{24}$$

の関係が得られる．

次に，重心系[図3(c)]において散乱後の$M_1$を$M_2$から見ればその相対速度は$V_c^* - v_c^*$であるが，これもまた図3(b)の標的静止系で見る散乱そのものである．重心系では2質点の運動量ベクトルの和が0であることから，$V_c^*$と$v_c^*$は常に一直線上にあるので，明らかに$\theta_c = \theta$である．すなわち**重心上で見た散乱角は標的上で見た散乱角に等しい**．したがって，以降は，重心系の散乱角も$\theta$と書くことにする．

結局のところ，実験室系と重心系の角度の変換は(24)から得られる．実際，(24)を水平，垂直成分に分ければ，

$$v\cos\theta = u_1\cos\theta_1 - u_2\cos\varphi\ , \tag{25}$$

$$v\sin\theta = u_1\sin\theta_1 + u_2\sin\varphi \tag{26}$$

の関係が成立する．(25)，(26)，および式(16)–(18)から次の関係式が得られる．

- $\theta_1$と$\theta$の関係

$$\tan\theta_1 = \frac{\sin\theta}{\frac{M_1}{M_2} + \cos\theta} \tag{27}$$

- $\varphi$と$\theta$の関係

$$\cot\frac{\theta}{2} = \tan\varphi\ \text{,すなわち}\quad \varphi = \frac{\pi-\theta}{2} \tag{28}$$

**問題 1.3–1** (27)および(28)を$u_1, u_2, v_c, v_c^*, V_c^*$(図3を参照)に関するベクトルの関係図を書くことにより求めよ．

**問題 1.3–2** (28)により(20)のもう一つの表現として

$$T = T_m \sin^2\frac{\theta}{2} \tag{29}$$

が得られることを示せ．

## 2 散乱断面積

一方向に次々に飛来する電子，イオン等のビーム（粒子束）が空間の力の場，例えばクーロン場で散乱される場合，そこから十分遠方における散乱粒子の角度分布は「微分散乱断面積」という物理量で与えられる．また，散乱粒子の総量は微分散乱断面積の積分値である「散乱断面積」で与えられる．荷電粒子のみならずフォトン，中性子の散乱現象の議論においても (微分) 散乱断面積の概念は必須の基礎事項である．

### 2.1 微分散乱断面積

ここでは中心力場による散乱を扱うことにより，微分散乱断面積を説明しよう．ビーム方向に垂直な面の単位面積内を単位時間に通過する粒子数でビーム強度 $I_0$ を表すことにする．したがって $I_0$ の単位は例えば [(cm$^2$・秒)$^{-1}$] である．

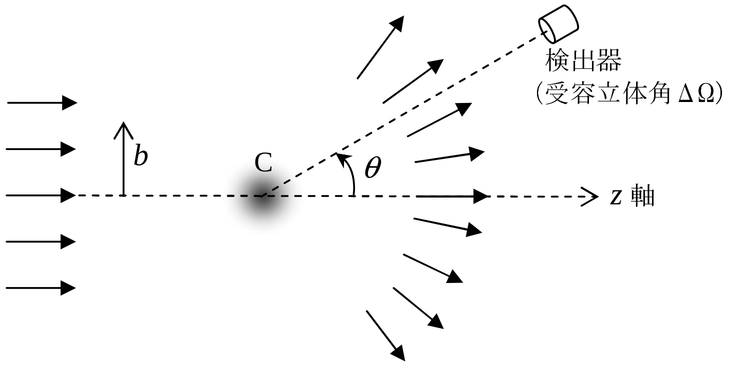


図 5: 中心力場 C による粒子の散乱

図 5 に示すように，中心力場 C から十分離れた距離で $z$ 軸から $\theta\,(0 \le \theta \le \pi)$ の角度に受容立体角 $\Delta\Omega\,(\ll 4\pi)$ の検出器を置く．単位時間内にこの検出器に入る粒子数を $\Delta N(\theta)$（単位は例えば [粒子数/秒]) としよう．$\Delta N(\theta)$ は $I_0$ および $\Delta\Omega$ に比例するので，実質的な散乱強度は $\Delta N(\theta)/(I_0\Delta\Omega)$ である．これを微分散乱断面積 (differential scattering cross section) と呼び，$(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)$ で表す．すなわち，図 5 の場合，

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right) = \frac{\Delta N(\theta)}{I_0\Delta\Omega} \tag{30}$$

と書ける．微分散乱断面積は**単位ビーム強度の粒子が散乱される際，ある角度方向の単位立体角内を単位時間内に通過する粒子数**である．なお，(30) の次元は [長さ] の 2 乗であり，このことが “断面積”と呼ばれる理由のひとつである．

古典力学による扱いでは粒子の位置を確定できるため，図 5 に示される衝突係数 (impact parameter) $b$ と $\theta$ は通常 1:1 の対応関係にある．[1] 衝突係数が $b$ と $b+\mathrm{d}b\,(\mathrm{d}b \ll b)$ の間の値をとるような入射粒子は $2\pi b\,\mathrm{d}b$ の面積内を通過してくる．これらの入射粒子は散乱後に $\theta$ と $\theta+\mathrm{d}\theta$ の間の角度，すなわちこの 2 つの角度で定める立体角

$$\mathrm{d}\Omega = 2\pi\sin\theta\,\mathrm{d}\theta \tag{31}$$

[1] 核力の関わる条件でのクーロン散乱は 1:1 の対応にならない場合がある（Rainbow scattering）

内に散乱されるとする．入射粒子数は散乱後の粒子数に等しいから，

$$I_0 \times 2\pi b\,\mathrm{d}b = I_0 \mathrm{d}\Omega \times \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right) \tag{32}$$

である．このことから次の表式が得られる．

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = 2\pi b \left|\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\Omega}\right| = \frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta}\right| . \tag{33}$$

なお，絶対値を付けたのは微分散乱断面積が (30) により正の値で定義されたためである.[2] さらに，$(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)$ の括弧を取った理由は，$\mathrm{d}\sigma$ あるいは $\mathrm{d}\Omega$ のように微分形式で扱うことが多いためである．

## 2.2 微分散乱断面積の変数変換と全散乱断面積

実験室系，重心系の微分散乱断面積の間には微分の変数変換の関係

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_1} = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\cdot\frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}\Omega_1} = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\cdot\frac{\sin\theta}{\sin\theta_1}\cdot\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\theta_1} \tag{34}$$

が成り立つ．ただし

$$\mathrm{d}\Omega_1 = 2\pi\sin\theta_1\,\mathrm{d}\theta_1 \tag{35}$$

は実験室系における立体角である．

微分散乱断面積を全方向について積分すれば，単位ビーム強度の入射条件に対して単位時間あたりの全散乱粒子数を表す全散乱断面積 $\sigma$ が得られる．全散乱粒子数は観測する座標系に依存しない一定量であるから，重心系と実験室系に対して次式が成り立つ．

$$\sigma = \int_0^{4\pi}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\mathrm{d}\Omega = \int_0^{4\pi}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_1}\mathrm{d}\Omega_1\ . \tag{36}$$

[2] 一般に $b$ の小さい衝突ほど散乱角は大きくなる $(\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}b < 0)$，すなわち $\mathrm{d}b/\mathrm{d}\Omega < 0$.

# 3　剛体球による散乱

中心力場による散乱の簡単な例として，粒子ビームが剛体球によって弾性散乱される様子を古典力学で扱う．簡単のため，剛体球表面における摩擦は無視する．

## 3.1　重い剛体球

入射粒子の半径は剛体球の半径 $R_0$ に比べて非常に小さく，その質量も剛体球に比べて無視しうるほど小さいとする．図 6 に示すように角度 $\alpha, \theta$ をとると，$\theta$ は重心系 (あるいは標的静止系) での散乱角である (§1.3 参照)．距離 $b$ は衝突径数 (impact parameter) と呼ばれる．なお，粒子の入射・散乱軌道および剛体球の中心は紙面上にあることに注意．

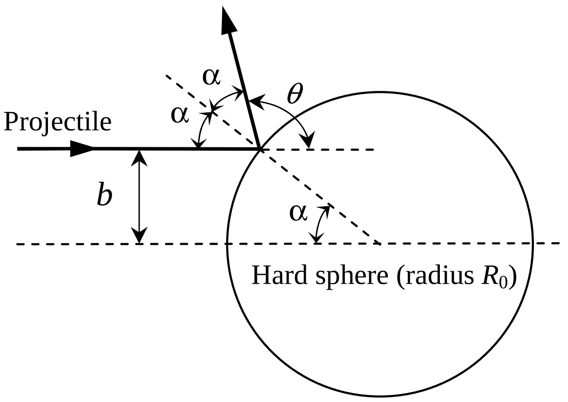


図 6: 剛体球による粒子の古典力学的散乱

図 6 において

$$\alpha = (\pi - \theta)/2\,, \tag{37}$$

$$b = R_0 \sin\alpha \tag{38}$$

であるから，$b$ と $\theta$ の関係は

$$b = R_0 \cos\frac{\theta}{2} \tag{39}$$

で与えられる．したがって

$$2\pi b\,\mathrm{d}b = -\frac{\pi R_0^2}{2}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = -\frac{R_0^2}{4}\,\mathrm{d}\Omega \tag{40}$$

となる．(40)，(33) より微分散乱断面積は,

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{R_0^2}{4} \tag{41}$$

と表される．微分散乱断面積が $\theta$ に依存しないことから $\pi R_0^2$ の面積内に入射した粒子は散乱後に全方位に均等に分布することがわかる．このことは，図 5 のような実験を行った場合に，**検出器**

**に入る散乱粒子の計数率が $\theta$ に依存しない一定値になる**ことを意味する．また，(41) を全立体角で積分すれば全散乱断面積 $\sigma$ が得られる．実際，

$$\sigma = \int_0^{4\pi} \frac{R_0^2}{4}\,\mathrm{d}\Omega = \pi R_0^2\,, \tag{42}$$

すなわち全散乱断面積は幾何学的な断面積に一致することがわかる．

これらは重い剛体球による古典力学的な弾性散乱の特徴である．さらに付け加えれば，散乱断面積が入射粒子の速度に依存しないことも特徴といえる．

**問題 3.1–1** 入射粒子の半径 $r$ を考慮する場合には，(38)–(42) 中の $R_0$ を $R_0 + r$ に置き換えればよいことを示せ．

## 3.2　同種の剛体球間の衝突

図 6 において，入射粒子が標的と同種の剛体球であるとする．散乱を重心系で扱えば結果は (41) と同じく

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{(2R_0)^2}{4}\,\mathrm{d}\Omega = R_0^2\,\mathrm{d}\Omega \tag{43}$$

である．ここで問題 3.1–1 の結果を用いた．(43) を実験室系で表してみよう．入射粒子と標的が同質量であることから (27) より

$$\tan\theta_1 = \frac{\sin\theta}{1+\cos\theta} = \tan\frac{\theta}{2}\ \text{，すなわち}\quad \theta = 2\theta_1 \tag{44}$$

になる．したがって

$$\mathrm{d}\Omega = 2\pi\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = 4\cos\theta_1\,2\pi\sin\theta_1\,\mathrm{d}\theta_1 = 4\cos\theta_1\,\mathrm{d}\Omega_1 \tag{45}$$

を得る．(45)，(43) より

$$\mathrm{d}\sigma = 4R_0^2\cos\theta_1\,\mathrm{d}\Omega_1 \tag{46}$$

となる．実験室系においては，$\pi(2R_0)^2 = 4\pi R_0^2$ の面積内に入射した粒子は散乱後に $\cos\theta_1$ に比例して前方へ多く分布することがわかる．

$\varphi$ を変数として (43) を書くこともできる．(28) により変数変換を行うと

$$\mathrm{d}\sigma = 4R_0^2\cos\varphi\,\mathrm{d}\Omega_2 \tag{47}$$

ただし

$$\mathrm{d}\Omega_2 = 2\pi\sin\varphi\,\mathrm{d}\varphi \tag{48}$$

である．(47) は反跳された剛体球の角度分布を表す．(46) と (47) が同じ角度分布になったのは，入射粒子が標的と同種の剛体球であることから当然の結果と言える．

**問題 3.2–1** (46) を積分して全断面積 $\sigma$ を求め，その値が (43) の積分から得られる値 $4\pi R_0^2$ に一致すること，すなわち (36) が成立していることを確かめよ．
**問題 3.2–2** (47) を導け ($\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega_2 > 0$ に注意).

# 4　クーロン場による散乱

クーロン場による荷電粒子の散乱をまず古典力学で扱ってみよう．これはラザフォード散乱断面積を求めることに他ならない．古典力学による近似の妥当性は §5 で議論される．

## 4.1　重心系におけるラザフォード (Rutherford) 散乱

質量 $M_1$，電荷 $Z_1e$ の粒子と質量 $M_2$，電荷 $Z_2e$ の粒子が遠方から相対速度 $v$ で近づき，相互のクーロン反発力によって散乱される場合を考える．ここで $e = 1.602\times10^{-19}$C は電気素量であり，$Z_1, Z_2$ は実際には原子番号 (原子核の電荷) を表す．$Z_2e$ を基準とする相対座標におけるクーロン散乱の様子を図 7 に示す．このときの $Z_1e$ の軌道は §1.1 で扱ったように，換算質量 $M_\mathrm{r} = (M_1^{-1}+M_2^{-1})^{-1}$ の仮想粒子の運動方程式から求められる．実際，その軌道は $X$ 軸上の $F$，$F'$ を焦点とする双曲線の一方である．また，衝突径数 $b$ に対応する散乱角を $\theta$ とする．なお，クーロン引力の場合には標的粒子は $F$ ではなく $F'$ にあるとすればよい．

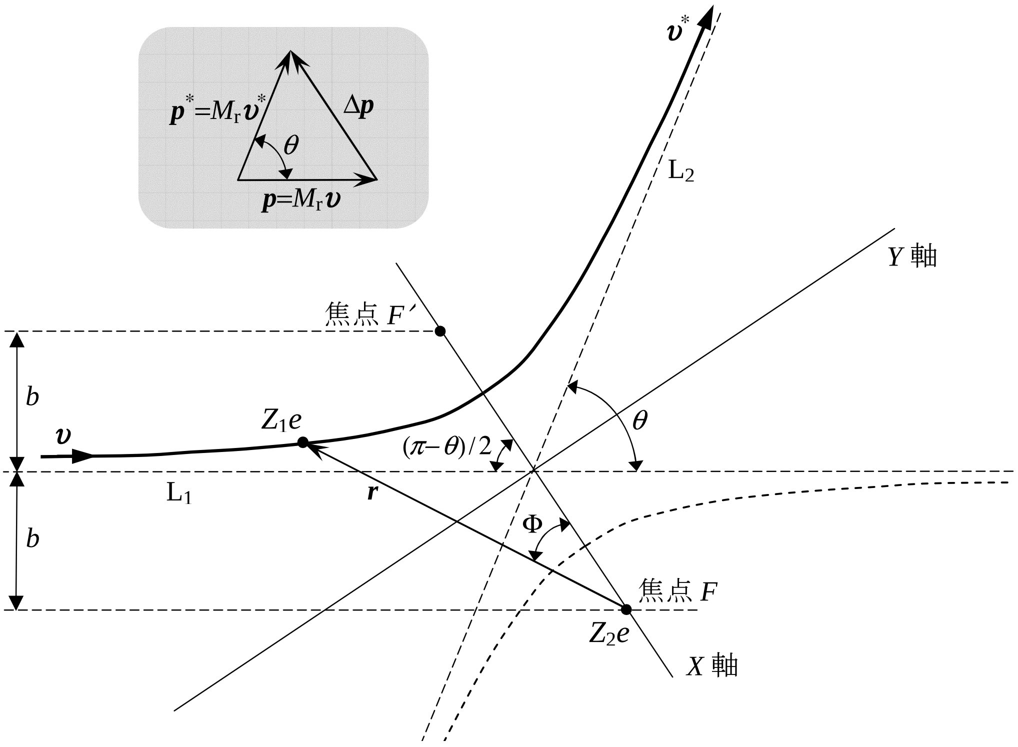


図 7: 相対座標上のクーロン散乱．$Z_1e$ の双曲線軌道は紙面上にあり，$\mathrm{L}_1$，$\mathrm{L}_2$ は双曲線の漸近線を示す ($X$ 軸を水平に置いて見るとわかりやすい). $|v| = |v^*|$, したがって $|p| = |p^*|$ であることに注意.

図 7 における粒子の軌道は $X$ 軸に関して対称であることから，散乱前後の運動量変化 $\Delta p$ は，力積の $X$ 軸方向成分の総和 (時間 $t$ について $-\infty < t < \infty$ で積分) に等しい.[3]　すなわち

$$|\Delta p| = 2M_\mathrm{r} v \sin\frac{\theta}{2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Z_1Z_2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\cos\Phi\,\mathrm{d}t \tag{49}$$

[3]軌道が $X$ 軸に関して対称であることは，時間反転しても軌道が同一であることと等価である．もちろん $Y$ 方向の運動量の寄与は $Y>0, Y<0$ で相殺してゼロになる.

の関係が得られる．ただし，$\varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}\,\mathrm{C^2\,N^{-1}\,m^{-2}}$ は真空の誘電率である.[4] また，中心力による運動では角運動量は保存されるので

$$M_\mathrm{r} v b = M_\mathrm{r} r^2 \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t}\ ,\ \text{すなわち}\quad \mathrm{d}t = \frac{r^2}{vb}\mathrm{d}\Phi \tag{50}$$

が成り立つ (問題 4.1–1 参照)．(50) により (49) の積分変数を $t$ から $\Phi$ へ変換する．積分区間は $-(\pi-\theta)/2 \leq \Phi \leq (\pi-\theta)/2$ であることに注意して計算すれば，$\theta$ と $b$ の関係として

$$\cot\frac{\theta}{2} = \frac{4\pi\varepsilon_0 M_\mathrm{r} v^2 b}{Z_1 Z_2 e^2} = \frac{2b}{R_\mathrm{c}} \tag{51}$$

を得る．ただし，

$$R_\mathrm{c} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\pi\varepsilon_0 M_\mathrm{r} v^2} \tag{52}$$

は正面衝突の場合の最近接距離 (distance of closest approach) で力学的エネルギー保存の関係

$$\frac{M_\mathrm{r} v^2}{2} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 R_\mathrm{c}} \tag{53}$$

から得られる．(51)，(33) より

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{8\pi\varepsilon_0 M_\mathrm{r} v^2}\right)^2 \mathrm{cosec}^4\frac{\theta}{2} = \left(\frac{R_\mathrm{c}}{4}\right)^2 \mathrm{cosec}^4\frac{\theta}{2} \tag{54}$$

すなわち重心系 (あるいは標的静止系) におけるラザフォード微分散乱断面積が得られた．

(54) を $0 \leq \theta \leq \pi$ で積分して全散乱断面積 $\sigma$ を計算しようとすると $\theta = 0$ で発散してしまう．すなわちラザフォード散乱では全散乱量を議論できない．これは，例えば剛体球による散乱 (42) の場合と対照的である．

**問題 4.1–1** 図 7 で入射粒子が $t = -\infty$ において漸近線 $\mathrm{L}_1$ 上を速度 $v$ で運動しているとき，$Z_2 e$ から見た角運動量が $M_\mathrm{r} v b$ であることを示せ．

## 4.2 実験室系におけるラザフォード散乱

(54) の実験室系における表現は変換式 (34) により導かれる．実際，(27) から得られる関係式[5]

$$\cos\theta = -s\sin^2\theta_1 + \sqrt{1 - s^2\sin^2\theta_1}\,\cos\theta_1\ ,$$
$$\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}\left(1 + s\sin^2\theta_1 - \sqrt{1 - s^2\sin^2\theta_1}\,\cos\theta_1\right)\ ,$$
$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\theta_1} = \frac{1}{\cos^2\theta_1}\cdot\frac{(s+\cos\theta)^2}{1+s\cos\theta}\ ,$$

ただし $s = M_1/M_2$, により (34) を計算すると実験室系でのラザフォード微分散乱断面積

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_1} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 M_1 v^2}\right)^2 \frac{\left[\cos\theta_1 + \sqrt{1-(M_1/M_2)^2\sin^2\theta_1}\right]^2}{\sin^4\theta_1\sqrt{1-(M_1/M_2)^2\sin^2\theta_1}} \tag{55}$$

[4] ここでは国際単位系 (SI) を用いている．cgs 系の場合は形式的に $e^2/4\pi\varepsilon_0$ を $e^2$ に置き換えればよい．
[5] 第一式の根号の符号は $s \to 0$ で $\theta_1 \to \theta$ の条件より $+$ のみになる．

が得られる．

上記の導出方法における代数計算は多少手間がかかるので，次の関係式を利用する方法で (55) を求めてもよい．(51)，(27) より実験室系における散乱角 $\theta_1$ と $b$ の関係は

$$2\cot\theta_1 = \frac{b}{\rho} + \left[\left(\frac{M_1}{M_2}\right)^2 - 1\right]\frac{\rho}{b} \tag{56}$$

と表される (問題 4.2–1)．ただし $\rho = Z_1Z_2e^2/4\pi\varepsilon_0 M_1 v^2$ である．(56) から (55) が得られる (問題 4.2–3)．

**問題 4.2–1** 次の手順により (56) を導け.

(i) (51) より $\tan(\theta/2) = \rho(M_1/M_2+1)/b$ を示せ.

(ii) $\tan(\theta/2) = \alpha$ とおけば，$\sin\theta = 2\alpha/(1+\alpha^2), \cos\theta = (1-\alpha^2)/(1+\alpha^2)$ である．これらを (27) に代入して (56) を得よ.

**問題 4.2–2** $M_1 \ll M_2$ のとき (56) は (51) に一致することを確かめよ.

**問題 4.2–3** 次の手順により (55) を導け.

(i) (56) の両辺を 2 乗し，$b^2$ を $\theta_1$ で表せ.

(ii) (34) の右辺に (33) を代入すると $\mathrm{d}\sigma = (b/\sin\theta_1)\,|\mathrm{d}b/\mathrm{d}\theta_1|\mathrm{d}\Omega_1 = (2\sin\theta_1)^{-1}\,|\mathrm{d}b^2/\mathrm{d}\theta_1|\,\mathrm{d}\Omega_1$ が得られる．これを用いて $\mathrm{d}\sigma$ を計算せよ．このとき，(55) の分子の根号に $\pm$ が付くことに注意.

(iii) $M_1 \ll M_2$ のとき $\mathrm{d}\sigma$ は (54) に一致すべきことから分子の根号の符号は $+$ であることを示せ.

## 4.3 ラザフォード微分散乱断面積の変数変換

微分散乱断面積を表す変数として $\theta, \theta_1$ 以外に §1 で導入された $\varphi, T$ などを用いることができる．これは (34) と同様な単なる変数変換であるが，実測される物理量に対応している．

- 微分反跳断面積（ラザフォード微分散乱断面積を $\varphi$ で表現したもの）

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_2} = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\cdot\frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}\Omega_2} = \left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4\pi\varepsilon_0 M_1 v^2}\right)^2\left(1+\frac{M_1}{M_2}\right)^2\frac{1}{\cos^3\varphi} \tag{57}$$

ただし, $\mathrm{d}\Omega_2 = 2\pi\sin\varphi\,\mathrm{d}\varphi$.

- 微分反跳エネルギー断面積（ラザフォード微分散乱断面積を $T$ で表現したもの）

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T} = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\cdot\frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}T} = \left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{2\pi}{M_2v^2T^2} \tag{58}$$

(57) は反跳された標的粒子の角度分布を表す．(58) は標的粒子の反跳エネルギー分布を表す．後者は $M_1$ に依存しないことに注意．したがって，同じ速度の同位体粒子，例えば陽子と重陽子では標的粒子の反跳エネルギー分布は同じである．

応用面から付け加えれば，(57) は固体内水素の分析法である ERDA(弾性反跳検出分析) で用いられる．また，(58) は物質に入射した荷電粒子が生成する 2 次電子のエネルギー分布を論ずる場合の基本となる．

**問題 4.3–1** (28) を用いて (57) を導け.

**問題 4.3–2** (29) を用いて (58) を導け.

## 4.4　散乱計測と微分散乱断面積

衝突における粒子の一方あるいは双方が原子の場合，§4 で説明したラザフォード散乱断面積は，衝突の際の粒子と標的原子との最短距離が原子の内殻電子の平均半径 (0.1 Å 程度) よりも小さく，かつ原子核半径 ($10^{-5}$–$10^{-4}$ Å) よりも大きいときには良い近似となる．これは $10^6$ eV 程度の運動エネルギーを持つ $\alpha$ 粒子等の軽イオンが比較的重い原子によって後方へ散乱を受けるときに相当する．このような条件では，散乱断面積は入射イオンの荷電状態 (例えば $He^+$ と $He^{2+}$) にほとんど依存しない．

それ以外の場合，すなわち低エネルギーイオンの散乱あるいは小さい散乱角における測定では，標的原子の核電荷が内殻電子によって遮へいされるために実際の散乱断面積はラザフォード散乱断面積の値よりも小さくなる．また入射粒子のエネルギーが高くなって衝突時に双方の原子核が接触するような条件では，クーロン力以外に核力を考慮する必要が生じる．

なお，固体を対象とする散乱計測の実験では，粒子エネルギーの単位として eV(電子ボルト)，長さの単位としてÅ($= 10^{-10}$m) を用いることが多い．したがって散乱断面積の計算の際に，

$$\begin{aligned}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} &= \frac{(1.602\times10^{-19}\,\mathrm{C})^2}{4\pi\times8.854\times10^{-12}\,\mathrm{C^2\,N^{-1}\,m^{-2}}}\\ &= 2.307\times10^{-28}\,[\mathrm{J\cdot m}]\\ &= 14.4\,[\mathrm{eV\cdot Å}]\end{aligned}\tag{59}$$

を用いると便利である．

以下の例題ではラザフォード散乱断面積の使用できる条件が設定されている．微分散乱断面積が散乱計測においてどのように使われるかを見てみよう．

**例題 4.4–1**　厚さ 2000Å の金箔に入射した 5 MeV の $\alpha$ 粒子が $\pi/2$ 以上の角度へ散乱される確率はいくらか．

$M_1 = 4, M_2 = 197$ より $M_r = 3.92 \simeq M_1$ であるから，重心系の微分散乱断面積 (54) を用いることにする．まず，$\theta$ から $\pi$ の間の積分断面積 $\sigma(\theta)$ は

$$\sigma(\theta) = \int_\theta^\pi \left(\frac{R_c}{4}\right)^2 \mathrm{cosec}^4\frac{\theta}{2}\cdot 2\pi\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = \frac{\pi R_c^2}{4}\cot^2\frac{\theta}{2}\tag{60}$$

と表される．また $M_1 v^2/2 = 5\,\mathrm{MeV}$ であるから (52) により

$$R_c \simeq \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_1 Z_2}{M_1 v^2/2} = \frac{14.4\,\mathrm{eV\cdot Å}\times2\times79}{5\times10^6\,\mathrm{eV}} = 4.55\times10^{-4}\,\mathrm{Å}$$

である．これより $\sigma(\pi/2) = 1.63\times10^{-7}\,\mathrm{Å}^2$ を得る．金箔を $\alpha$ 粒子の入射方向から見た場合，図 8 のように金原子を中心として $\sigma(\pi/2)$ の面積内に入射する $\alpha$ 粒子の割合が求める確率 $P_{\pi/2}$ であるから，この金箔の単位面積あたりの原子数を $N_s$ とすれば $P_{\pi/2} = \sigma(\pi/2)\times N_s$ と表される．金の原子数密度 $5.90\times10^{22}\,\mathrm{cm^{-3}}$ を用いれば，$N_s = 5.90\times10^{22}\times2000\times10^{-8} = 1.18\times10^{18}$ $[\mathrm{cm^{-2}}]$ であるから

$$P_{\pi/2} = 1.63\times10^{-7}\times10^{-16}\times1.18\times10^{18} = 1.92\times10^{-5}$$

が得られる．すなわち，背面方向に散乱されるのは入射した $\alpha$ 粒子の約 5 万個について 1 個である．

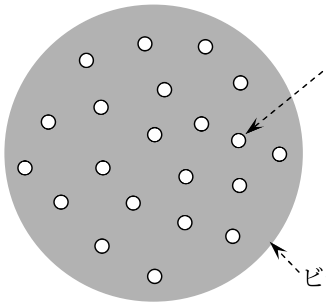


図 8: 金箔中の原子を中心に $\sigma(\pi/2)$ の面積に入射した $\alpha$ 粒子が $\pi/2$ 以上の角度へ散乱される．この図で，$[\sigma(\pi/2)\times$ 原子数$]/[\alpha$ 粒子ビームの当たる面積$]$が $P_{\pi/2}$ である．

**例題 4.4–2** 電流値 20 nA，運動エネルギー 15 MeV の酸素イオン $O^{4+}$ の細いビームが厚さ 500 Å の炭素膜 (密度 2.25 g/cm$^3$) に入射し，散乱された O および反跳された C が膜を透過して飛び出している．ビーム軸から 30° 方向に置かれた面積 0.25 cm$^2$ の粒子検出器で計数される O および C は毎秒いくつか．ただし炭素膜上のビーム照射スポットと粒子検出器の距離は 10 cm とし，検出器の計数効率は 100%とする．

(55)，(57) に $M_1 = 16, M_2 = 12, Z_1 = 8, Z_2 = 6, e^2/4\pi\varepsilon_0 = 14.4\,[\mathrm{eV}\cdot\text{Å}], \theta_1 = \varphi = 30^\circ$ を代入すると

$$\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega_1 = 2.96\times 10^{-8}\,\text{Å}^2 \quad \text{および} \quad \mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega_2 = 4.45\times 10^{-9}\,\text{Å}^2$$

となる．さらに

- 単位時間当たりの入射粒子数 $J_{\mathrm{in}} = 20\times 10^{-9}\,\mathrm{C\cdot s^{-1}}/(4\times 1.60\times 10^{-19}\,\mathrm{C}) = 3.13\times 10^{10}\,\mathrm{s^{-1}}$
- 炭素膜中の原子数密度は $2.25\,\mathrm{g\cdot cm^{-3}}\times 6.02\times 10^{23}\,\mathrm{mol^{-1}}/(12\,\mathrm{g\cdot mol^{-1}}) = 1.13\times 10^{23}\,\mathrm{cm^{-3}}$．これより炭素膜の単位面積あたりの原子数 $N_{\mathrm{s}} = 1.13\times 10^{23}\,\mathrm{cm^{-3}}\times 500\times 10^{-8}\,\mathrm{cm} = 5.65\times 10^{17}\,\mathrm{cm^{-2}}$．
- 検出器の立体角 $\Delta\Omega = 0.25/10^2 = 2.5\times 10^{-3}$

を用いると，散乱された O および反跳された C の計数率 $\Lambda_{\mathrm{O}}, \Lambda_{\mathrm{C}}$ はそれぞれ

$$\begin{aligned}\Lambda_{\mathrm{O}} &= J_{\mathrm{in}}\,(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega_1)\,N_{\mathrm{s}}\,\Delta\Omega = 130\,\text{カウント/秒}\,,\\ \Lambda_{\mathrm{C}} &= J_{\mathrm{in}}\,(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega_2)\,N_{\mathrm{s}}\,\Delta\Omega = 20\,\text{カウント/秒}\end{aligned}$$

のように求められる．

**問題 4.4–1** この節 (§4.4) の最初に述べたラザフォード散乱断面積の適用条件を，電磁気学のガウスの法則を用いて説明せよ．

### 4.5　原子核半径とクーロン障壁

質量数 $A$ の原子核の半径 $R_n$ は，高エネルギー電子の弾性散乱データあるいは $\mu$ 中間子原子の分光データに基づいて

$$R_n = 1.25 \times 10^{-5} A^{1/3}\,(\text{Å}) \tag{61}$$

と表される [3]．$A^{1/3}$ の依存性は原子核の密度が核種によらず一定であることを意味する．

加速イオンが原子と衝突する際，最近接距離が両者の原子核半径の和程度かそれ以下になる条件では，クーロン反発力に加えて核力 (引力) が働くため，微分散乱断面積はラザフォード公式では表されなくなる．このような条件では，§1 で扱った弾性衝突以外に核励起，核反応が起きうる．2 つの原子核 “1”, “2” が触れ合う距離でのクーロン斥力によるポテンシャル障壁

$$\mathscr{U}_n = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0\,(R_{n1} + R_{n2})} \tag{62}$$

をクーロン障壁 (Coulomb barrier) と呼び，原子衝突における核力の関与についての大まかな判定条件を与える．

(61) によれば，例えば He および Si の核半径はそれぞれ $1.98 \times 10^{-5}$, $3.80 \times 10^{-5}$ Å であり，したがって (62) より $\mathscr{U}_n = 6.98\,\text{MeV}$ になる．加速された He イオンが Si に衝突する場合，この 6.98 MeV は図 3(b) に示す標的静止系における入射 He (換算質量数 $[1/4 + 1/28]^{-1} = 3.5$) の運動エネルギーであることに注意したい.[6] 実験室系での入射 He (質量数 4) の運動エネルギーは $E_{in} = 6.98 \times (4/3.5) = 7.97\,\text{MeV}$ になる．逆に加速された Si イオンが He に衝突する場合は $E_{in} = 6.98 \times (28/3.5) = 55.8\,\text{MeV}$ になる．同様に，H→C, He→H, O→Si 等に対応する $E_{in}$ の値はそれぞれ 2.28, 4.45, 36.5 MeV などと求められる．$E_{in}$ は核力相互作用が起きるための閾エネルギーの概算値とみなせる．加速器施設における放射線管理などでは，$E_{in}$ は核励起，核反応による放射線発生の目安になる．

**[核弾性衝突]** クーロン障壁を超えるような原子 (イオン）の弾性衝突では，散乱あるいは反跳の断面積はクーロン力よりも核力の寄与が顕著であるため核弾性衝突 (nuclear elastic collision)，核弾性散乱 (nuclear elastic scattering) 等の表現が用いられる．核弾性衝突では，180° 近傍での散乱断面積あるいは 0° 近傍での反跳断面積がラザフォード散乱の場合の $10 \sim 10^2$ 倍になることがあり，これを利用した固体中の軽元素の非破壊分析が行われている [4, 5].

[6] 図 3(c) の重心系における He, Si の運動エネルギーでもある．

# 5　量子力学による散乱の扱い

荷電粒子線の散乱現象には波動としての性質を反映した回折・干渉効果が存在する．通常これらの効果は加速イオンビームでは極めて小さく実際上は問題にならないが，電子ビームではいわば日常的な事柄であり，電子顕微鏡による結晶回折像の観測はその一例である．このような量子ビームに対して，古典力学はあくまで量子力学の近似であり，散乱現象に粒子の波動としての振る舞いが関わる場合には古典近似ではなく量子力学による議論が必要である．量子力学による粒子線散乱の扱いについては多くの教科書があるので [6, 7]，ここでは的を絞り「§3，§4 では剛体球散乱やクーロン散乱を古典力学で扱ったが，その結論は正しいだろうか」という設問に答える観点から概略を述べることにする．

## 5.1　中心力場による球状波の生成

量子力学の扱いでは，図 9 に示すように入射粒子を平面波，散乱粒子を球状波で表す．これらの波は Schrödinger 方程式を満たす確率波であるが，その振る舞いは例えば水波や音波の反射・干渉・回折，あるいは光の散乱 (振動電子からの双極子放射) と類似のイメージで捉えることができる．

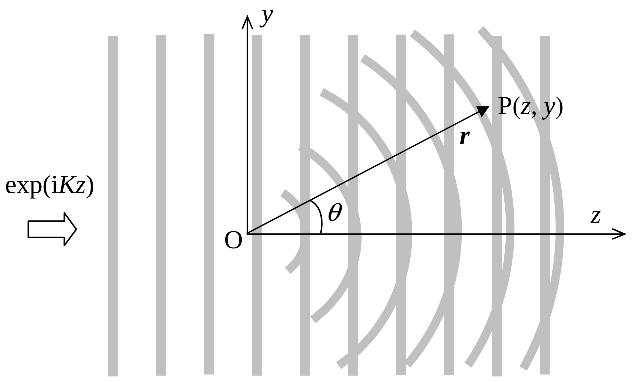


図 9: 量子力学による粒子ビーム散乱の概念図 [中心力場 (中心 O) による散乱]

§1.1 に述べたように，量子力学による扱いにおいても重心系で散乱を議論することができる．すなわち中心力場に対する入射粒子の相対運動を考え，図 9 のように座標をとる．散乱は $z$ 軸に関して軸対称であるから，散乱波は方位角 $\varphi$ に依存しない．入射波の波数ベクトルは換算質量を用いて $K = M_\mathrm{r}v/\hbar$ と書けるので，$z$ 方向への入射波は $\exp(\mathrm{i}Kz)$ となる．散乱によって生じた散乱波は遠方 ($r \to \infty$) では $f(\theta)\exp(\mathrm{i}Kr)/r$ の形の球状波になると考えられる．ここで，$f(\theta)$ は球状波の (確率) 振幅の $\theta$ 依存性を表す項であり，$f(\theta)$ が $\theta$ に依存しない一定値であれば，散乱は等方的 (球対象) である．

すでに §3 で見たように古典力学では剛体球による微分散乱断面積の計算は簡単な幾何学であった．クーロン散乱の場合には，剛体球散乱ほどではないにしても，微分散乱断面積の解析的な表現を比較的簡単に求めることができた．しかし，量子力学ではそれらの扱いの難易度は逆転する．すなわち，剛体球散乱では微分散乱断面積および全断面積を解析的に求めることはできない．わずかに，入射粒子の低速および高速極限における断面積の近似的な振る舞いを解析的に表すことができるのみである．他方，クーロン散乱に対しては，物理数学の既存の知識により，数学的にも厳密でかつ見通しのよい結果が得られる．このような事情があるので，まずクーロン散乱から始めることにする．

## 5.2 クーロン場による散乱

クーロン散乱における全波動関数 (入射波＋散乱波)Φ は Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2M_\mathrm{r}}\nabla^2\Phi + \frac{Z_1Z_2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Phi = \mathscr{E}\Phi \tag{63}$$

を満たさなければならない．ここで $\mathscr{E} = \hbar^2K^2/2M_\mathrm{r}$ は重心系における運動エネルギーである．もちろん，図 9 の極座標において $\Phi$ は $r$ と $\theta$ の関数であり，$z$ 軸に関して回転対称であるため方位角 $\varphi$ には依存しない．極座標 $(r,\theta,\varphi)$ から放物線座標 $(\xi,\eta,\varphi)$ への変換式

$$\begin{aligned}\xi &= r - z = r(1-\cos\theta)\,,\\ \eta &= r + z = r(1+\cos\theta)\,,\\ \varphi &= \varphi\end{aligned}$$

により (63) を書き換えると

$$-\frac{\hbar^2}{2M_\mathrm{r}}\frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi\frac{\partial\Phi}{\partial\xi}) + \frac{\partial}{\partial\eta}(\eta\frac{d\Phi}{\partial\eta})\right] + \frac{Z_1Z_2e^2}{2\pi\varepsilon_0(\xi+\eta)}\Phi = \mathscr{E}\Phi \tag{64}$$

を得る．

ここで $\Phi$ を

$$\Phi = \exp(\mathrm{i}Kz)\,\chi(r,\theta) = \exp[-\mathrm{i}K(\xi-\eta)/2]\,\chi(\xi,\eta) \tag{65}$$

と書くことにする．実際には，散乱の効果を表す $\chi$ は $\xi$ のみの関数であることが以下の考察からわかる．まず，$\Phi$ は遠方で $\Phi \sim \exp(\mathrm{i}Kr)/r$ すなわち外向きの球状波に漸近するべきであるから，(65) により $\chi$ は遠方で $\exp[\mathrm{i}K(r-z)] = \exp(\mathrm{i}K\xi)$ という項に比例して振舞うはずである．ところで，(64) したがって $\Phi$ は $\xi,\eta$ を交換しても不変であることから，もし $\chi$ が変数 $\eta$ を含むとすれば，$\chi$ は遠方で $\exp(\mathrm{i}K\eta) = \exp[\mathrm{i}K(r+z)]$ という項に比例して振舞う部分を持つことになる．(65) より，それが逆向きの入射波 $\exp(-\mathrm{i}Kz)$ に対する散乱に相当することは明らかであり，したがって $\chi$ は $\eta$ を含まない．

(65) を (64) に代入し，$\chi$ が $\xi$ のみの関数であることを考慮すると $\chi$ の満たす方程式

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}\xi^2} + (1-\mathrm{i}K\xi)\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}\xi} - \frac{\kappa K}{2}\chi = 0 \tag{66}$$

が得られる．ここで

$$\kappa = \frac{Z_1Z_2\,\mathrm{e}^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar v} \tag{67}$$

は Bohr のクーロン散乱パラメータと呼ばれる無次元数であり，ボーア速度

$$v_0 = e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar = 2.2\times10^6\,\mathrm{m/s} \tag{68}$$

を用いると

$$\kappa = 2Z_1Z_2\,\frac{v_0}{v} \tag{69}$$

と表すこともできる．さらに，(52) の最近接距離 $R_\mathrm{c}$ およびドブロイ波長 $\lambda_\mathrm{D} = h/M_\mathrm{r}v$ を用いて

$$\kappa = 2\pi R_\mathrm{c}/\lambda_\mathrm{D} \tag{70}$$

と書くこともできる.[7]

ところで，一般に $A, B$ を定数として

$$X\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}X^2}+(B-X)\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}X}-AF=0 \tag{71}$$

の解 $F$ は合流型超幾何関数 (confluent hypergeometric function) と呼ばれ，$X=0$ で物理的に意味のある解は

$$\begin{aligned} F(A,B,X) &= \sum_{j=0}^{\infty}\frac{\Gamma(A+j)\Gamma(B)X^j}{\Gamma(A)\Gamma(B+j)\Gamma(1+j)} \\ &= 1+\frac{A}{B\,1!}X+\frac{A(A+1)}{B(B+1)\,2!}X^2+\frac{A(A+1)(A+2)}{B(B+1)(B+2)\,3!}X^3+\ldots \end{aligned} \tag{72}$$

で表される．ここで，$\Gamma$ は $\mathrm{Re}\,(z)>0$ のとき

$$\Gamma(z)=\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-t}t^{z-1}\,\mathrm{d}t \tag{73}$$

により定義されるガンマ関数である．

(66) を

$$\mathrm{i}K\xi\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}(\mathrm{i}K\xi)^2}+(1-\mathrm{i}K\xi)\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}(\mathrm{i}K\xi)}-\frac{-\mathrm{i}\kappa}{2}\chi=0 \tag{74}$$

と変形し，(71) と比較すれば

$$\chi=F\left(\frac{-\mathrm{i}\kappa}{2},\,1,\,\mathrm{i}K\xi\right) \tag{75}$$

が得られる．入射ビーム強度が 1 (§2 で $I_0=1$) であるように規格化した (63) の解は

$$\begin{aligned} \Phi &= \exp\left(-\frac{\pi\kappa}{4}+\mathrm{i}Kz\right)\Gamma\left(1+\frac{\mathrm{i}\kappa}{2}\right)F\left(\frac{-\mathrm{i}\kappa}{2},\,1,\,\mathrm{i}K\xi\right) \\ &= \exp\left(-\frac{\pi\kappa}{4}+\mathrm{i}Kr\cos\theta\right)\Gamma\left(1+\frac{\mathrm{i}\kappa}{2}\right)F\left(\frac{-\mathrm{i}\kappa}{2},\,1,\,2\mathrm{i}Kr\sin^2\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned} \tag{76}$$

と表される．クーロン場から遠ざかるにつれて $\Phi$ がどのように変化するかを見てみよう．以下，数学の詳細に立ち入らなくても物理の理解は可能なので結果のみを記すが，$Kr\gg 1$，すなわち入射粒子のドブロイ波長 $(2\pi/K)$ に比べて $r$ が十分大きいときの $\Phi$ の漸近形は

$$\begin{aligned} \Phi = &\left(1-\frac{\mathrm{i}\kappa^2}{8Kr\sin^2\frac{\theta}{2}}\right)\exp\left(\mathrm{i}\left[Kr\cos\theta+\frac{\kappa}{2}\ln\left(2Kr\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\right]\right) \\ &+\frac{\kappa}{4Kr\sin^2\frac{\theta}{2}}\exp\left(\mathrm{i}\left[Kr-\frac{\kappa}{2}\ln\left(2Kr\sin^2\frac{\theta}{2}\right)+\pi+2\eta_0\right]\right) \end{aligned} \tag{77}$$

であることが示される．ただし，$\exp(2\mathrm{i}\eta_0)=\Gamma(1+\mathrm{i}\kappa/2)/\Gamma(1-\mathrm{i}\kappa/2)$ である．

(77) の第 1 項はクーロン場で歪んだ透過波，第 2 項は球状波に近づきつつある散乱波とみなせる．なお，$Kr\to\infty$ としてしまうと $\Phi=\exp(\mathrm{i}Kr\cos\theta)=\exp(\mathrm{i}Kz)$，すなわち第 1 項の入射 (透過) 波のみとなって散乱波は無視されてしまうことに注意．散乱波が遠方においても球状波になりき

[7] クーロン散乱パラメータとして $\kappa/2$ が用いられることもある．

れないのは長距離にまで影響が及ぶクーロン場の特徴である．しかしながら，遠方で $Kr \gg \ln Kr$ であるから (77) は

$$\Phi \sim \exp(\mathrm{i}Kz) + f(\theta)\frac{\exp(\mathrm{i}Kr)}{r} \tag{78}$$

の形になっている.[8] ここで,

$$f(\theta) = \frac{Z_1 Z_2 \mathrm{e}^2}{8\pi\varepsilon_0 M_\mathrm{r} v^2}\exp\left(\mathrm{i}\,[-\frac{\kappa}{2}\ln(2Kr\sin^2\frac{\theta}{2}) + \pi + 2\eta_0]\right)\mathrm{cosec}^2\,\frac{\theta}{2} \tag{79}$$

であるから,

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left(\frac{Z_1 Z_2 \mathrm{e}^2}{8\pi\varepsilon_0 M_\mathrm{r} v^2}\right)^2 \mathrm{cosec}^4\,\frac{\theta}{2} \tag{80}$$

となる. すなわち，$\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ の表現ではプランク定数を含むパラメータ $\kappa$ は消えてしまい，古典力学による結果 (54) と一致している．このように，長距離にわたるクーロン場は，遠方における波動関数の位相には影響を及ぼすが，振幅には及ぼさない.

## 5.3　古典力学近似との比較

§5.1 により，§4 で得た古典近似による断面積は正しい結果を与えることがわかった．付け加えれば，クーロン散乱に関しては，量子力学のボルン (Born) 近似を用いても同じ結果が得られる (問題 5–2)．このような事情はクーロン散乱に特有なものである.

対照的に，量子力学で計算された剛体球の微分散乱断面積は限定された条件下でしか古典力学による計算結果と一致しない．実際，入射粒子のドブロイ波長を $\lambda_\mathrm{D}$ で表すとき，(i) 粒子が高速度すなわち $\lambda_\mathrm{D} \ll R_0$ で，かつ (ii) 前方 (頂角 $\sim \lambda_\mathrm{D}/R_0$ の円錐内方向) 以外の散乱角である場合に限り，微分散乱断面積は古典力学による計算結果に一致する.[9] この場合，全断面積は古典力学的断面積 (= 幾何学的断面積) のほぼ 2 倍になる．古典力学的断面積との差は，入射波と散乱波の前方における干渉効果によるものであり，前方に散乱された粒子は回折効果のために散乱角が不確定である (入射波と散乱波が区別不能であるため微分散乱断面積の意味が失われる) ことに起因している．このような前方散乱については古典力学との比較自体があまり意味を持たない.

**問題 5–1** 一般に散乱後の Schrödinger 波が

$$\psi_\mathrm{s} = e^{\mathrm{i}Kz} + f(\theta)\frac{e^{\mathrm{i}(Kr+\alpha_0)}}{r}$$

と書けるとき，微分散乱断面積は $|f(\theta)|^2$ で与えられることを示せ．ただし，$\alpha_0$ は実定数である.
**問題 5–2** 弾性散乱のボルン近似の式

$$f(\theta) = -\frac{M_\mathrm{r}}{2\pi\hbar^2}\int \exp(-\mathrm{i}K'r)\,V(r)\,\exp(\mathrm{i}Kr)\,\mathrm{d}^3 r \tag{81}$$

ただし, $|K| = |K'|$, $\mathrm{d}^3 r = \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$，をクーロン散乱に適用して微分散乱断面積を求めよ．その際，$V(r) = Z_1 Z_2 \mathrm{e}^2 \exp(-r/\alpha)/4\pi\varepsilon_0 r$ として $f(\theta)$ を求め，その後に $\alpha \to \infty$ とせよ.

[8](77) の第 1, 2 項それぞれの遠方における漸近形を個別に求めて加えれば (78) の形になるのであって，この対応は物理的には意味があるが，(78) の形が数学的に導かれた訳ではない.

[9]Mott & Massey のテキストに $\lambda_\mathrm{D}/R_0 \simeq 0.3\,(KL = 20)$ の場合の計算例が示されている [6].

# 6　原子の静電ポテンシャル

原子の周囲の静電場は，原子核による正のクーロン場と軌道電子による負のクーロン場の重ね合わせによる遮へいクーロン場である．水素原子から考察を進め，トーマス・フェルミ原子モデルの導入により一般の原子へと議論を展開しよう．

## 6.1　水素原子と水素様イオン

基底状態の水素原子を考える．陽子の質量を $M_\mathrm{p}$，電子の静止質量を $m_\mathrm{e}$ とする．$m_\mathrm{e}$ と換算質量 $m_\mathrm{r} = M_\mathrm{p} m_\mathrm{e}/(M_\mathrm{p} + m_\mathrm{e})$ の違いはわずかであってほとんどの場合問題にならないので，ここでは $m_\mathrm{r} = m_\mathrm{e}$ として扱うことにする．

原子核からの距離を $r$ とすると，1s 電子の規格化波動関数 $\psi_{1\mathrm{s}}$ はボーア半径

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_\mathrm{e}e^2} = 0.529\,\text{Å} \tag{82}$$

を用いて

$$\psi_{1\mathrm{s}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \tag{83}$$

で表される．したがって，電子密度 $\rho(r)$ は

$$\rho(r) = |\psi_{1\mathrm{s}}|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \tag{84}$$

と書ける．

$$\int_0^\infty \rho(r)\,\mathrm{d}^3 r = \int_0^\infty \rho(r)\,4\pi r^2\,\mathrm{d}r = 1 \tag{85}$$

であるから，パラメータ $r$ に関する電子の分布を実質的に表すのは $\rho(r)$ よりもむしろ $4\pi r^2\rho(r)$ であることに注意.

次に，静電ポテンシャル $V_{1\mathrm{s}}(r)$ を求める．$\rho(r)$ と $V_{1\mathrm{s}}(r)$ は Poisson 方程式

$$\nabla^2 V_{1\mathrm{s}}(r) = -\frac{-e\rho(r)}{\varepsilon_0} \tag{86}$$

で関係付けられている．(84)，(86) より $V_{1\mathrm{s}}(r)$ は

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2\left[rV_{1\mathrm{s}}(r)\right]}{\mathrm{d}r^2} = \frac{e}{\pi a_0^3\varepsilon_0}\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \tag{87}$$

を解けば求まる．$V_{1\mathrm{s}}(r)$ の一般解は，2 個の積分定数 $C$，$V_\infty$ を用いて

$$V_{1\mathrm{s}}(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a_0}\left(1 + \frac{a_0}{r}\right)\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) + \frac{C}{r} + V_\infty \tag{88}$$

と書ける．通常は $r = \infty$ で $V_{1\mathrm{s}} = 0$ にとるので，$V_\infty = 0$ である．$C$ は境界条件を考慮することから決まる．まず (88) は $r \gg a_0$ のような遠方では $V_{1\mathrm{s}}(r) \simeq C/r$ であるが，そこから見た 1s 電子の分布 (84) は原子核とほぼ一体であり，したがって水素原子による正負のクーロンポテンシャルは打ち消しあっていなければならない．このことから $C = 0$ が結論される．

$V_{1s}(r)$ を $H^+$ によるクーロンポテンシャル $V_+(r) = e/(4\pi\varepsilon_0 r)$ と比較すれば，核電荷 ($H^+$) が 1s 電子によって電気的に遮へいされる状況が分かる．これらのポテンシャルの比

$$f_{1s} = \frac{V_{1s}(r)}{V_+(r)} = (1+\frac{r}{a_0})\exp(-\frac{2r}{a_0}) \tag{89}$$

を図 10 に示す．$f_{1s}$ は遮へい関数とも呼ばれ，遮へいの程度 (1 のとき遮へいなし，0 のとき完全な遮へい) を表す．$r = a_0$ のとき $f_{1s} \simeq 0.3$ であり，$a_0$ は遮へいが有効になる距離の粗い目安といえる．

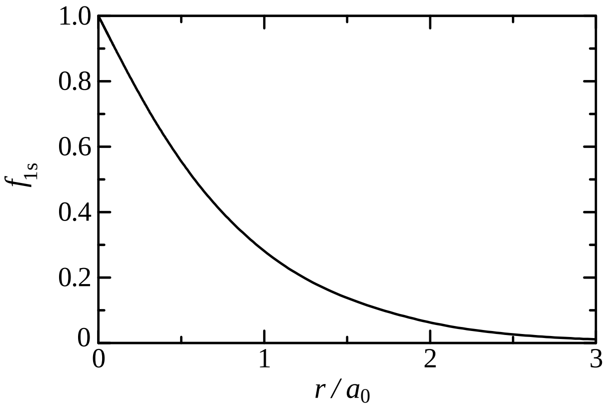


図 10: 水素原子とプロトンの静電ポテンシャル比 $f_{1s}$．横軸はボーア半径 $a_0$ を単位とした H 原子核からの距離

$He^+$ のように電子を 1 個だけ持つイオンは水素様イオン (hidrogen-like ion) あるいは水素様原子 (hidrogen-like atom) と呼ばれる．電子が基底状態にあるときの水素様イオンの静電ポテンシャルは (88) の $a_0$ と $C$ の値を変更するだけで得られることを，$He^+$ の場合について示しておく．$He^+$ は核電荷が $+2e$ であるから (82) で $e^2$ を $2e^2$ に置き換えればよい．すなわち (88) において $a_0$ を $a_0/2$ に置き換えればよい．また，$He^+$ では電荷の総和は $+e$ であるから境界条件は "$r \gg a_0$ において $V_{1s}(r) \simeq e/4\pi\varepsilon_0 r$" であり，したがって $C = e/4\pi\varepsilon_0$ である．

**問題 6.1–1** (85) を確かめよ．
**問題 6.1–2** (87) を解いて (88) を求めよ．
**問題 6.1–3** 電子の換算質量 $m_r$ を用いた厳密な扱いでは (88) はどのような修正を受けるか．
**問題 6.1–4** 水素原子および $He^+$ の静電ポテンシャルは $r \ll a_0$ においてそれぞれ H および He 原子核のクーロンポテンシャルに一致することを確かめよ．これを境界条件として $C$ を決めても良い．もちろん，この条件は $r \ll a_0$ で $4\pi r^2 \rho(r) \simeq 0$ であることに対応する．
**問題 6.1–5** 水素様イオン $Li^{2+}$，$B^{4+}$ が基底状態にあるときの静電ポテンシャルをそれぞれ求めよ．

### 6.2 原子のトーマス・フェルミ (Thomas–Fermi) モデル

#### 6.2.1 原子ポテンシャル

一般に原子 (あるいはイオン) の核からの距離 $r$ における電子密度 $\rho(r)$ は，原子内の各電子の動径 $r$ についての規格化波動関数 $r\mathscr{R}_{n,\ell}(r)$ [$(n,\ell)$ は量子数] を用いて

$$\rho(r) = \sum_{n,l} N_{n,\ell}\,|\,r\mathscr{R}_{n,\ell}(r)|^2 \tag{90}$$

と書ける．ここで $N_{n,\ell}$ は量子状態 $(n,\ell)$ を占める電子数である．$r\mathscr{R}_{n,\ell}(r)$ は Hartree-Fock 法により計算された数値を用いることができる．一例として，Ar(Z = 18) の結果を図 11 に示す．

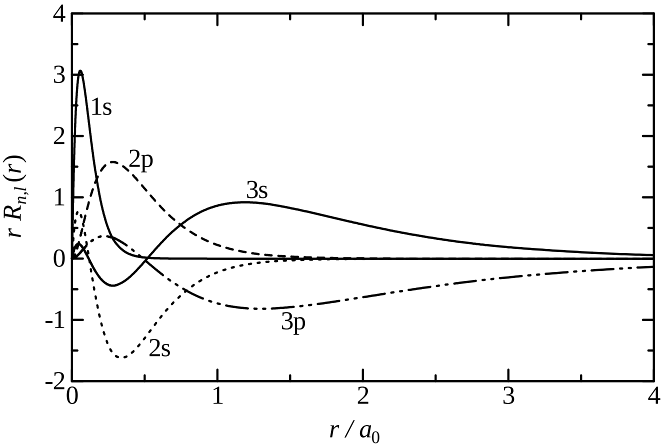


図 11: Ar の動径方向波動関数．横軸の単位は $a_0$(ボーア半径) [8]

(90) の $\rho(r)$ を使って §6.1 に示した手順により静電ポテンシャルを求めることは原理上は可能である．しかしながら，(88) のような解析的な形が得られることは稀であり，ほとんどの場合は数値的にしか結果が得られない．もし，原子番号 $Z$ の原子の静電ポテンシャルと電子分布を十分良い近似で解析的に表現できるモデルがあれば，原子あるいは物質による荷電粒子や光の散乱について一般的な議論を展開できるであろう．原子の Thomas–Fermi モデルはこの要請に応じたものと言える．

求めるべき原子内ポテンシャルを $U(r)$ とする．原子内電子の運動量を $p$ とすれば全エネルギーは

$$E_\mathrm{e} = \frac{p^2}{2m_\mathrm{e}} - eU(r) \tag{91}$$

である．電子が原子外に逃げないためには $E_\mathrm{e} < 0$ , すなわち

$$p \le p_\mathrm{m} = \sqrt{2m_\mathrm{e}\,eU(r)} \tag{92}$$

の条件が必要である．原子核から $r$ の位置に微小体積 $\Delta V$ の領域を想定すると，この中には最大何個の電子を詰め込むことができるだろうか．その数を $\Delta N_\mathrm{e}$ としよう．原子内の各位置 $r$ においては $p$ は $0 \le p \le p_\mathrm{m}$ の範囲の値をとりうるが，ここに自由電子をぎっしり詰め込むとすれば，$p_\mathrm{m}$ はフェルミ運動量に他ならない．この場合，位置と運動量の位相空間の体積は $(4\pi p_\mathrm{m}^3/3)\Delta V$ であ

るから，統計力学によればこの体積を $h^3$ で割った数の運動状態があり，さらに各運動状態についてスピン状態が 2 つあるので，

$$\Delta N_\mathrm{e} = \frac{4\pi[2m_\mathrm{e}\,eU(r)]^{3/2}}{3}\frac{2}{h^3}\Delta V \tag{93}$$

が得られる．

Thomas–Fermi モデルでは原子内電子を基底状態の自由電子気体，すなわち可能なエネルギー状態を低いほうからすべて占有した自由電子の集団と仮定する．そうすれば，位置 $r$ における電子密度は

$$\rho(r) = \frac{\Delta N_\mathrm{e}}{\Delta V} = \frac{8\pi e^{3/2}}{3h^3}[2m_\mathrm{e}U(r)]^{3/2} \tag{94}$$

と書ける．このように原子内電子を自由電子とみなす扱いは，個々の原子内電子の空間的な広がりすなわちドブロイ波長が原子の大きさに比べて小さい場合に意味を持つ．これは平均的に高い束縛エネルギー (したがって短いドブロイ波長) を持つ重原子にあてはまる．

電子密度とポテンシャルはポアソン方程式

$$\nabla^2 U(r) = -\frac{-e\rho(r)}{\varepsilon_0} \tag{95}$$

で関係付けられているので，(95) を $U = 0$ $(r \to \infty)$ および $U = Ze/4\pi\varepsilon_0 r$ $(r \to 0)$ を境界条件として解けば $U(r)$ が求まる．これを行うため

$$U(r) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r}\phi \tag{96}$$

とおく．$\phi$ は $r$ の関数であって，電子による核電荷の遮へい効果を表し，Thomas–Fermi 関数と呼ばれる．このとき，上述の境界条件は $\phi = 0$ $(r \to \infty)$ および $\phi = 1$ $(r \to 0)$ に置き換わる．$\nabla^2 U = r^{-1}[\mathrm{d}^2(rU)/\mathrm{d}r^2]$ を用いると (95) は

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}r^2} = \alpha\cdot\frac{\phi^{3/2}}{r^{1/2}}\,, \tag{97}$$

$$\alpha = \left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\right)^{1/2}\frac{8\pi e^{5/2}}{3h^3\varepsilon_0}(2m_\mathrm{e})^{3/2} \tag{98}$$

となる．さらに，(97) は

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}(\alpha^{2/3}r)^2} = \frac{\phi^{3/2}}{(\alpha^{2/3}r)^{1/2}} \tag{99}$$

と変形できる．ここで長さの次元を持つパラメータ $\alpha^{-2/3}$ は Thomas–Fermi スクリーニング長 (screening length)，あるいは Thomas–Fermi 遮へい半径 (screening radius) と呼ばれ，以降は $a_1$ で表すことにする．実際，$a_1$ は

$$a_1 = \left(\frac{9\pi^2}{128}\right)^{1/3}\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_\mathrm{e}e^2}Z^{-1/3} = 0.8853\,a_0 Z^{-1/3} \tag{100}$$

と書かれる．$a_1$ の値は §6.3.1 の Firsov スクリーニング長 $a_2$, §6.3.2 の ZBL スクリーニング長 $a_3$ とともに図 15 (原子番号 $Z$ は $Z_2$ と表示) に示されている．

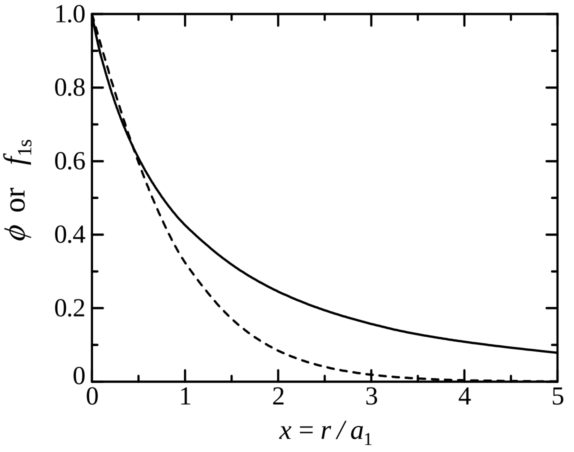


図 12: Thomas-Fermi 遮へい関数 $\phi$(実線)，および水素の正確な遮へい関数 $f_{1s}$(破線).

(99) で $r$ の代わりに $\alpha^{2/3}r = r/a_1 = x$ を変数にとれば $Z$ に依存しない扱いができる．差分法により (99) を数値的に解いて求められた $\phi(x)$ を図 12 に実線で示す．$x = 1$ で $\phi \sim 0.5$ であり，したがって $a_1$ は遮へい距離の粗い目安として用いられる．先に述べたように，Thomas-Fermi モデルは重原子にはあてはまるが，軽原子ではどの程度不適切なのだろうか．これを確かめるために，水素原子の正確なポテンシャル (§6.1) との比較は興味深い．(100) より $Z = 1$ (水素原子) の場合は $a_1 = 0.8853a_0$ であり，図 12 には $x = r/a_1 = r/0.8853a_0$ を横軸として (89) を破線で表してある．$\phi$ を $f_{1s}$ と比較すると，遠方 (特に $r \gtrsim 2a_1$) において値が過大であり，遮へい効果を実際よりも弱く見積もっていることがわかる．重原子でも事情は同様であることが知られており，§6.3 に述べるように遠方での遮へい効果をより強く修正したポテンシャルが利用されることが多い．

### 6.2.2 電子の密度分布

次に Thomas–Fermi モデルにより電子密度を求める．(94)，(96) より

$$\rho(r) = \frac{Z}{4\pi}\left(\frac{\phi}{a_1 r}\right)^{3/2}, \quad \text{あるいは} \quad \rho(x) = \frac{Z}{4\pi a_1^3}\left(\frac{\phi}{x}\right)^{3/2} \tag{101}$$

と書ける．$r$ の代わりに $x$ を変数として電子密度を表せば

$$4\pi x^2 \rho(x) = \frac{Z}{a_1^3} x^{1/2} \phi^{3/2} \tag{102}$$

になる．あるいは新たに規格化電子密度 $\rho^*(x) = (a_1^3/Z)\rho(x)$ を導入すれば

$$4\pi x^2 \rho^*(x) = x^{1/2} \phi^{3/2} \tag{103}$$

と表すことができる．(103) は電子密度を $Z$ に依存しない形式で書いたものであり，そのグラフを図 13 に示す．このように，Thomas-Fermi モデルによる電子密度すなわち原子内電子の分布は $a_1$ に比例して $r$ 方向へ広がる，言い換えれば，$Z^{-1/3}$ に比例して $r$ 方向に収縮する，というスケーリング則に従うことがわかる (図 14 の Ar と Ag の例参照).

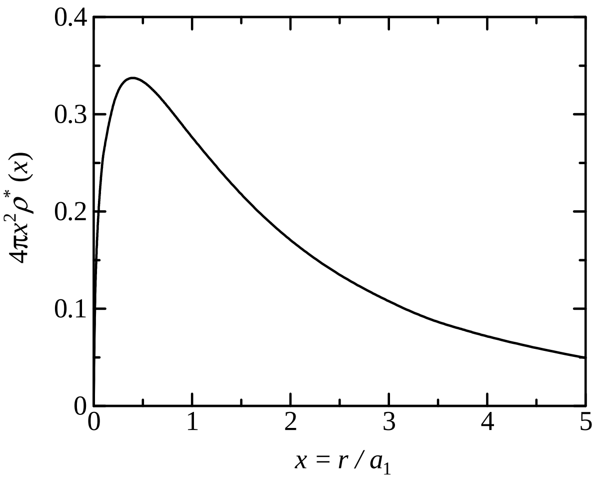


図 13: Thomas–Fermi モデルによる電子密度 (103)

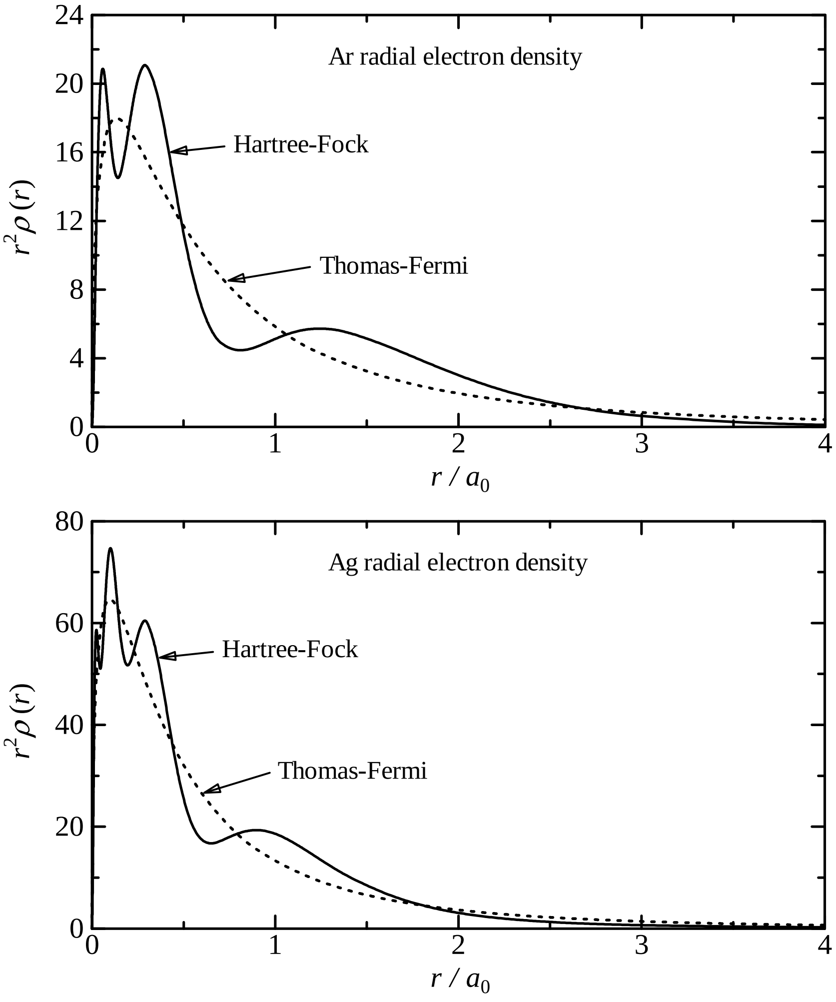


図 14: Hartree–Fock 法 [8] および Thomas–Fermi モデルによる Ar，Ag の電子密度．横軸の単位は $a_0$ (ボーア半径) で，面積がそれぞれ 18, 47(Ar，Ag の電子数) になるように規格化されている．

量子力学的な数値計算に基づく Hartree–Fock 法および Thomas–Fermi モデルによる電子密度の比較を Ar，Ag の場合について図 14 に示す．Hartree–Fock 法による電子密度 (実線) には，$r$ の小さいほうから順に K, L, M ... のそれぞれの殻に対応するピークが見られる．Thomas–Fermi モデルでは原子の殻構造が無視されているため，対応するピークは現れない (鎖線)．この違いは軽原子では顕著に見えるが，重い原子になるにつれて殻構造が平均化されてくると Thomas–Fermi モデルが良い近似になることがわかる．

**問題 6.2–1** (103) の右辺を $0 \le x < \infty$ で積分すると 1 になることを示せ．すなわち $\rho^*(x)$ は規格化された電子密度を表している．

### 6.2.3 電子の運動量分布

Thomas–Fermi モデルでは，電子密度以外にも原子を特徴づける種々の物理量，例えば電子の運動量分布あるいは全運動エネルギーの期待値などを $Z$ に依存しない規格化形式で表すことができ，したがって電子密度と同様にそれらの $Z$ 依存性は簡単なスケーリング則に従う．ここでは Thomas–Fermi 原子中に束縛された電子の運動量 (あるいは速度) の分布を求めよう．それには §6.2.1 の議論において，位置と運動量の役割りを入れ換えれば良い．まず，運動量 $p$ を持つ粒子に対して可能な $r$ の最大値 $r_\mathrm{m}$ は

$$p = \sqrt{2m_\mathrm{e}eU(r_\mathrm{m})} \tag{104}$$

である．したがって，運動量空間で原点から $p$ の位置にある微小体積 $\Delta V^*(= \mathrm{d}^3p)$ の中に詰め込まれている電子数 $\Delta N_\mathrm{e}^*$ は [(93) に相当して]

$$\Delta N_\mathrm{e}^* = \frac{4\pi r_\mathrm{m}^3}{3}\frac{2}{h^3}\Delta V^* \tag{105}$$

と表される．(96) により，(104) は

$$p = \sqrt{2m_\mathrm{e}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_\mathrm{m}}\phi} = \sqrt{\frac{m_\mathrm{e}Ze^2}{2\pi\varepsilon_0 x_\mathrm{m} a_1}\phi} \tag{106}$$

と書ける．ここで $x_\mathrm{m} = r_\mathrm{m}/a_1$ であり，$\phi$ は $x_\mathrm{m}$ の関数であることに注意．(100) より，$a_1 \propto Z^{-1/3}$ であるから，(106) は

$$\frac{p}{Z^{2/3}} = (x_\mathrm{m}\,\text{の関数}) \tag{107}$$

の形になることがわかる．(107) を $x_\mathrm{m}$ について解き，

$$x_\mathrm{m} = \hat{f}(p/Z^{2/3}) \tag{108}$$

と書くことにすれは，(105) より，電子の運動量分布として

$$\frac{\mathrm{d}N_\mathrm{e}^*}{\mathrm{d}V^*} = \frac{8\pi a_1^3\,[\hat{f}(p/Z^{2/3})]^3}{3h^3} \tag{109}$$

が得られる．

(109) において，運動量として $p$ のかわりに $P = p/Z^{2/3}$ を導入し，$P$ 空間における体積素 $\mathrm{d}\mathscr{V}^*(= \mathrm{d}^3P) = \mathrm{d}V^*/Z^2$ を用いれば，$P$ を変数として表現した運動量分布

$$\frac{\mathrm{d}n_\mathrm{e}^*}{\mathrm{d}\mathscr{V}^*} = \frac{8\pi\,[\hat{f}(P)]^3}{3h^3} \tag{110}$$

となる．ここで $n_\mathrm{e}^* = N_\mathrm{e}^*/a_1^3Z^2$ である．$a_1^3Z^2 \propto Z$ であるから，(110) は電子 1 個あたりに規格化した運動量分布に相当していて，原子の種類 (Z) に依らない表現になっている．このことから，(110) は，Thomas–Fermi 原子内の運動量分布あるいは速度分布が $Z^{2/3}$ に比例して $p$ 軸方向 ($p$ 空間での径方向) に拡がることを意味する．例えば，全電子の平均速度 $V_\mathrm{av}$ は (68) のボーア速度を用いて

$$V_\mathrm{av} = AZ^{2/3}v_0\,, \quad A \simeq 0.7 \tag{111}$$

と表される (Coulson, 1950).

**問題 6.2–2** Thomas–Fermi 原子内の 1 電子あたりの平均運動エネルギーは $Z$ にどのように依存するか (答: $Z^{4/3}$ に比例).

## 6.3 原子衝突における相互作用ポテンシャル

本節では，∼keV/u 以上のエネルギー領域におけるイオン・原子の相互作用を扱う際によく利用される，２つの代表的なポテンシャルについて述べる．

### 6.3.1 モリエールポテンシャル

Thomas–Fermi ポテンシャルは，原子による電子あるいはプロトンなどの点電荷の散乱を扱う場合の相互作用ポテンシャルとして妥当な近似である．しかし原子の遠方での電子分布に敏感な現象に用いる際は若干の注意が必要である．実際，図 14 に見られるように，Thomas–Fermi モデルは遠方での電子密度が過大，つまり核電荷の軌道電子による遮へい効果を過小に見積もる傾向がある．

そこで，図 12 の Thomas–Fermi ポテンシャルの遮へい関数 $\phi(x)$ を

$$\phi_\mathrm{m}(x) = 0.35\,\mathrm{e}^{-0.3x} + 0.55\,\mathrm{e}^{-1.2x} + 0.1\,\mathrm{e}^{-6x} \tag{112}$$

と近似表現したもの，すなわち

$$U(r) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r}\,\phi_\mathrm{m}(r/a_1) \tag{113}$$

をモリエールポテンシャル (Molière potential) と呼ぶ．この近似では，上記の Thomas–Fermi モデルの欠点 (遠方での遮へい効果が弱い) が改善されており，解析的な表現のために扱いが容易なこともあって広範囲に利用されてきた．

原子との衝突相手が原子あるいは束縛電子を持つイオンであって点電荷と見なせないときはどのような相互作用ポテンシャルを使えばよいのだろうか．Firsov は理論計算に基づいて，双方の粒子の原子番号 $Z_1, Z_2$ を用いるポテンシャルの近似表現を検討し，Thomas-Fermi スクリーニング長を単に (100) の $a_1$ から

$$a_2 = 0.8853\,a_0\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{-2/3} \tag{114}$$

に置き換えればよいことを見出した (Firsov スクリーニング長).[10] 実際，固体内に打ち込まれた重イオンと固体内原子との相互作用を扱うのに，$x = r/a_2$ と置いたモリエールポテンシャルが利用される．

### 6.3.2　ZBL ポテンシャル

Ziegler, Biersack, Littmark は，スクリーニング長を

$$a_3 = 0.8853 a_0 \left(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}\right)^{-1} \tag{115}$$

と表し (ZBL スクリーニング長)，$x = r/a_3$ を用いて遮へい関数を

$$\phi_{\mathrm{ZBL}}(x) = 0.1818\,\mathrm{e}^{-3.2x} + 0.5099\,\mathrm{e}^{-0.9423x} + 0.2802\,\mathrm{e}^{-0.4029x} + 0.02817\,\mathrm{e}^{-0.2016x} \tag{116}$$

で与えることによって，モリエールポテンシャルよりも広範囲に利用できるポテンシャルを提案した [9]．これを ZBL ポテンシャルと呼ぶ．現在，ZBL ポテンシャルは実験データとの整合性という点で最も良好なポテンシャルといえる．こうした理由から，最近のイオンビーム関連の計算コードあるいは数値計算では ZBL ポテンシャルが利用されることが多い [10].

He ($Z_1 = 2$) および O ($Z_1 = 8$) との相互作用ポテンシャルのスクリーニング長 $a_1, a_2, a_3$ の比較を図 15 に示す．通常の原子 (原子番号約 80 以下) どうしの組み合わせでは，スクリーニング長はおよそ 0.1–0.2 Å の範囲にあることがわかる．

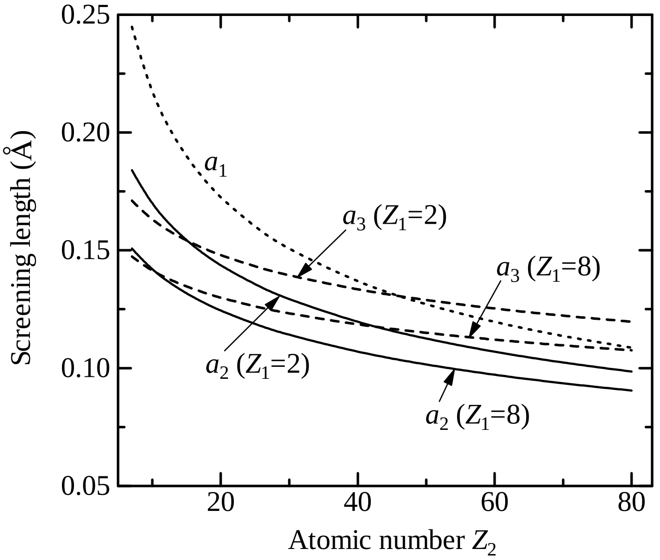


図 15: スクリーニング長 $a_1$(Thomas-Fermi), $a_2$(Firsov), $a_3$(ZBL) の比較.

[10] スクリーニング長として $0.8853 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$ が用いられることもあるが，両者の違いは実質上問題にならない程小さい.

# 7　荷電ビームとクーロンシャドー

荷電粒子の平行ビームがクーロン場で散乱される現象を考える．例えば，プロトンあるいはアルファ粒子が重原子核で散乱される場合，原子核の反発クーロン場の後方にはビームが入り込まない空間ができる．これをクーロンシャドーあるいはシャドーコーンと呼ぶ．反対に，電子，$\pi^-$ 等の散乱ではクーロン場の引力により，その後方に散乱粒子が回り込むであろう．

## 7.1　古典力学によるクーロンシャドー

ここでは非相対論の範囲で話を進めることにする．クーロンシャドーは主に小角散乱で形成されるので，(51) により，重心系での小角クーロン散乱の散乱角 $\theta$ を

$$\theta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\pi\varepsilon_0 M_\mathrm{r} v^2 b} \tag{117}$$

と表すことにする．ここで $M_\mathrm{r} = M_1 M_2/(M_1 + M_2)$ は換算質量である．小角散乱に対しては，実験室系における散乱角 $\theta_1$ と $\theta$ との関係は (27) により

$$\theta_1 = \frac{M_2\theta}{M_1 + M_2} \tag{118}$$

である．(117)，(118) より

$$\theta_1 = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\pi\varepsilon_0 M_1 v^2 b} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 E_1 b} \tag{119}$$

が得られる．$E_1 = M_1 V_1^2/2$ は入射粒子の運動エネルギーである．(119) は $M_2$ に依存せず，実質的には (117) において $M_2 \to \infty$, すなわち $M_\mathrm{r} = M_1$ とした場合に相当する．これは実験室系における小角クーロン散乱の特徴である．

図 16 に示したパラメータを用いると，クーロン場の中心 $(y = z = 0)$ から遠方における散乱粒子の位置 $y$ は

$$y = b + z\theta_1 = b + \frac{Z_1 Z_2 e^2 z}{4\pi\varepsilon_0 E_1 b} \tag{120}$$

と表される．したがって位置 $z$ におけるシャドーコーン半径 $R$ は，$b$ を変化させたときの $y$ の極小値，すなわち

$$R(z) = 2\sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2 z}{4\pi\varepsilon_0 E_1}} = \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2 z}{\pi\varepsilon_0 E_1}} \tag{121}$$

で与えられる．

図 16 に示すように，点 $\mathrm{P}(z, y)$ に対応する 2 つの値 $b = b_1, b_2$ を考慮すると，入射フラックスを 1 に規格化した場合の散乱強度 $I_+$ は $b = b_1, b_2$ における $|2\pi b\,\mathrm{d}b/2\pi y\,\mathrm{d}y|$ の和として，以下のように求められる [11, 12].

$$I_+(s) = \begin{cases} 0 & (s \le 1)\,, \\ \dfrac{1}{2}\left[(1 - s^{-2})^{1/2} + (1 - s^{-2})^{-1/2}\right] & (s > 1) \end{cases} \tag{122}$$

ただし $s$ は規格化された距離

$$s = y/R(z) \tag{123}$$

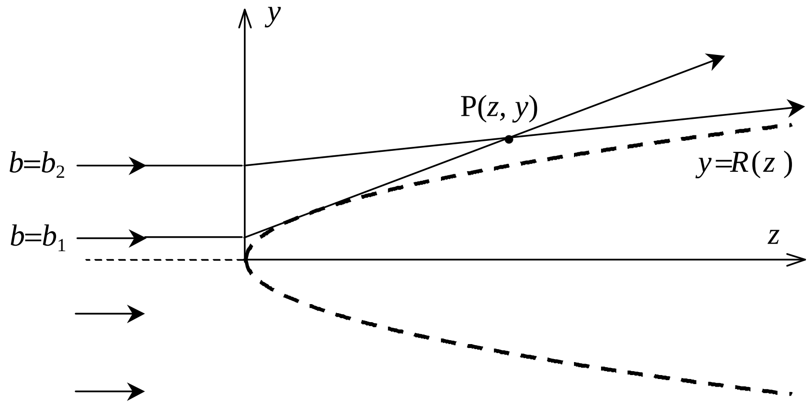


図 16: 反発力クーロン場 (中心は $z = y = 0$) の周囲における粒子軌道の概略図．破線で示されたシャドーコーンの外側の点 P($z, y$) を通る軌道は２本 ($b = b_1, b_2$) 存在する．

である．$I_+(s)$ はシャドーコーンの端 ($s = 1$) では $\infty$ になるが，$s$ が増大するにつれて 1 に近づく (図 17 参照).

**問題 7–1**　シャドーコーン周囲のフラックスの増加分，すなわち $I_+ \geq 1$ の積分値は

$$\int_1^\infty (I_+ - 1)\, 2\pi s\, \mathrm{d}s = \pi/2 \tag{124}$$

であることを示せ．シャドーコーン内の "欠損" フラックスは $\pi \times 1^2 = \pi$ であるため，フラックスの増加分は欠損部分の 50% しか補填しておらず，粒子数の保存が成り立っていない．その理由は，上記の扱いで小角散乱近似を用いているために，大角度散乱が正しく記述されていないからである．なお，遮へいクーロンポテンシャルを用いると補填の割り合いは高くなる [11].

## 7.2　古典力学による反転シャドー

電子等の負の荷電粒子ビームが原子核のクーロン場で散乱される場合には，入射粒子はクーロン場の引力により原子核の後ろ側へと曲げられるため，強度が実質的に反転したクーロンシャドーが形成される．反転シャドーの古典力学近似による扱いは，(120) において $\theta_1$ を $-\theta_1$ に置き換えれば良い．この場合の散乱強度 $I_-(s)$ は

$$I_-(s) = \frac{\left(s + \sqrt{s^2+1}\right)^2}{4s\sqrt{s^2+1}} \tag{125}$$

である．$I_-(s)$ は $s = 0$ で $\infty$ であり $s$ の増加とともに単調減少して１に近づく (Fig. 18 参照).

ところで，固体に高速イオンが入射した場合，イオンに固定された座標から見ると固体中の (準) 自由電子がイオンと同速度で入射し，クーロン引力によってイオンの後方に回り込んで電子密度が局所的に高くなる．これは §14 で述べるウェイク現象にほかならない．$I_-(s)$ は電子間の相互作用を無視した場合のウェイク (したがって電子密度の時間・空間振動が無い) の表現に相当し，特にクーロンウェイクということがある．

**問題 7–2**　§7.1 と類似の扱いにより，(125) を示せ．

### 7.3 量子力学によるクーロンシャドー

量子力学によるクーロンシャドーの扱いについて述べ，古典力学近似による計算結果，すなわち (122) がどのような条件で良い近似になるかを示そう．

小角度散乱のみを考慮すればよいので，§7.1 で述べたことを利用する．すなわち，重心系での小角クーロン散乱を量子力学で扱う際に，$M_2 \to \infty$, すなわち $M_r = M_1$ と置くことにより実験室系でのクーロンシャドーの表現を導くことにする．以下，詳細は文献 [2] にあるので，要点のみを簡略に述べる．

§5.2 において $M_r$ を $M_1$ に置き換えると，粒子の運動エネルギー $E_1$ は

$$E_1 = M_1 v^2/2 = \hbar K v/2 \tag{126}$$

と表される．このことから，(121) すなわちシャドーコーン半径は (67) のクーロンパラメータ $\kappa$ を用いて

$$R(z) = 2\sqrt{\kappa z/K} \tag{127}$$

と書くことができる．小角散乱 $(y \ll z)$ の場合には $\xi = y^2/2z$ と近似できるので，(127) により，

$$K\xi = 2\kappa\,[y/R(z)]^2 = 2\kappa s^2 \tag{128}$$

の関係が得られる．

ところで，古典論の場合の (122) に相当する規格化散乱強度 $I$ は (76) の絶対値の二乗から

$$I = |\Phi|^2 = I_0 \left| F\left(-\frac{\mathrm{i}\kappa}{2}, 1, \mathrm{i}K\xi\right)\right|^2 \tag{129}$$

のように表される．ここで，$s = 0$ すなわち $z$ 軸上における $I$ の値 $I_0$ は

$$\begin{aligned} I_0 &= \exp\left(-\frac{\pi\kappa}{2}\right)\left|\Gamma\left(1+\frac{\mathrm{i}\kappa}{2}\right)\right|^2 \\ &= \pi\kappa/\left[\exp(\pi\kappa)-1\right] \end{aligned} \tag{130}$$

である．(130) より，反発クーロン場 $(\kappa > 0)$ では $I_0 < 1$，引力クーロン場 $(\kappa < 0)$ では $I_0 > 1$ になり，古典力学との定性的な対応が成り立っている．

(129) より，シャドーコーンの形は 2 個のパラメータ $\kappa$ と $K\xi$ に依存することがわかる．(128) により，$K\xi$ は $\kappa$ と $s$ で表されるから，結局，量子力学的シャドーコーンの形を決めるのは 2 個のパラメータ $\kappa$ と $s$ である．$I$ の数値解を，古典力学の場合とともに図 17 に示す．結果が規格化距離 $s$ の関数になることは古典力学の場合と同じである．また $\kappa$ は量子効果の強さの目安を示す．実際，$\kappa$ の値が減少するにつれ，入射波と散乱波の回折・干渉効果によってシャドーコーンの内側へ粒子が入り込み，$(0 <)\kappa \ll 1$ の条件ではクーロンシャドーは消滅する．逆に $\kappa \gg 1$ では回折・干渉効果による $I$ の ($s$ 方向に関する) 振動が激しくなり，各 $s$ の位置についての振動の平均値すなわち $I$ の実効値は，古典近似で説明される．

本節での議論は $\kappa < 0$ の場合にもそのまま適用できる．この場合の $I$ の数値解を，(125) の古典力学の場合とともに図 18 に示す．実際，$|\kappa|$ の値が減少するにつれ，入射波と散乱波の回折・干渉効果が強くなり，$|\kappa| \ll 1$ の条件では反転クーロンシャドーは消滅する．逆に $|\kappa| \gg 1$ では $I$ の実効値は，古典力学近似で説明されることは $\kappa > 0$ の場合と同様である．

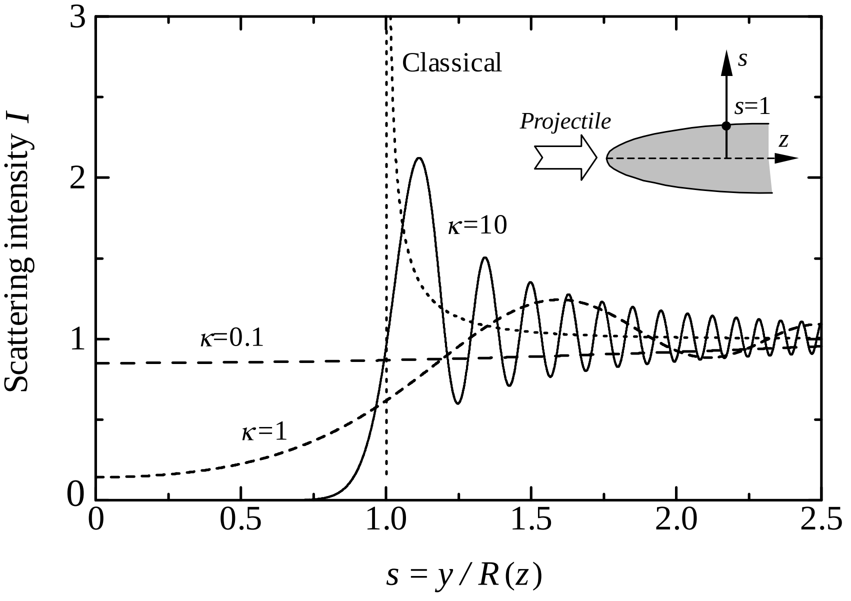


図 17: 計算で求められたクーロンシャドー（シャドーコーン）[2].

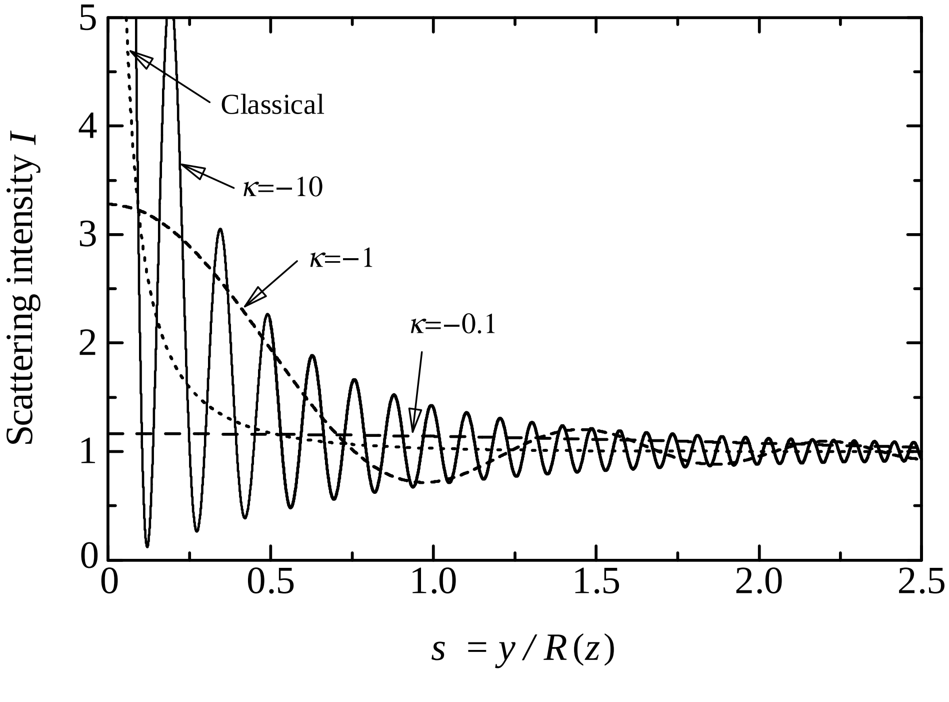


図 18: 計算による反転クーロンシャドー（クーロンウェイク）[2].

**問題 7–3** 図 17 および 18 に示されている $\kappa = \pm 0.1, \pm 1, \pm 10$ の場合の散乱強度について $s = 0$ の値が (130) から得られることを確かめよ.

### 7.4 剛体球散乱との比較

§5.3 で述べたように，剛体球による粒子の散乱では粒子が高速度の場合に古典力学近似が有効になった．しかし，§7.3 で見たように，クーロン散乱では古典力学近似が使えるのは $|\kappa| \gg 1$ すなわち低速度領域である．一見パラドックス的なこの事実は以下のように説明される．

クーロンポテンシャルの特徴として，その表式にはポテンシャルの芯のサイズを示すパラメータ，すなわちスクリーニング長 (§6.2) のように長さの次元を持つ定数が含まれていない．そこで，クーロン力の場合の芯のサイズを (52) で与えられる最近接距離 $R_c$ とみなせば，半径 $L$ の剛体球の場合の古典力学近似の条件 $\lambda_D \ll L$(§7.3) に対応する不等式は

$$\lambda_D \ll R_c \tag{131}$$

である．ここで $\lambda_D \propto v^{-1}$, $R_c \propto v^{-2}$ であるから，(131) が成り立つのは低速領域であり，剛体球の場合とは逆になることがわかる．すなわち，この対照的な状況は，剛体球ではポテンシャルの芯のサイズ ($L$) は一定であるのに対し，クーロンポテンシャルの芯のサイズは一定ではなく速度に依存 ($\propto v^{-2}$) することに起因している．

それでは，両者の中間と見なせる Thomas-Fermi ポテンシャルのような遮へいポテンシャルではどうなるだろうか．実際，遮へい原子ポテンシャルでは古典力学近似の条件はクーロンポテンシャルの場合と同じく低速度領域であることが示されている [11].

# 8　結晶によるイオンビームの散乱

結晶に入射したイオンビームの散乱過程あるいは電子励起効果には §7 で述べたクーロンシャドーが重要な寄与をする場合が多い．イオンチャネリング効果はその一例である．

## 8.1　シャドーコーンの干渉

図 19 のように，等間隔 $d$ で並んだ原子列へイオンビームが入射する際に，シャドーコーンの干渉が起きる条件を考察しよう．原子列方向に対してビームの入射角 $\psi$ を小さくしていくと，ある角度 $\psi = \psi_A$ 以下では各シャドーコーンが隣接原子を隠してしまう状況になる．図中の $\psi = \psi_A$ は，シャドーコーンのこのような幾何学的干渉が起きる臨界角を示す．

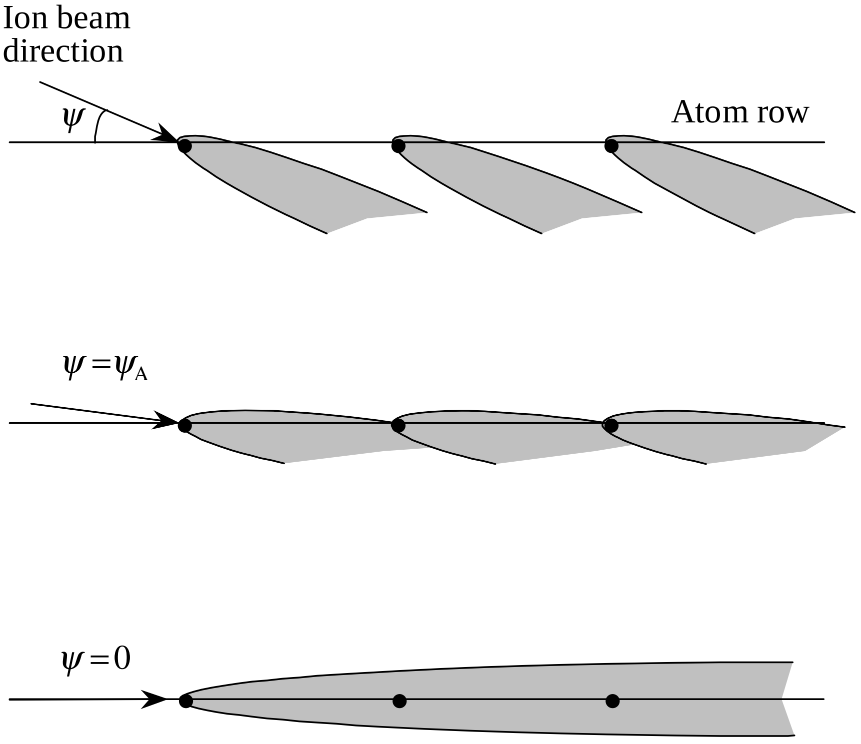


図 19: シャドーコーンの干渉の模式図.

実際，イオンビームが結晶へ入射したときにこのような状況が生じる．例として，keV 領域の低エネルギーイオン散乱分光では結晶表面の整列原子，MeV エネルギーのイオン散乱分光ではサブミクロン深さ領域の結晶原子についてシャドーコーンの干渉が起き，チャネリングあるいはその関連現象が観測される．その際，通常の実験条件では一回の測定中に試料結晶の１本の原子列領域に入射する平均イオン数は高々１個程度であるが，それでも試料によってはイオンビーム照射による結晶構造の損傷が起きることがあるので注意が必要である．

イオンビーム散乱の応用はほとんど古典力学近似が使える条件 ($\kappa \gg 1$) で行われるので，以下

では量子力学的回折・干渉効果は無視する (問題 7–4 参照).[11] 図 19 および (121) により，臨界角は

$$\psi_A \simeq R(d)/d = \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\pi \varepsilon_0 E_1 d}} \tag{132}$$

と表されることがわかる.

## 8.2 遮へいクーロン場のシャドー

高速イオンが原子で散乱される際には，遮へいクーロンポテンシャルを使うのが妥当である. 遮へいクーロンポテンシャルはスクリーニング長 0.1–0.2 Å(§6.3) より遠方では急激に弱まるので, 対応する散乱角度も小さくなる. その効果を小角度散乱について示しておく. ポテンシャルの遮へい関数が衝突径数とスクリーニング長の比 $b/a$ に依存することを考慮すれば，散乱角と衝突径数の関係は (119) を修正した形で

$$\theta_1 = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 E_1 b} f_{sc}(b/a) \tag{133}$$

と書ける. $0 < f_{sc} \leq 1$ は遮へい効果を表す項で $b/a$ の関数であり，$f_{sc} = 1$ はラザフォード散乱 (クーロン場) に相当する. Molière ポテンシャルについて計算された $f_{sc}(b/a)$ を図 20 に示す. この場合，$a$ は (100) の $a_1$ または (114) の $a_2$ である. 衝突径数 $b = a$ では散乱角度はクーロン散乱の場合の 61 %になる.

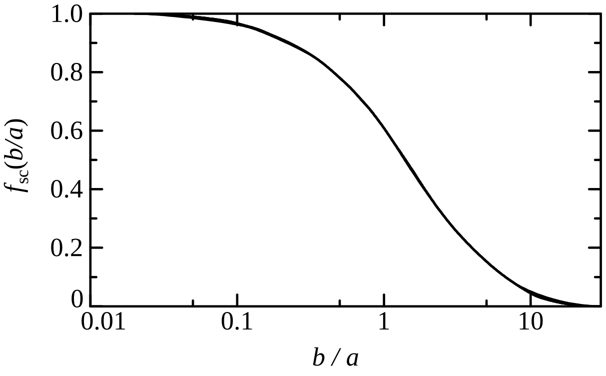


図 20: Molière ポテンシャルの $f_{sc}(b/a)$

実際，結晶場（遮へいクーロン場）におけるシャドーの干渉の臨界角は (132) の 50–70%になる. また，結晶原子は熱振動により平衡位置から平均して 0.1Å 程度変位しているので臨界角には不確定性が生じる. これらの効果を考慮した臨界角の正確な議論には数値シミュレーションが利用される (§8.4.2).

**問題 8–1** イオンビームによる物質分析では，MeV エネルギー領域の H, $^4$He ビームがよく用いられる. 1 MeV の H, $^4$He ビームが Si 原子に入射するときの $\kappa$ の値をそれぞれ求めよ [答: 4.38, 17.5 ].

**問題 8–2** 1 MeV の $^4$He ビームが Si$\langle 100 \rangle$ 原子列 ($d = 5.43$ Å) に入射するときのシャドーコーン半径 $R(d)$ および $\psi_A$ はいくらか [答: 0.092 Å, 0.017 rad ].

[11]後述のように，チャネリングとその関連現象は座標 $\kappa$ の値にかかわらず古典力学近似で扱えることを Lindhard が示している.

## 8.3 イオンチャネリングと関連現象

クーロンシャドーの干渉条件，すなわち臨界角より小さい角度でイオンビームが単結晶の原子列方向へ入射したとき，ほとんどの入射イオンは結晶原子による臨界角以下の小角前方散乱のみを受ける．このときイオンは原子列に近ずくほど強いクーロン反発力を受けるので，原子列に囲まれたトンネル状の空間 (channel, チャネル) を横方向に往復しながら通り抜ける．結晶の原子面 (面チャネル) についても類似な現象が起きる [13]．前者を軸チャネリング (axial channeling), 後者を面チャネリング (planar channeling) と呼ぶ．このようなチャネリング軌道の存在は，実験ではなくコンピュータシミュレーションを用いて最初に見出されたことは注目に値する [14]. それ以降，多種類のイオン (原子) について，また広いエネルギー領域についてチャネリング効果が観測されている．極限的な例として，低速では 50 eV の He，高速では相対論領域の ∼400 GeV 陽子についての観測がある．さらにイオン以外にも陽電子，パイオン，ミュオンのチャネリングが観測されている.[12]

結晶原子は熱振動により平衡位置から ∼0.1 Å 程度変位している (§15.1)．すなわち結晶の原子列あるいは原子面は ∼0.1 Å 程度の太さあるいは厚さを持つことになる．このことから，一般にチャネリング粒子は原子列あるいは原子面に対して ∼0.1 Å 以下には近づかない．したがってイオン・原子衝突にともなう現象，すなわち，照射損傷，スパタリング (イオンビームエッチング)，特性 (内殻)X 線の発生，2 体衝突による 2 次電子生成，ラザフォード後方散乱，核反応などはチャネリング入射条件では実効生起断面積が減少する．本書の冒頭，図 1 はイオン誘起 2 次電子で観測した単結晶サファイアの軸および面チャネリングを示している．チャネリング入射条件ではイオン・原子衝突にともなう効果が弱まるために，チャネリング粒子に対する阻止能は低下し，飛程 (range) は最大 2 倍程度長くなる．最近の FIB(Focused Ion Beam) による表面加工においても，使用される 5–50 keV の $Ga^+$ イオンのチャネリング効果は無視できない [15].

チャネリング粒子特有の往復軌道は，固体内原子の熱振動変位あるいは固体内電子との多重衝突によって乱される．その結果，原子列に対する粒子の進行方向が臨界角を越えると往復軌道は存在しなくなり，原子による粒子散乱の実効断面積は非チャネリング入射の場合と同じになる．この過程をディチャネリング (dechanneling) と呼ぶ．ディチャネリングにより，チャネリング粒子は深さとともに減少し，対照的に非チャネリング粒子 (ランダム粒子) が増加する．ディチャネリングは結晶内の格子欠陥によっても起き，したがってチャネリングの測定から結晶内の格子欠陥を検出することもできる (§12.2 参照).

## 8.4 イオンチャネリングの連続モデル

結晶中をチャネリングする荷電粒子の振る舞いはコンピュータシミュレーションによって再現することが可能である．しかし，チャネリングとその関連現象の物理の本質は Lindhard による連続モデルで言い尽くされていると思われる [11]. 以下にこのモデルの要点を述べる．

### 8.4.1 連続ポテンシャルと軌道のスケーリング

連続モデルでは，結晶軸あるいは結晶面に対するイオンのチャネリング運動を，イオンの進行方向 $z$ に垂直な面上に投影された 2 あるいは 1 次元運動としてそれぞれ記述する．それらに対応

[12] イオンチャネリングの概念の説明に結晶の原子構造模型を使用することが多いが，その際の盲点を認識しておく必要がある．原子構造模型で結晶軸や結晶面のチャネル方向を示すことはできても，チャネリング現象の本質がクーロンシャドーの干渉であること，したがって臨界角が存在すること等は説明できない．

する連続ポテンシャルは結晶軸あるいは面上の原子による静電ポテンシャル $\mathscr{V}(r)$ をそれぞれ結晶軸あるいは面上で平均化することにより得られる．すなわち，軸チャネリングの場合，原子間隔 $d$ の原子列からの距離 $r$ における連続ポテンシャル $U_\mathrm{a}(r)$ は

$$U_\mathrm{a}(r) = \frac{1}{d}\int_{-\infty}^{\infty} \mathscr{V}(\sqrt{r^2+z^2})\,\mathrm{d}z \tag{134}$$

と表される．また，面チャネリングの場合，原子面からの距離 $y$ における連続ポテンシャル $U_\mathrm{p}(y)$ は,

$$U_\mathrm{p}(y) = Nd_\mathrm{p}\int_{0}^{\infty} \mathscr{V}(\sqrt{y^2+\eta^2})\,2\pi\eta\,\mathrm{d}\eta \tag{135}$$

と表される．ここで，$N, d_\mathrm{p}$ はそれぞれ結晶の原子数密度，結晶面間隔であり，したがって $Nd_\mathrm{p}$ は結晶面内の原子数密度である．Thomas-Fermi ポテンシャルに基づく連続ポテンシャルの Lindhard による近似表現として

$$U_\mathrm{a}(r) = \frac{Z_1Z_2e^2}{d}\ln\left(\frac{3a^2}{r^2}+1\right), \tag{136}$$

$$U_\mathrm{p}(y) = 2\pi Z_1Z_2e^2aNd_\mathrm{p}\left[\sqrt{\left(\frac{y}{a}\right)^2+3}-\frac{y}{a}\right] \tag{137}$$

が知られている．$r$ あるいは $y$ が 0 に近づいたとき，$U_\mathrm{a}(r)$ は $U_\mathrm{p}(y)$ よりも急激に増加することは,一般に軸チャネリングが面チャネリングよりも強い効果であることに対応する.

$\mathscr{V}(r)$ として Molière あるいは Thomas-Fermi ポテンシャルのような遮へいクーロンポテンシャルを用いれば，$U_\mathrm{a}(r)$ は

$$U_\mathrm{a}(r) = \frac{Z_1}{d}G(r/a) \tag{138}$$

のように書ける．ここで，$G(r/a)$ は $r/a$ の関数を表す. イオンが結晶表面 $z=0$ へ入射してからの時間 $t_1 = z/V_1$ を用いれば運動方程式は

$$M_1\frac{\mathrm{d}^2r}{\mathrm{d}t_1^2} = -\frac{Z_1}{d}\nabla G(r/a) \tag{139}$$

となる．(139) はさらに

$$\frac{\mathrm{d}^2r}{\mathrm{d}\zeta^2} = -\nabla G(r/a) \tag{140}$$

と書き換えられる．ただし,

$$\zeta = \left(Z_1/M_1V_1^2d\right)^{1/2}z \tag{141}$$

である.

全電離イオン (fully stripped ion) の場合，(100) のように $a$ は原子固有のパラメータであり $Z_1$ に依存しない．したがって，(140)，(141) より，このときのイオンの軌道 $r(z)$ は模式図 21 のように $z$ 方向に関して $(Z_1/M_1V_1^2d)^{-1/2} = V_1\sqrt{M_1d/Z_1}$ に比例して伸縮することがわかる.

以上は 1 本の原子列の連続ポテンシャル内で運動する全電離イオンに関してのスケーリングの議論であったが, 次のような結論が導かれることは明らかであろう.

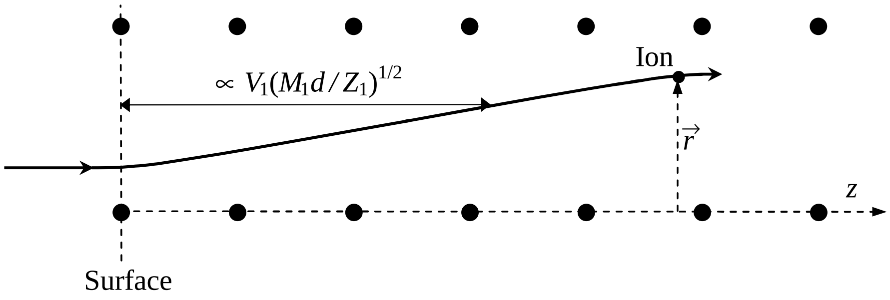


図 21: 連続ポテンシャル場中の軸チャネリングイオン (模式図)

- イオンが複数の原子列による連続ポテンシャル内を運動する場合でも，同じスケーリング則が成り立つ.
- 面チャネリングの場合，イオンの軌道 $y(z)$ は $z$ 方向に関して $V_1\sqrt{M_1/Z_1d_\mathrm{p}}$ に比例して変化する (面チャネリングのスケーリング則).
- 部分電離イオン (partially stripped ion) では，一般に $a$, したがって $G$ が $Z_1$ に依存するため [(114) 式あるいは図 15 参照], $y(z)$ の $Z_1$ 依存性は全電離イオンの場合とは異なる．このことを考慮して，部分電離イオンに対するスケーリングパラメータは軸では $V_1\sqrt{M_1d}$，面では $V_1\sqrt{M_1/d_\mathrm{p}}$ になる.

### 8.4.2　チャネリングの臨界角

連続モデルでは，トーマス・フェルミの遮へいポテンシャルの近似形に基づいて，チャネリングの臨界角は

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{Z_1Z_2e^2}{2\pi\varepsilon_0E_1d}}, \tag{142}$$

$$\psi_\mathrm{p} = \sqrt{\frac{Z_1Z_2e^2aNd_\mathrm{p}}{2\varepsilon_0E_1}} \tag{143}$$

と見積もられている．(142)，(143) は定量性には欠けるものの，パラメータ依存性については正しい形式であり，その意味で臨界角の本質的な表現と言える.

ここで，すでに述べたクーロンシャドーの干渉条件すなわち (132) と (142) との関係は等価であることを強調しておきたい．実際，(132) はビーム方向を結晶軸方向へ近づけたときにシャドーの干渉 (したがってチャネリング) が始まる値であるのに対して，(142) はビーム方向が結晶軸方向から遠ざかり連続ポテンシャルによる記述が破綻する条件として導入されているのであって，それらは同等である．両者の $\sqrt{2}$ 倍の差は，ポテンシャルにおける遮へいの有無に起因するのでチャネリング現象の本質には関わりない.

なお，結晶面方向におけるクーロンシャドーの重なりは，軸方向の場合に比べて不完全であり，したがって面チャネリングの臨界角を結晶軸方向の場合のように解析的に導くことは困難である．しかし，結晶内におけるイオン軌道の数値シミュレーションを用いれば面チャネリングの臨界角の詳細を知ることができる [16, 12, 2].

実際の結晶では結晶原子の格子位置は熱振動により平衡点からずれている．したがって，チャネリングの臨界角の扱いにおいても熱振動変位を考慮する必要がある．熱振動を取り入れた数値シミュレーションの結果は Barrett によって半経験式の形にまとめられ，それらは臨界角等の観測結果を良く説明できる [16, 13].

### 8.4.3　チャネリングイオンの粒子性

イオンチャネリング現象に特有の性質であるが，イオンの原子による一回散乱を古典力学で扱えない場合，すなわち §7.3 で述べた ($\kappa \lesssim 1$) の条件下においても古典力学に基づく粒子のチャネリング軌道を考えることができる．これは以下に示すようにチャネリングが実質的に 2 あるいは１次元空間の運動であることに起因している．実際，臨界角で入射するイオンの横方向空間 (2 あるいは１次元) における速度 $V_\perp = V_1\psi_1$(軸チャネリングの場合), ドブロイ波長 $\lambda_\perp = h/M_1V_\perp$，およびこの場合の最近接距離 $a_1 \simeq a_0 Z_2^{-1/3}$[(100) 式] を用いると，(70) に対応する表現として

$$\kappa_\perp = 2\pi a_1/\lambda_\perp = \left[4(M_1/m_\mathrm{e})Z_1Z_2^{1/3}(a_0/d)\right]^{1/2} \tag{144}$$

が得られる．

(144) に含まれる $M_1/m_\mathrm{e}\,(\geq 1800)$ の項のために，$\kappa_\perp$ は常に 1 より十分大きな値になることがわかる．面チャネリングについても同様な結果が得られる．このことから，たとえ $\kappa \lesssim 1$ であってもチャネリング粒子の運動は古典力学で扱えることが結論される．実際，$\kappa$ の値に制限されることなく，数値シミュレーションによってチャネリング粒子の古典力学的軌道を扱い，実験データを解析することが可能である．

### 8.4.4　チャネリングイオンの統計平衡分布

結晶チャネル内におけるイオンの密度分布は一般に表面からの深さに依存するが，イオンは結晶内電子との衝突あるいは熱振動変位した結晶原子による散乱によってチャネリングの振動軌道の位相は混ざり合い，密度分布は深さに関して一定とみなせる状態になる．このような定常状態における密度分布は, 位置 $r$ と運動量 $p$ に関して統計力学のミクロカノニカル分布に相当すると考えるのは自然と思われる．

一般に，$n$ 次元空間 (チャネリングでは $n = 1, 2$) におけるポテンシャル $U_n(r)$ にしたがって運動する全エネルギー $E_\mathrm{t}$ の粒子の統計平衡分布を運動量について積分することにより，位置に関する密度分布 $\mathscr{F}_n \mathrm{d}^n r$ は

$$\mathscr{F}_n(r)\,\mathrm{d}^n r = \left[\int \delta\left(p^2/2M_1 + U_n(r) - E_\mathrm{t}\right)\,\mathrm{d}^n p\right]\,\mathrm{d}^n r \tag{145}$$

と書ける．ここで $\delta$ はデルタ関数であり，$U_n$ はチャネルの中央で 0 にとられている．積分を行うと (問題 8.4.4–1 参照),

$$\mathscr{F}_n(r)\,\mathrm{d}^n r = C_n\,[E_\mathrm{t} - U_n(r)]^{(n-2)/2}\,\mathrm{d}^n r \tag{146}$$

が得られる．ここで $C_n$ は規格化定数であり $r$ に依存しない.

(146) によれば，面チャネリング ($n = 1$) では軌道の折り返し点 $E_\mathrm{t} = U_n$, すなわち $U_\mathrm{p}(y) = E_\perp$ で与えられる $y$ においてイオンの密度は最大となる．これに対し，軸チャネリングの場合 ($n = 2$) は $U_n(r) \leq E_\mathrm{t}$, すなわち $U_\mathrm{a}(r) \leq E_\perp$ を満たす $r$ に対して密度は一定であり，これは 2 次元運動の特徴である．

統計平衡分布の仮定は，チャネリングによる格子欠陥の解析においてしばしば利用されてきた．実際，結晶内の格子欠陥の近傍を走るイオンのチャネル内密度は表面からの深さに依存するため，その相互作用 (格子欠陥のディチャネリング断面積) も厳密には深さの関数として扱わなければならない．しかし，統計平衡分布を仮定すれば深さに関する相互作用の平均化が自動的に行われることになり，扱いを簡略化できる利点がある．

**問題 8.4.4–1**　(145) において，$\mathrm{d}^n p = \mathrm{d}p\,(n=1$ のとき$)$, $2\pi p\,\mathrm{d}p\,(n=2$ のとき$)$ に注意して (146) を導け．その際，デルタ関数の ( ) 内を例えば $\mathscr{X}$ と置き，変数 $\mathscr{X}$ に関する積分に書き換えること．

# 9 イオンの固体内荷電状態

## 9.1 平衡荷電状態と平均電荷

物質に入射したイオンは電子の損失あるいは捕獲過程を経て，両者の釣り合いに相当する固有の荷電分布へと移行する [17]．これを平衡荷電状態と呼ぶ．一般に平衡荷電状態はイオン速度で決まり，イオンが高速になれば，物質内でのイオンの荷電は全電離状態 (fully-stripped state) に近づき，低速になれば中性あるいは部分的に $-1$ 価に近づく. 平衡荷電状態は物質にはあまり依存しないため，カーボン膜の透過実験による豊富なデータが参考になる [18, 19].

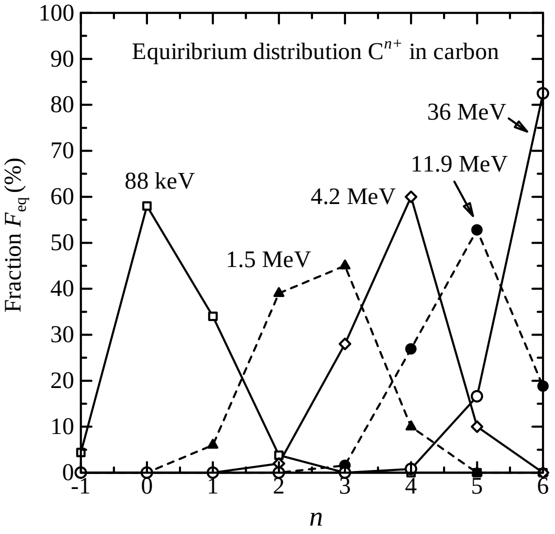


図 22: カーボン通過時の C イオンの平衡荷電分布 (イオンエネルギー依存性) [18]

一例として C イオンの平衡荷電分布 $C^{n+}(-1 \le n \le 6)$ のイオンエネルギー依存性を図 22 に示す．88 keV においては C は主に中性および 1 価 $(n=0,1)$ であるのに対して，36 MeV では約 80% が全電離状態になる．荷電数 $n$ に対する分率 (fraction)$F_{\mathrm{eq}}(n)$ を用いて，平衡荷電状態における平均電荷 $\bar{q}$ を

$$\bar{q} = \Sigma n F_{\mathrm{eq}}(n) \tag{147}$$

で定義しよう．カーボン膜についての測定で得られた $\bar{q}$ のイオン種およびエネルギー依存性の結果を図 23 に示す [19]．縦軸は平均電荷のイオン原子番号 (全電離時の荷電 $Z_1$) に対する比 $\bar{q}/Z_1$ を示す．一般傾向として，同速度のイオンでは $Z_1$ が増加すると $\bar{q}/Z_1$ は減少し, より中性に近づくことがわかる．Thomas-Fermi モデルによれは，原子内の 1 電子あたりの平均運動エネルギー，したがって平均束縛エネルギーは $Z_1^{4/3}$ に比例するため (§6.2.3, 問題 6.2–2)，$Z_1$ の増加に対して相対的に電離が起こりにくくなることで上記の一般傾向が説明される．

注目すべき点として，$\bar{q}/Z_1 = 1-2/Z_1, 1-10/Z_1$ を表す (a), (b) の曲線の位置で平均電荷の極大が見られる．これらは束縛電子数がそれぞれ 2, 10 の場合に相当し，それぞれ He, Ne 原子に類似の閉じた K あるいは L 殻の電子配位に起因している．例えば，束縛電子数が 9, 11 の場合には，それぞれ 1 個の電子捕獲，電子損失によって $9 \to 10$, $11 \to 10$ のように $\bar{q}$ の低下および上昇が起き易くなる．すなわち閉殻電子配位となる $\bar{q}$ の近傍では $\bar{q}$ が横軸 $Z_1$ に関して増加する効果が働き，これが $Z_1$ に関して単調減少する曲線に加算された結果，図 23 のような平均電荷の極大がもたら

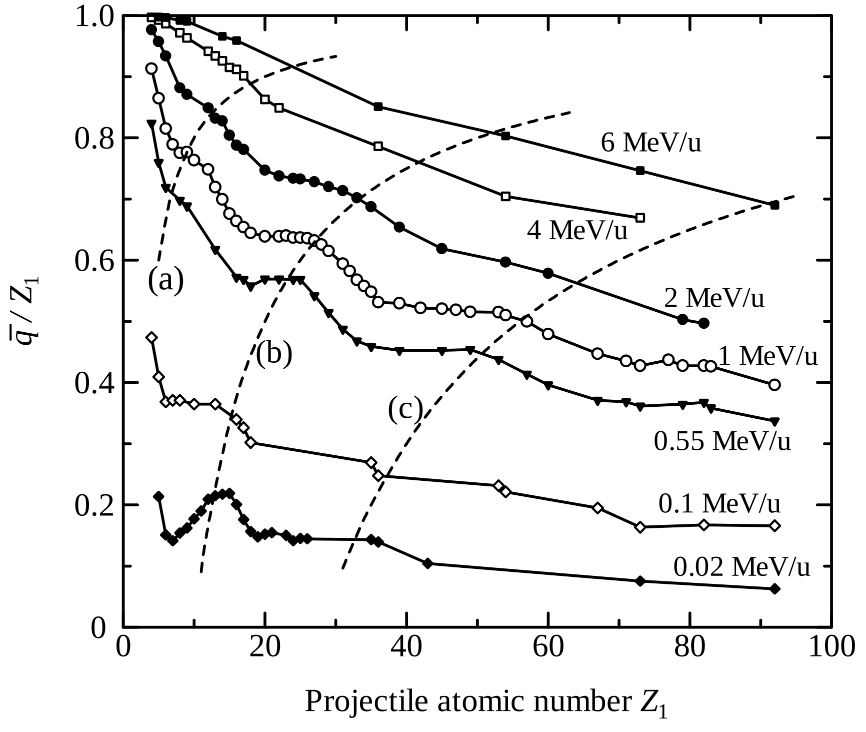


図 23: カーボン通過時の平均電荷のイオン種およびエネルギー依存性 [19].

される．なお, 殻構造が K, L ほど明確でない M 殻の場合に対応して, 束縛電子数が約 30 で類似の効果が見られる．実際, 曲線 (c) は束縛電子数 28, すなわち $\bar{q}/Z_1 = 1 - 28/Z_1$ を示す.

## 9.2 平均電荷の半経験式

平均電荷がほぼイオン速度 $V$ で決まることから，$V$ をパラメータとして平均電荷を半経験式で表すことができれば便利である．実際，Ar より軽いイオンに対して，非晶質カーボン中における平均電荷 $\bar{q}$ は

$$\bar{q} = Z_1 \left[ 1 - \exp\left(-\frac{V}{Z_1^{2/3} v_0}\right) \right] \tag{148}$$

で近似的に表され，重イオンの阻止能の議論にも適用可能である [20]. (148) 中の $Z_1^{2/3} v_0$ は Thomas-Fermi 原子内の全電子の平均速度 (111) に相当し，したがってこの半経験式は，イオンと (イオンに束縛された) 軌道電子との平均的な速度比 $V/Z_1^{2/3} v_0$ によって $\bar{q}$ を表している．

非晶質カーボン中でのより詳細な経験式として，速度比 $X = 0.608V/Z_1^{0.45} v_0 < 2.4$ に対して

$$\bar{q} = Z_1 \left[ 1 - \exp\left(-1.25X + 0.32X^2 - 0.11X^3\right) \right] \tag{149}$$

が Shima により提案されている [21]．この式により，図 23 に示されていないイオン速度についての $\bar{q}/Z$ を見積もることができるが，$\bar{q}/Z$ の $Z$ に関する振動の大きい部分については平均値 (平坦化した値) を与えていることに注意すべきである．

### 9.3 特別な条件下での荷電状態

単結晶へ入射したイオンの荷電状態の扱いには注意を要する．一般に，チャネリング条件で結晶へ入射したイオンは，結晶原子の内殻電子に近づくことなく進行する (§10)．その場合の平均的な衝突径数，したがって荷電状態は個々のイオンのチャネリング軌道に依存する [22, 13]．イオンの単結晶内での荷電状態は，2 体衝突過程で生成される 2 次電子のスペクトルにも反映される [2]. また，共鳴干渉励起により，イオンの荷電状態が単結晶への入射方向と速度に対して共鳴的に変化する場合がある (§10).

入射粒子が分子・クラスターの場合には，表面へ入射直後にそれらは分離されて個々の構成原子 (イオン) として進行するが，同速度の単一イオン入射時に比べて平均電荷は下がることが見出されている．実際，炭素薄膜の透過実験により，１原子あたり 1∼4 MeV の炭素クラスター $C_n$ ($3 \le n \le 10$) に対して，平均電荷は 10∼15%低下することが観測された [23]. その理由として，近接クラスター原子の及ぼすポテンシャル，近接クラスター原子の電離した電子の捕獲，分子軌道等の効果が考えられるが，結論には至っていない.

# 10　結晶場による共鳴干渉励起

電子を捕獲しているイオンが結晶内を通過する際，結晶原子による周期クーロン場によって捕獲電子が共鳴的に励起される場合がある．この現象は共鳴干渉励起 (resonant coherent excitation, RCE) と呼ばれる [24].

## 10.1　共鳴干渉励起の条件

RCE は相対論領域のイオンで観測されることがあるので，ここでは共鳴条件の導出に相対論を用いることにする [25].　イオンの速度を $V$ とし，特殊相対性理論の表式

$$\beta = V/c, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{150}$$

を使用する．イオンが原子間隔 $d$ の結晶軸方向に走行するとしよう．これをイオンの静止系で見ると, ローレンツ収縮によって原子間隔が $d/\gamma$ になっている原子列が速度 $V$ で通過するので，イオンは振動数 $V\gamma/d$ の周期電場 (擬似光子場) を感じることになる．イオンに束縛されている電子があって，その励起準位のエネルギーを $I$ とする．この電子が共鳴的に励起される条件 (RCE 条件) は

$$I = Nh\frac{V\gamma}{d} = \frac{Nhc\beta}{d\sqrt{1-\beta^2}} \qquad (N = 1, 2, 3\ldots) \tag{151}$$

と書ける.[13] (151) を 2 乗し, $\beta^2$ について解くと

$$\beta^2 = \frac{1}{1+\alpha^2}, \tag{152}$$

$$\alpha = \frac{Nhc}{Id} = \frac{1.2396\times 10^4 N}{I(\mathrm{eV})\, d(\text{Å})} \tag{153}$$

が得られる.[14] 静止質量 $M$ のイオンに対して，$\beta^2$ と運動エネルギー $E$ の関係は

$$E = Mc^2(\gamma - 1) \tag{154}$$

であるから, (150), (152), (154) より

$$E = Mc^2\left(\sqrt{1+\frac{1}{\alpha^2}} - 1\right) \tag{155}$$

となる．1u(原子単位)= 931.50 MeV を用いれば，RCE 条件における核子あたりの運動エネルギー $\mathscr{E}$ は

$$\mathscr{E} = E/M = 931.50 \times \left(\sqrt{1+\frac{1}{\alpha^2}} - 1\right) \ [\mathrm{MeV/u}] \tag{156}$$

と表される．

**問題 10–1**　RCE を実験室系 (原子列の静止系) で扱っても，RCE 条件は (151) に一致することを確かめよ [ヒント: 相対論的時間の遅れ].

---

[13] $1 < \gamma < \infty$ であるから，(151) によればどんなに大きい $I$ の値についても RCE を起こす $V$ の値が存在する．このことは非相対論で扱うと間違えやすい．

[14] 微細構造定数 $e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c = 1/137.036$, および $e^2/4\pi\varepsilon_0 = 14.400$ eV/Å を用いる．

## 10.2 RCE の遷移確率

イオンが原子列に沿って $n$ 個の原子の近くを通過する場合の RCE の $n$ 依存性を，時間 $t$ に依存する１次摂動により考察する．ここでは MeV/u 領域のイオンの RCE を対象として，非相対論の範囲 ($\gamma \simeq 1$) で扱うことにする．イオンに固定された座標系で, イオンに束縛された電子を RCE によりエネルギー準位差 $I = \hbar\omega_0$ の量子状態へ励起するとしよう．摂動の始まる時間 (イオンが結晶表面に入射した時刻) を $t = 0$ とすれば，１次摂動による確率振幅 $a(t)$ は

$$a(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \langle\phi_2|H'(\tau)|\phi_1\rangle \exp(\mathrm{i}\omega_0\tau)\,\mathrm{d}\tau \tag{157}$$

と表される [26]．ただし，$\phi_1, \phi_2$ は電子の励起前後の波動関数をそれぞれ表す．

ここで，摂動が働く時間内には原子列とイオンの距離は一定, したがって $H'$ は一定周期 $T = d/V$ の周期関数であると仮定する．この仮定は原子列にほぼ平行に進むイオンに対しては妥当と考えられる．したがって,

$$H'(t+T) = H'(t)\ \text{, すなわち}\quad \langle\phi_2|H'(t+T)|\phi_1\rangle = \langle\phi_2|H'(t)|\phi_1\rangle \tag{158}$$

と書ける．

$t = nT\ (n \gg 1)$ の関係から

$$\int_0^t \langle\phi_2|H'(\tau)|\phi_1\rangle \exp(\mathrm{i}\omega_0\tau)\,\mathrm{d}\tau \;=\; \sum_{j=1}^{n}\int_{(j-1)T}^{jT} \langle\phi_2|H'(\tau)|\phi_1\rangle \exp(\mathrm{i}\omega_0\tau)\,\mathrm{d}\tau \tag{159}$$

のように積分範囲を分けて $\tau' = \tau - (j-1)T$ と変数変換し，(158) を用いると

$$\int_{(j-1)T}^{jT} \langle\phi_2|H'(\tau)|\phi_1\rangle \exp(\mathrm{i}\omega_0\tau)\,\mathrm{d}\tau = \exp[(j-1)\mathrm{i}\omega_0 T]\int_0^T \langle\phi_2|H'(\tau')|\phi_1\rangle \exp(\mathrm{i}\omega_0\tau')\,\mathrm{d}\tau' \tag{160}$$

が得られる．以降は変数として $t$ のかわりに $T = t/n$ を用いることにする．(160) の積分変数 $\tau'$ を再度 $\tau$ と書けば

$$\begin{aligned} a(T) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\sum_{j=1}^{n}\exp[(j-1)\mathrm{i}\omega_0 T]\right)\int_0^T \langle\phi_2|H'(\tau)|\phi_1\rangle \exp(\mathrm{i}\omega_0\tau)\,\mathrm{d}\tau \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\frac{1-\exp(n\mathrm{i}\omega_0 T)}{1-\exp(\mathrm{i}\omega_0 T)}\int_0^T \langle\phi_2|H'(\tau)|\phi_1\rangle \exp(\mathrm{i}\omega_0\tau)\,\mathrm{d}\tau \end{aligned} \tag{161}$$

と表される．遷移確率 $q(T)$ は

$$q(T) = |a(T)|^2 = \frac{\mathscr{D}(n,T)}{\hbar^2}\left|\int_0^T \langle\phi_2|H'(\tau)|\phi_1\rangle \exp(\mathrm{i}\omega_0\tau)\,\mathrm{d}\tau\right|^2 \tag{162}$$

で与えられる．ここで $q(T)$ の $n$ 依存性を与える項 $\mathscr{D}(n,T)$ は

$$\mathscr{D}(n,T) = \left|\frac{1-\exp(n\mathrm{i}\omega_0 T)}{1-\exp(\mathrm{i}\omega_0 T)}\right|^2 = \frac{\sin^2(n\omega_0 T/2)}{\sin^2(\omega_0 T/2)} \tag{163}$$

である．(163) は変数こそ異なるが, 結晶原子による X 線回折強度を与える回折関数そのものである.[15] 参考のため，図 24 に $n = 5, 10$ の場合の回折関数を示す．実際，$\mathscr{D}(n,T)$ は，$N = 1, 2, \ldots$ を用いて

$$\omega_0 T/2 = N\pi\ \text{, すなわち}\quad I = \hbar\omega_0 = NhV/d \tag{164}$$

[15](163) の $T, \omega_0$ は，X 線，電子線の回折における格子定数および逆格子ベクトルの大きさにそれぞれ対応している．そのため「RCE とは擬似フォトンの時間に関する回折現象である」という捉え方ができる．

のとき，すなわち (151) の RCE 条件を満たすときに高さが $n^2$ のピークになる．ピークの半値幅 $\sim\pi/n$ を不確定値として "±"により表示すれば (164) は

$$\frac{\omega_0 T}{2} = N\pi \pm \frac{\pi}{2n} \quad , \quad \text{すなわち} \quad I = \hbar\omega_0 = \frac{NhV}{d}\left(1 \pm \frac{1}{2nN}\right) \tag{165}$$

と書ける．すなわち，共鳴速度および共鳴エネルギーの相対半値幅はそれぞれ

$$\frac{\Delta V}{V} = 2 \times \frac{1}{2nN} = \frac{1}{nN} , \tag{166}$$

$$\frac{\Delta E}{E} = 2 \times \frac{\Delta V}{V} = \frac{2}{nN} \tag{167}$$

と表される．一般に，次数 $N$ が大きい RCE ピークは幅が狭くなる傾向を持つことが理解される．

RCE の摂動 $H'$ は結晶原子の静的な遮へいクーロン場および動的ウェイクポテンシャル (§14) によってもたらされる．したがって，RCE は光による励起とは異なる遷移を起こし，光に対しては禁制遷移であっても RCE では許容遷移になりうる．

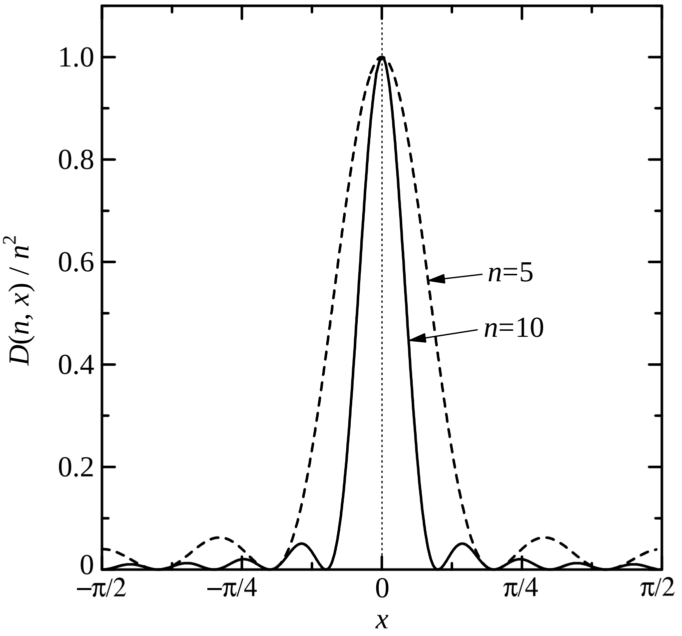


図 24: 回折関数 $\mathscr{D}(n,x) = \sin^2(nx)/\sin^2 x$．周期関数 (周期 $\pi$) であるため横方向は 1 周期を示し，縦軸はピーク値が 1 になるように，$\mathscr{D}(n,x)/n^2$ で表示してある．また，中央の主ピークの半値幅は $\sim\pi/n$ (厳密には，$\pi/n$ はピーク高の 50%ではなく $\sim$40%に対応する幅) である．

## 10.3 RCE の観測

RCE は，単結晶薄膜を通過したイオンの荷電分布を測定する方法により，事実上最初に観測された [27]. すなわち共鳴励起で緩い束縛状態に遷移した電子は容易に電離され，これが荷電分布に現れる. この方法以外にも，RCE は電離された電子の検出あるいは共鳴励起後の脱励起に伴う X 線測定等により観測されている.

図 25 に電子分光測定による RCE の観測例を示す [28]．この例では Si 単結晶の $\langle 110 \rangle$ 軸方向 ($d = 3.84\,\mathrm{eV}$) に $O^{7+}$ を入射させ，後方 180° への放出電子を測っている. $O^{7+}$ の $n = 1 \rightarrow 2$ の励起は

$I = 653.05\,\mathrm{eV}$ であり，$N = 2$ の共鳴条件を満たすイオンのエネルギーは (156) によれば 4.753 MeV/u である. RCE で励起され電離された直後の電子はほとんどがイオンと同速度であるから，2.59 keV の運動エネルギーを持つ．これらの電子は結晶内を移動しながら運動エネルギーを失ない結晶背面から放出されて 2 次電子スペクトルに重なる. したがって 2.59 keV 以下のエネルギーの電子収量に RCE が反映されている．　実際，1.9, 2.2, 2.5 keV の電子収量の入射イオンエネルギー依存性において，RCE ピークは計算値 4.753 MeV/u に一致している.[16]

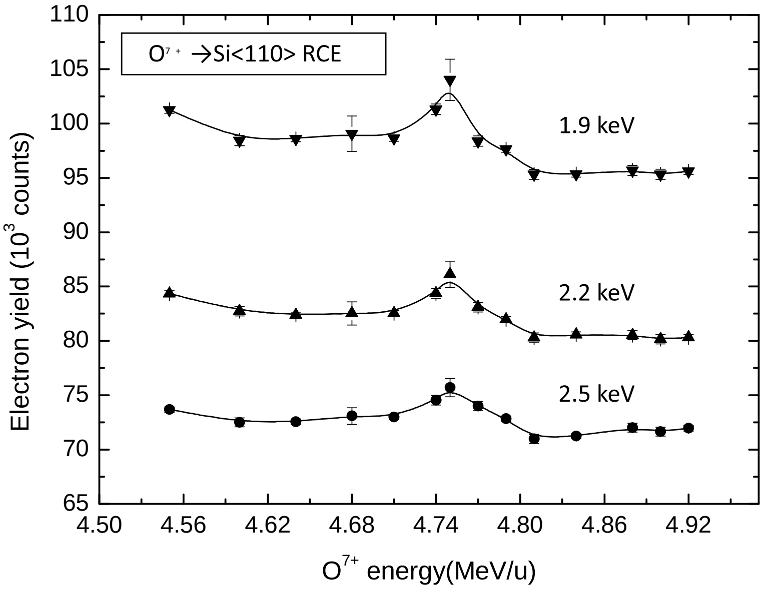


図 25: 結晶後方への放出電子の測定による RCE の観測. 共鳴を起こす $O^{7+}$ の入射エネルギーは 4.753 MeV/u.

これまでの議論は原子列すなわち 1 次元の RCE であったが，結晶面に沿ったイオン入射に対応する 2 次元の RCE [29]，結晶格子への任意の入射方向に対応する 3 次元の RCE が観測される [30]. これらは §10.2 における 1 次元の回折強度を 2, 3 次元へ拡張することに対応している.

[16]非相対論の計算 ($\gamma = 1$) では共鳴エネルギーは 4.766 MeV/u であり，実験結果を正確に説明できない.

## 11　物質の阻止能

荷電粒子を加速して物質に入射させると，物質内原子系との相互作用によって運動エネルギーを失い，やがて止まる．荷電粒子の進行方向に沿って単位長さあたりの損失エネルギーをその物質の阻止能 (stopping power) と呼び $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$ で表す. 阻止能は力の次元を持ち，力学における摩擦力に相当する. [17] また阻止能を標的物質の原子密度で割った量，すなわち単位原子密度あたりの阻止能は [エネルギー × 面積] の次元を持ち，阻止断面積 (stopping cross section) と呼ばれる．荷電粒子の検出器は例外なく阻止能をなんらかの形で利用しており，その動作原理を理解するには阻止能の知識が不可欠である．また，現在では高度な計算機コードにより必要なパラメータを入力するだけで阻止能を求めることができるが，物理現象としての阻止能の理解なくして計算結果を使いこなすことは容易ではない.

非相対論領域の荷電粒子に対する物質の阻止能は，荷電粒子の相互作用の主な相手が物質中の電子であるか原子核であるかによって，それぞれ電子的阻止能と核的阻止能に分けて考えることができる．粒子のエネルギー損失はこれら 2 種類の阻止能の和である．さらに電子的阻止能については，物質内の原子に束縛されている電子の平均軌道速度 $\sim Z^{2/3}v_0$ [(111) 式] を粗い基準として，荷電粒子の速度 $V$ が低速 (低エネルギー) であるか高速 (高エネルギー) であるかによって粒子から物質へのエネルギー移行のプロセスは異なる．ここでは荷電粒子として主にイオンを扱うが，それ以外の荷電粒子もこれに準ずる．

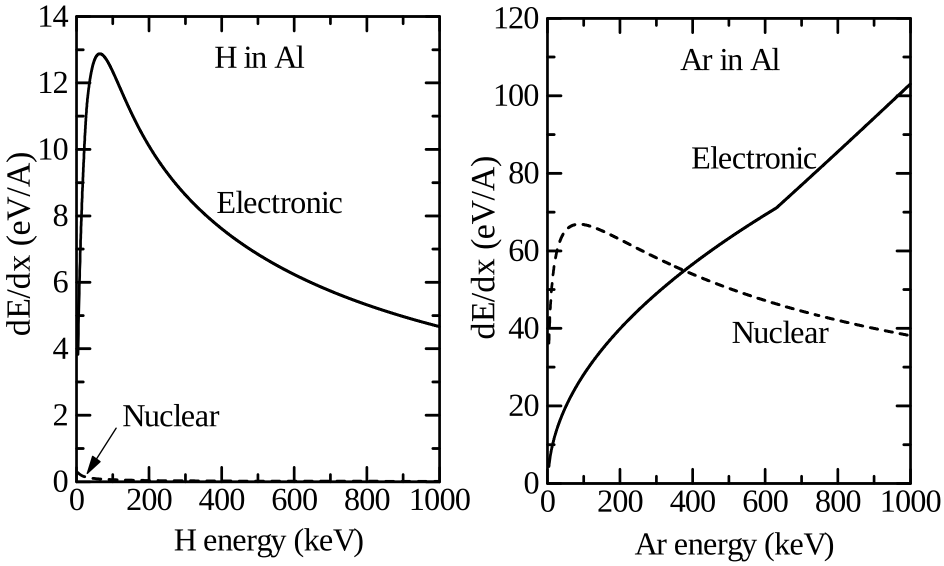


図 26: 0–1000 keV の H, Ar に対するアルミニウムの電子的および核的阻止能 (TRIM コードによる). 一般に，電子的阻止能は低エネルギー領域ではイオン速度 $V$ にほぼ比例し，高エネルギー領域では近似的に $V^{-2}$ の依存性を持つ (Ar では 1000 keV を超える領域).

個々の議論に入る前に非相対論領域の阻止能の概略を，図 26 に示す例とともに以下にまとめておく.

１．電子的阻止能 (Electronic stopping power)

- イオンが物質中の電子を励起あるいは電離することによって運動エネルギーを損失する過程.

[17] そのため，“stopping force”を用いる研究者もいる [31].

- 高速イオン ($V \gg Z^{2/3}v_0$) は物質内の電子を反跳することによって運動エネルギーを損失する．阻止能はほぼ $V^{-2}$ に比例する．
- 低速イオン ($V \ll Z^{2/3}v_0$) のエネルギー損失の主なプロセスは，物質内電子の捕獲と損失，言い換えれば物質内の電子を引きずる効果であり，その結果イオンは物質中の電子に運動量を与え，その分だけ自身の運動エネルギーを失う．阻止能は $V$ に比例する
- 低速イオンでは，電子的阻止能以外に次に述べる核的阻止能によるエネルギー損失のプロセスが重要になる．

2．核的阻止能 (Nuclear stopping power)

- 物質中の原子核 (＋束縛電子) を反跳することによってエネルギーを損失する過程.
- 低速重イオンでは核的阻止能が支配的である (電子的阻止能は相対的に無視できるほど小さい).
- 中高速イオンの阻止能にはほとんど寄与しない.
- 物質を直接的に "壊す"（照射損傷）

## 11.1 阻止能の概念

荷電粒子は物質を通過する際，励起，電離，原子核の反跳などによってエネルギーを損失し，それらの総和が観測される阻止能に相当する. 阻止能を議論する際に注意すべき事柄を弾性散乱を例にとって考察してみよう [32].

すでに (58) で示したように微分エネルギー移行断面積 $d\sigma_a/dT$ が分かっていれば，全断面積 $\sigma_a$ は

$$\sigma_a = \int \frac{d\sigma_a}{dT}\, dT \tag{168}$$

であるから，移行エネルギーの平均値 $\langle T \rangle$ は

$$\langle T \rangle = \frac{1}{\sigma_a}\int T\, d\sigma_a = \frac{1}{\sigma_a}\int T \frac{d\sigma_a}{dT}\, dT \tag{169}$$

と書ける．エネルギー移行が２体衝突の繰り返しによる場合，気体分子運動論との類似性に基づく "平均自由距離"の概念を導入できる. すなわち，物質の原子数密度 $N$ を用いれば，荷電粒子は平均自由距離 $\lambda = 1/N\sigma_a$ 進むごとに $\langle T \rangle$ だけエネルギーを失うので，阻止能は

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\langle T \rangle}{\lambda} = N\int T \frac{d\sigma_a}{dT}\, dT \tag{170}$$

と書き表される．平均自由距離の概念を使用できる条件として，$\lambda$ が物質中の原子間隔よりも十分大きいことが必要である. また，阻止能が定義できるためには，２体衝突による移行エネルギーが粒子の運動エネルギーよりも十分小さいことも必要である. 後者の条件は，弾性散乱による阻止能が小角度の散乱のみに対して定義されることを意味する.

### 11.2　高速荷電粒子の阻止能

#### 11.2.1　半古典的考察

捕獲電子を持たない全電離状態の高速イオン (高速の点電荷) に対する物質の阻止能を Bohr の半古典的扱いによって計算しよう．イオンの核電荷および質量を $Z_1e, M_1$ とし，速度を $V$ とする．まず，このイオンの通過によって衝突径数が $b$ の位置にある物質内電子の受け取る運動エネルギーを求める．イオンは一瞬で通過するので，電子はイオンからの引力の結果としてイオンの進行方向に対してほぼ直角方向へ引力を受けるとする．イオンの方向変化は小さいので $\theta, \theta_1$ とも 0 付近を考えれば十分である．(51) により

$$\theta = \frac{2Z_1e^2}{4\pi\varepsilon_0 M_r V^2 b} \tag{171}$$

であり，さらに (27) により

$$\theta_1 = \frac{\theta}{M_1/m_e + 1} \tag{172}$$

であるから

$$\theta_1 = \frac{2Z_1e^2}{4\pi\varepsilon_0 M_1 V^2 b} \tag{173}$$

が得られる. (173) は既に導出された (119) で $Z_2 = 1$ の場合に他ならない．電子へ移行した運動量 $\Delta p$ は $M_1 V \theta_1$ に等しいので，電子の受け取る運動エネルギーすなわちイオンの損失エネルギー $\mathscr{E}$ は

$$\mathscr{E} = \frac{(\Delta p)^2}{2m_e} = \frac{2Z_1^2e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 m_e V^2 b^2} \tag{174}$$

となる. ところで，(174) で $m_e$ を $M_2/Z_2^2$ に置き換えれば原子核へのエネルギー移行になるが，これは電子の場合に比べて無視しうるほど小さいことは明らかである．

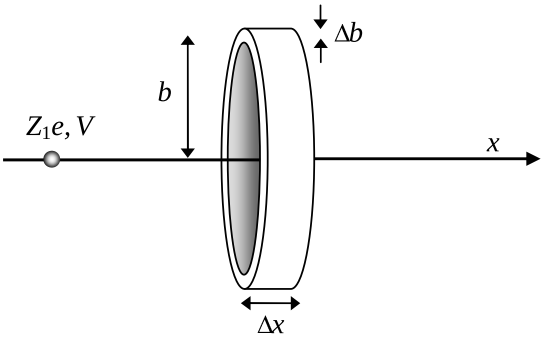


図 27: 衝突径数 $b$ の電子へのエネルギー移行．円筒内の電子は内向きの運動量を与えられる．

図27 に示すように，イオンの走る軌道を軸とする半径 $b$，厚さ $\Delta b$，長さ $\Delta x$ の円筒を考える．標的物質の原子番号を $Z_2$ とすれば，電子密度は $NZ_2$ であるから，この円筒中の電子数は $2\pi b\Delta b \cdot NZ_2\Delta x$ となり，円筒内の電子が受け取るエネルギーは

$$\Delta E(b) = 2\pi b\Delta b \cdot NZ_2\mathscr{E}\Delta x \tag{175}$$

と表される.[18]　(175) より $\Delta E(b)/\Delta x$ を $b$ について積分すれば阻止能が得られる．すなわち

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = \frac{Z_1^2 e^4 N Z_2}{4\pi\varepsilon_0^2 m_\mathrm{e} V^2} L \,, \tag{176}$$
$$L = \int \frac{\mathrm{d}b}{b} = \ln(b_\mathrm{max}/b_\mathrm{min})$$

と書ける．積分の下限 $b_\mathrm{min}$ および上限 $b_\mathrm{max}$ は古典力学のみでは議論できない．以下，半古典的な考察から $L$ がどのように書き表されるかを推論してみよう．

イオンの通過時に電子が感じるパルス電場の実質的な時間幅は $b$ の増加とともに $b$ に比例して広がるので (問題 11.2–2 参照),「小さい $b$」↔「短波長光」,「大きい $b$」↔「長波長光」のように対応させることができ，したがって電子の励起には $b$ の上限が存在する．実際，パルス電場 (あるいは光) で励起エネルギー $I_\mathrm{ex}$ の電子遷移を起こさせるためにはパルス幅は $h/I_\mathrm{ex}$ (エネルギー $I_\mathrm{ex}$ のフォトンの振動数の逆数) 程度以下でなければならない．このことに対応して，$b_\mathrm{max}$ は物質内電子の励起を起こすことのできる衝突径数の上限と見なせる．その際の衝突時間は $b_\mathrm{max}/V$ 程度であるから

$$\frac{b_\mathrm{max}}{V} \sim \frac{h}{I_\mathrm{ex}} \quad , \quad \text{すなわち} \quad b_\mathrm{max} \sim \frac{hV}{I_\mathrm{ex}} \tag{177}$$

を得る．これに対し，$b_\mathrm{min}$ は位置の不確定性から見積もられる．電子の静止座標系 (相対座標系) からイオンを見ると，イオンの運動量は $M_\mathrm{r}V \simeq m_\mathrm{e}V$ である．したがって，イオンは進行方向にドブロイ波長 $h/m_\mathrm{e}V$ 程度の広がり (位置の不確定性 $\delta x \sim h/\delta p$) を持つことになる．これがイオン・電子間距離の決定精度の限界であり，$b$ の最小値とみなすことができる．すなわち，

$$b_\mathrm{min} \sim \frac{h}{m_\mathrm{e} V} \tag{178}$$

となる．(177)，(178) より

$$L \sim \ln \frac{m_\mathrm{e} V^2}{I_\mathrm{ex}} \tag{179}$$

が得られる．$I_\mathrm{ex}$ は標的原子の電子構造を反映する励起エネルギーであるが，その値したがって $L$ の詳しい議論には次節 §11.2.2 の量子論による扱いが必要になる．

**問題 11.2–1** (173) を導出せよ．その際，$m_\mathrm{e} \ll M_1$ を用いる必要がないことに注意.
**問題 11.2–2** 図 27 において，イオンが通過するときに電子に働くクーロン力は $x$ に関して最大値 ($\propto b^{-2}$) を中心とするパルス状になり，その半値幅は $2b$ であることを示せ.

### 11.2.2　Bethe の阻止能公式

高速イオン衝撃による原子の励起・電離を Born 近似で扱うことにより，Bethe の阻止能公式を導出しよう．§11.2.1 と同じく，点電荷すなわち捕獲電子を持たない全電離状態の高速イオン (核電荷 $Z_1 e$, 速度 $V$) を対象とする．以降では電離を連続エネルギー準位への励起とみなし, 励起・電離をひとまとめにして “励起”と呼ぶことにする.

[18] この扱いでは移動電子間の相互作用が入っておらず，これは §14 で述べる荷電粒子の誘電応答におけるエネルギー移行の高速極限と見なすこともできる.

標的原子の励起を伴う高速イオンの非弾性散乱では，弾性散乱の場合とは異なり，散乱後の確率波の波数は減少する．すなわち，§5.1 の概念図 9 において，入射波，球状散乱波の波数ベクトルをそれぞれ $K, K_1$ とするとき，イオンの運動エネルギーが励起に費やされるために, 一般に $K_1 < K$ になる．このときの球状波の散乱振幅を $f_1$ とすれば，$|f_1|^2$ はこの非弾性散乱の微分断面積を与える．なお，この関係は弾性散乱の場合と同様であることに注意したい [(81) およびその前後を参照]．この非弾性散乱により原子の電子系が最初の状態 (始状態) から励起状態 (終状態)“$n$”へ遷移するときの微分励起断面積 $\mathrm{d}\sigma_n$ は

$$\mathrm{d}\sigma_n = |f_1(\theta,\phi)|^2\,\mathrm{d}\Omega \tag{180}$$

で与えられる．ここで，イオンの散乱方向は散乱角 $\theta$ と散乱の方位角 $\phi$ で表され，$\mathrm{d}\Omega = \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi$ である．

ところで，入射イオンと標的原子 (原子番号 $Z_2$) の相互作用ポテンシャル $U$ は

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{4\pi\varepsilon_0 |r - r_j|} \tag{181}$$

と書ける．ここで $r, r_j$ は標的原子の核から見た入射イオンおよび原子内の $j$ 番目の電子の位置ベクトルである．$U$ を摂動と見なして Born 近似によって $f_1(\theta,\phi)$ を求めれば最初に Bethe が示した式

$$f_1(\theta,\phi) = -\frac{2m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\frac{Z_1 e^2}{4\pi\varepsilon_0 q^2}\langle\psi_n|\sum_j^{Z_2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr_j}|\psi_0\rangle\,, \tag{182}$$

$$\langle\psi_n|\sum_j^{Z_2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr_j}|\psi_0\rangle = \int\cdots\int \psi_n^* \left\{\sum_j^{Z_2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr_j}\right\} \psi_0\,\mathrm{d}r_1\mathrm{d}r_2\cdots\mathrm{d}r_{Z_2} \tag{183}$$

が得られる [7, 33]．ここで $q = K - K_1$(図 28) であり，電子系の始状態および終状態の波動関数 $\psi_0, \psi_n$ は $Z_2$ 個の電子の位置座標 $(r_1, r_2 \ldots r_{Z_2})$ の関数である．なお，イオン・電子衝突では換算質量は電子質量とみなせるので ($M_\mathrm{r} \simeq m_\mathrm{e}$)，(182) の右辺では $m_\mathrm{e}$ を用いている．

まず，$f_1$ の $\phi$ 依存性について検討しておく [7]．(182) において $\psi_0, \psi_n$ が球対称な波動関数 (例えば水素原子の 1s, 2s 状態) であれば，$f_1$ は $q = |q|$ の関数であり，$\theta$ には依存するが $\phi$ 依存性は持たない (図 28 参照)．実際，$\phi$ 依存性は $\psi_0, \psi_n$ のいずれかが角運動量を持つ状態 (例えば水素原子の 2p 状態) であるときに問題となる．しかしながら，阻止能の計算では励起断面積と励起エネルギーの積の総和のみが分かればよいので，各励起準位への遷移の割りあいは知る必要がない．そこで，$|f_1|^2$ を求める際に，始状態の角運動量の向きで平均し，終状態の角運動量の向きに関して和をとる操作を行うことにすれば，$|f_1|^2$ は $\phi$ に依存しなくなることが示される (詳細は文献 [7])．この操作は，$|f_1|^2$ を $q$ の向きで平均化して均一物質の励起を扱うことに対応している．以上のことから，(180) で $\phi$ についての積分を行って $\mathrm{d}\Omega = 2\pi\sin\theta\,\mathrm{d}\theta$ と書ける. $K_1 \simeq K$ の条件では

$$q^2 = K^2 + K_1^2 - 2KK_1\cos\theta \tag{184}$$

の関係から $q\mathrm{d}q = K^2\sin\theta\,\mathrm{d}\theta$ したがって $\mathrm{d}\Omega = 2\pi q\mathrm{d}q/K^2$ と表される．ここで新たなパラメータとして波数 $q$ の自由電子の運動エネルギー $Q$，すなわち

$$Q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_\mathrm{e}} \tag{185}$$

を導入して，$d\Omega = (2\pi m_e/\hbar^2 K^2)dQ$ と表し，$\hbar K = M_r V \simeq m_e V$ の関係を用いれば

$$d\sigma_n \quad = \quad \frac{Z_1^2 e^4}{8\pi\varepsilon_0^2 m_e V^2} |\langle\psi_n|\sum_j^{Z_2} e^{iqr_j}|\psi_0\rangle|^2 \frac{dQ}{Q^2} \tag{186}$$

が得られる．§11.1 で述べた事柄により，(170) に相当する阻止能の表現は

$$\frac{dE}{dx} = N\sum_n (E_n - E_0) \int_{Q_{min}}^{Q_{max}} \frac{d\sigma_n}{dQ} dQ \tag{187}$$

である．ここで $E_0, E_n$ はそれぞれ $\psi_0, \psi_n$ に対応する準位エネルギーであり，$Q_{min}$ および $Q_{max}$ は各 $E_n$ についての $Q$ の最小値と最大値を表す．(186), (187) により, 阻止能は

$$\frac{dE}{dx} = \frac{Z_1^2 e^4 N}{8\pi\varepsilon_0^2 m_e V^2} \sum_n \int_{Q_{min}}^{Q_{max}} F_n(q) \frac{dQ}{Q} \tag{188}$$

と表される．ここで，$F_n(q)$ は

$$F_n(q) = \frac{2m_e(E_n - E_0)}{\hbar^2 q^2} |\langle\psi_n|\sum_j^{Z_2} e^{iqr_j}|\psi_0\rangle|^2 \tag{189}$$

で表される無次元の量である. 前に述べたように (189) では $|f_1|^2$ の $\phi$ 依存性を回避するために，始状態の角運動量の向きで平均し，終状態の角運動量の向きに関して和をとる操作が施されていることに注意したい. $F_n(q)$ は一般化振動子強度と呼ばれる.

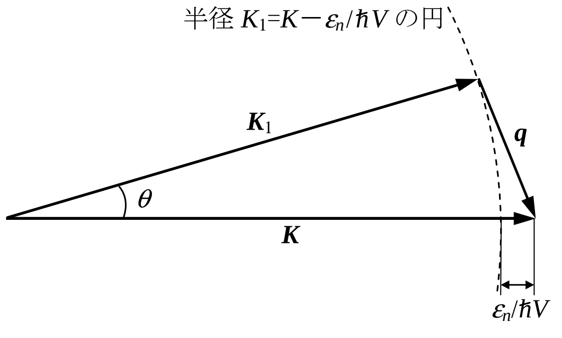


図 28: 与えられた $\varepsilon_n = E_n - E_0$ の値に対して可能な $q$ を求めるための作図．ベクトル $K_1$ の先端は半径 $K_1$ の円周上 (鎖線) を動くことができ，それに応じて $q$ が決まる．

次に (188) 中の $Q_{min}, Q_{max}$ を求める．電子の励起エネルギーはイオンの運動エネルギーから供給される，すなわち

$$E_n - E_0 = \frac{\hbar^2(K^2 - K_1^2)}{2m_e} \tag{190}$$

であるから，$K_1 \simeq K$ を用いれば

$$K - K_1 = \frac{m_e(E_n - E_0)}{\hbar^2 K} = \frac{E_n - E_0}{\hbar V} \tag{191}$$

と書ける．ここで，$K, K_1, q, \theta$ の関係は図 28 のようになるので，$q$ は $\theta = 0, \pi$ のときそれぞれ最小値 $(E_n - E_0)/\hbar V$, 最大値 $K + K_1 \simeq 2K$ になる．したがって (185) により

$$
\begin{aligned}
Q_{\min} &= \frac{(E_n - E_0)^2}{2m_e V^2}, &(192)\\
Q_{\max} &= 2m_e V^2 &(193)
\end{aligned}
$$

が得られる．$Q_{\max}$ は自由電子との衝突におけるエネルギー移行の最大値に等しい [(226) 参照].

$Q_{\min}, Q_{\max}$ が決まったので (188) の積分を行うことになるが，その時に利用する一般化振動子強度 $F_n(q)$ の性質をまとめておこう (詳細については文献参照 [7, 34])．まず，$q \to 0$ のときの $F_n(q)$ は原子による光の吸収・放出を摂動論で扱う際に，原子の各準位の関与の比率を表す物理量である光学的振動子強度，

$$
f_n = \frac{2m_e(E_n - E_0)}{3\hbar^2} |\langle \psi_n | \sum_j^{Z_2} r_j | \psi_0 \rangle|^2 \tag{194}
$$

に一致する (例題 11.2–1)．さらに，$F_n(q)$ をすべての可能な終状態について加えると原子内の電子数に等しい，すなわち

$$
\sum_n F_n(q) = Z_2 \tag{195}
$$

という総和則 (sum rule) が成り立つ．その特別な場合 $(q \to 0)$ として，$f_n$ に関しても

$$
\sum_n f_n = Z_2 \tag{196}
$$

という総和則が成り立つ．

準備が整ったので (188) の計算に入る．その際の $Q$ の積分区間, および $E_n$ の和をとる範囲を図 29 に模式的に示す．ここであらためて "高速" の意味を (192), (193) により表すと $Q_{\min} \ll Q_{\max}$, あるいは $E_n - E_0 \ll 2m_e V^2$ である．したがって，$E_n - E_0$ には上限値が存在し,[19] その値と $Q_{\min}$ の曲線との交点を P とすれば，図 29 に示すような $Q_0$ という値が存在する．なお，$Q_0$ は計算の便宜上導入された量で，最終的には阻止能式に入ってこない．これらの条件下で (188) の $n$ に関する和と積分を

$$
\sum_n \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} F_n(q) \frac{dQ}{Q} = \sum_n \int_{Q_{\min}}^{Q_0} F_n(q) \frac{dQ}{Q} + \int_{Q_0}^{Q_{\max}} \sum_n F_n(q) \frac{dQ}{Q} \tag{197}
$$

のように 2 つに分けて扱うことにする．(197) の右辺第 1 項では $Q_{\min}$ が $n$ に依存するので，第 2 項のように $n$ に関する和と積分の順序を入れ替えられないことに注意．まず，第 1 項の積分区間では $Q \simeq 0\, (q \simeq 0)$ であるから

$$
\sum_n \int_{Q_{\min}}^{Q_0} F_n(q) \frac{dQ}{Q} = \sum_n f_n \int_{Q_{\min}}^{Q_0} \frac{dQ}{Q} = \sum_n f_n \left[ \ln(2m_e V^2 Q_0) - \ln(E_n - E_0)^2 \right] \tag{198}
$$

のように表される. ここで，(196) の総和則を用いると，(198) の括弧内の第 1 項は

$$
\sum_n f_n \ln(2m_e V^2 Q_0) = \ln(2m_e V^2 Q_0) \sum_n f_n = Z_2 \ln(2m_e V^2 Q_0) \tag{199}
$$

[19] 本節の冒頭で述べたように，ここでの $E_n$ は連続状態を含むことに注意.

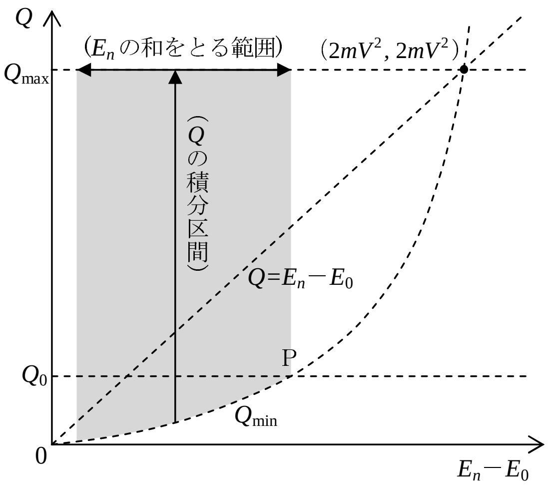


図 29: (188) の $Q$ の積分区間, および $E_n$ の和をとる範囲の模式図.

と書ける． さらに，“平均励起エネルギー”$I$ を

$$\ln I = \frac{1}{Z_2}\sum_n f_n \ln(E_n - E_0) \tag{200}$$

で定義すれば，(198) の括弧内の第 2 項は

$$\sum_n f_n \ln(E_n - E_0)^2 = 2Z_2 \ln I \tag{201}$$

と表される．次に，(197) の第 2 項については (195) の総和則を用いると

$$\int_{Q_0}^{Q_{\max}} \sum_n F_n(q) \frac{\mathrm{d}Q}{Q} = Z_2 \ln \frac{Q_{\max}}{Q_0} \tag{202}$$

が得られる．こうして (188) から Bethe の阻止能公式,

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = \frac{Z_1^2 e^4 N Z_2}{4\pi\varepsilon_0^2 m_{\mathrm{e}} V^2} L\,, \tag{203}$$

$$L = \ln \frac{2m_{\mathrm{e}}V^2}{I} \tag{204}$$

が得られた．この公式はパラメータ $Q_0$ には依存しないことに注意したい．(204) は半古典モデルによる (179) の正確な表現に相当する．なお，相対論効果まで含めた阻止能式は Bethe-Bloch 公式と呼ばれ

$$L = \ln \frac{2m_{\mathrm{e}}V^2}{I} - \ln(1-\beta^2) - \beta^2 \tag{205}$$

と書かれる．ただし, $\beta = v/c$ である．

ここで $I$ の値を考察しておく [35]．§6.2 で述べたように，重い原子に対してはトーマス・フェルミモデルが適用できるであろう．このモデルによれば，原子内電子の平均半径 $\bar{r}$ および平均速度 $\bar{v}$ はそれぞれ $\bar{r} \propto Z_2^{-1/3}$ (§6.2.2), $\bar{v} \propto Z_2^{2/3}$ (§6.2.3) のような依存性を持つ．原子の平均固有振動数は $\bar{v}/\bar{r}$ の程度であるから，$I \sim \hbar\bar{v}/\bar{r} \propto Z_2$ となることが導かれる．計算によれば，重い原子に対して $I \simeq 10Z_2$ (eV) であることが示されている [9, 36].

高速荷電粒子の阻止能が物質の性質を表すパラメータ $N, Z_2, I$ によって書かれること，あるいは $M_1$ に依存しないこと等は半古典的な扱いによっても理解できることに注目したい．後者の性質は (174) に見ることができる．(204) において $2m_\mathrm{e}V^2 \leq I$ では $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$ は 0 または負になる．これは高速近似が不適切なためである．このような速度領域における阻止能の計算では次節で述べるような扱いが必要になる．

**例題 11.2–1** $\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr_j} = 1 + \mathrm{i}qr_j$(双極子近似) により, (189) から (194) を導け.

波動関数の直交性により $\langle\psi_n|\psi_0\rangle = 0$ であるから

$$\langle\psi_n|\sum_j^{Z_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr_j}|\psi_0\rangle = \langle\psi_n|\sum_j^{Z_2}\mathrm{i}qr_j|\psi_0\rangle = \mathrm{i}q\langle\psi_n|\sum_j^{Z_2}r_j|\psi_0\rangle \tag{206}$$

と表される．ここで $\langle\psi_n|\sum_j^{Z_2}r_j|\psi_0\rangle$ はベクトルであるが，その方向に対する $q$ の角度を $\alpha$ とおけば

$$|\langle\psi_n|\sum_j^{Z_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr_j}|\psi_0\rangle|^2 = q^2\cos^2\alpha\,|\langle\psi_n|\sum_j^{Z_2}r_j|\psi_0\rangle|^2 \tag{207}$$

と書ける．さらに，$\cos^2\alpha$ を方位の平均値，すなわち

$$\frac{1}{4\pi}\int_0^\pi \cos^2\alpha \times 2\pi\sin\alpha\,\mathrm{d}\alpha = \frac{1}{3} \tag{208}$$

で置き換えれば (194) を得る.

## 11.3　低速荷電粒子の阻止能

低速荷電粒子は物質を通過する際に電子の捕獲と損失を繰り返し，平均的にほぼ中性原子の状態で運動している (§9)．この様子はベルトコンベアで小石を移動させたり，あるいは「動く歩道」が人を運ぶのに似ている．すなわち，最初静止していた電子 (小石) は荷電粒子 (ベルト) から離れるときには荷電粒子と同じ速度 ($V$) になっているので，運動量 $m_\mathrm{e}V$ を連続的に持ち去ることになり，これに単位距離進む際の損失電子数を掛ければ，イオンのエネルギー損失 (ベルトコンベアの仕事量) になる．したがって捕獲と損失による電子の入れ替えが $V$ に強く依存しなければ阻止能 (=ブレーキ力) はほぼ $V$ に比例することが予測される．

実際，Firsov は上記のような考え方に基づき Thomas–Fermi モデル (§6.2) を使って $V$ に比例する形の阻止能公式を最初に導いた [37, 21]．しかし，Firsov 公式は実験値を正確に再現できないため，例えば半導体などへのイオン注入技術では Thomas-Fermi モデルに基づく低速イオンの LSS 阻止能公式[20]

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = \frac{8\pi e^2 a_0 N}{\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_1^{7/6}Z_2}{\left(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3}\right)^{3/2}}\cdot\frac{V}{v_0} \tag{209}$$

が用いられることが多い [38].

低速イオンの阻止能の理解には，物質中の自由電子あるいは外殻電子との相互作用に関して Firsov, LSS の扱いよりも一般性を持つ，すなわち低速から高速領域まで使用できる誘電応答モデ

[20]公表された論文の著者 Lindhard, Scharff, Schiøtt のイニシャルから命名された.

ルが重要である．このモデルについては §14.4, 14.5 で取り上げるので，ここでは簡単に触れるに留める．荷電粒子は物質中を通過する際に，そのクーロン場 (あるいは遮へいクーロン場) で物質中の自由電子あるいは外殻電子の集団的な移動を起こさせる．その結果，イオンの周囲にはイオンの運動を減速させる電場が誘起され，阻止能の原因となる．このような過程は物質の誘電応答という概念で扱われ，イオン・電子相互作用を誘電関数 (動的な誘電率) によって記述することができる [39, 21]．誘電応答モデルによれば，低速イオンに対する自由電子気体の阻止能は，Firsov, LSS の場合と同じく $V$ に比例することが導かれる [例題 14–2].

## 11.4 荷電粒子の核的阻止能

低速イオンでは，衝突時に電子系をあまり励起することなく，運動エネルギーは相手原子の並進運動エネルギーへ移行する．したがって，低速領域では核的阻止能は電子的阻止能よりも大きい値となる．重イオンの衝撃による金属・半導体の損傷あるいは物理的スパタリング現象 (あるいはイオンビームによるマイクロ・ナノ切削加工) の多くは核的阻止能と関連付けられる.[21]

核的阻止能は Thomas–Fermi ポテンシャルあるいは §6.3 に述べた遮へいポテンシャルを用いて計算することができる．重心系の散乱角が衝突径数とスクリーニング長の比 $b/a$ に依存することと，小さい散乱角が阻止能に主な寄与をすることを考慮すれば，重心系の散乱角と衝突径数の関係は (51) を修正した形で

$$\frac{\theta}{2} = \frac{R_\mathrm{c}}{2b} g_\mathrm{sc}(b/a) \tag{210}$$

と書ける.[22] $0 < g_\mathrm{sc} \leq 1$ は遮へい効果を表す項で $b/a$ の関数であり，$g_\mathrm{sc} = 1$ のときクーロン散乱 [(51) で小角の場合] になる.

$$\varepsilon = \frac{a}{R_\mathrm{c}} = \frac{4\pi\varepsilon_0 aE}{Z_1 Z_2 \mathrm{e}^2} \cdot \frac{M_2}{M_1 + M_2} \tag{211}$$

により無次元の “還元されたエネルギー” $\varepsilon$ を導入すると

$$\frac{\varepsilon\theta}{2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{g_\mathrm{sc}(b/a)}{b/a} \tag{212}$$

となるから，(212) を $b/a$ について解き

$$b/a = \mathscr{F}(x)\,, \tag{213}$$

$$x = \varepsilon\theta/2 \tag{214}$$

と表すことにする．(33) を用いれば

$$\mathrm{d}\sigma = 2\pi b\,\mathrm{d}b = 2\pi a^2 (b/a)\,\mathrm{d}(b/a) = 2\pi a^2 \mathscr{F}(x)\mathscr{F}'(x)\,\mathrm{d}x \tag{215}$$

が得られる．さらに (29) により

$$T = T_\mathrm{m} \cdot (\theta/2)^2 = T_\mathrm{m} \cdot (x/\varepsilon)^2 \tag{216}$$

[21]散乱カスケードが線形 (熱スパイクを伴わない) であれば核的阻止能で説明される．

[22](210) は，実験室系の散乱角 $\theta_1$ に関する (133) を，重心系の散乱角 ($\theta$) に関して書いたものに相当する．

であるから，(170)，(215)，(216) より

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} &= N_0\int T_\mathrm{m}\cdot(\frac{x}{\varepsilon})^2\,\mathrm{d}\sigma \\ &= N_0T_\mathrm{m}\pi a^2\cdot\mathscr{H}(\varepsilon)\end{aligned} \tag{217}$$

ただし，

$$\mathscr{H}(\varepsilon)=\frac{1}{\varepsilon^2}\int_0^\varepsilon x^2\frac{\mathrm{d}[\mathscr{F}(x)]^2}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x \tag{218}$$

となる．$\mathscr{F}(x)$ は用いたポテンシャルの遮へい関数 [例えば (112)] のみによって決まる関数であるから，パラメータ $Z_1,Z_2,M_1,M_2,E$ に依存しない．したがって $\mathscr{H}(\varepsilon)$ を一度計算して数表化しておけば，核的阻止能 (217) は簡単に求められる．実際このような数表 (グラフ) を Lindhard らが作成している．

核的阻止能は低速重イオンでは顕著である．図 26 で，H と Ar 入射の場合を比較すれば，低速重イオンに対する核的阻止能の大きさが理解される．

## 11.5 阻止能の補足事項

### 11.5.1 阻止能の Bragg 則

一般に，高速領域のイオンに対する化合物の阻止能は個々の原子の阻止能を加えたものになる．例えば 3 元素化合物 $A_mB_nC_\ell$ の阻止能 $(\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_\mathrm{ABC}$ は, 個別の阻止能 $(\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_\mathrm{A}$ 等を用いて

$$\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_\mathrm{ABC}=\frac{1}{m+n+\ell}\cdot\left[m\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_\mathrm{A}+n\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_\mathrm{B}+\ell\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_\mathrm{C}\right] \tag{219}$$

と表される．これを阻止能の Bragg 則と呼ぶ．低速イオンの阻止能は Bragg 則を満たさない．これは価電子の阻止能への寄与が相対的に大きいためである．

### 11.5.2 イオン荷電状態と阻止能

阻止能は物質中でのイオンの荷電状態 (§9) に依存する．核子あたり 1MeV 以下の軽イオン (H, He 等) では平衡荷電状態に達する距離はナノメータ程度であるから，これより長い距離を扱う際には，阻止能は平衡荷電状態での値とみなすことができる．一般に，平衡荷電状態が部分電離状態であれば，イオンの周囲は遮へいクーロン場 (§6.3) になる．特に遮へいが内殻電子のみによる場合は，イオンの核電荷 ($Ze$) をこれより小さい “有効電荷”に置き換えたクーロン場とみなす扱いが可能である. イオン後方散乱分析 (§12) において，平衡荷電状態に達する距離よりも浅い表面近傍を問題にする場合は，阻止能がイオン荷電状態に依存することを考慮する必要がある．

### 11.5.3 阻止断面積の $Z_1,Z_2$ 振動

低速イオンに対する物質の阻止断面積はイオンの原子番号 ($Z_1$) に関して元素の周期律表と同じ周期で変化する [40, 20]．特に，チャネリング入射したイオンでは結晶の外殻電子との相互作用が支配的であるため，阻止断面積の顕著な $Z_1$ 振動が見られる [41]．また阻止断面積の振動は標的の原子番号 ($Z_2$) に対しても観測される [21, 20].

## 12　イオン後方散乱分析

### 12.1　後方１回散乱過程

物質にイオン等の荷電粒子を入射させ，後方の大きい角度 $\alpha$ で散乱粒子を観測するとき，粒子は物質中でどのような経路を経て外に出るのだろうか．図 30 は物質内における粒子の経路について一回散乱過程と多重散乱過程の概念図を示す．図 30(a) のような後方１回散乱過程はイオンビームの後方散乱を利用する物質分析の基本原理として重要なので，ここでは後方１回散乱過程が成立するための条件を考察する．まずラザフォード散乱断面積が使用できる MeV/u 程度の軽イオンを念頭に置いて話を進めることにする．

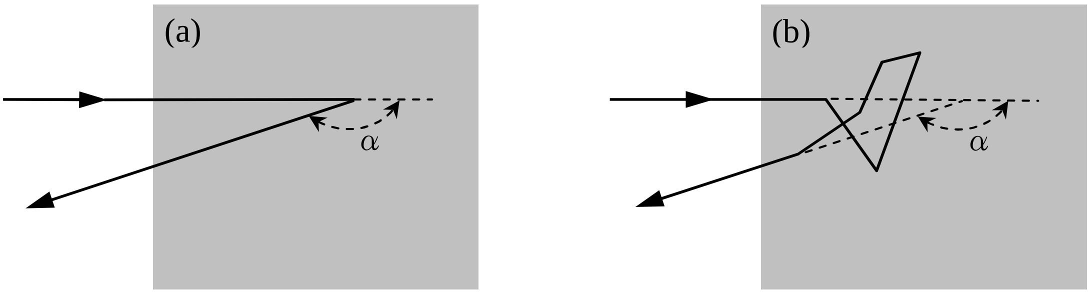


図 30: 物質に入射した荷電粒子の後方散乱過程の概念図．(a) １回散乱，(b) 多重散乱．

散乱角度が $\theta$ から $\pi$ の間の重心系ラザフォード積分断面積 $\sigma(\theta)$ が (60) により

$$\sigma(\theta) = \frac{\pi R_c^2}{4} \cot^2 \frac{\theta}{2}$$

のように与えられているので，これを用いることにする．(27) により，$\theta$ を実験室系での散乱角 $\theta_1$ に変換すれば $\sigma(\theta_1)$ は実験室系で $\theta_1$ から $\pi$ の間の積分断面積に等しい．

原子数密度 $N$ の物質中にイオンが入射したとき，微小な角度 $\Delta\theta_1$ よりも大きい角度の散乱に注目する．このとき

$$\lambda_s(\Delta\theta_1) = \frac{1}{N\sigma(\Delta\theta_1)} \tag{220}$$

は，角度 $\Delta\theta_1$ より大きい角度の散乱を受けることなく物質中を通過できる平均直進距離 (平均自由距離) である．したがって，図 30(a) における入射経路長と (後方散乱後の) 出射経路長の和を $L$ とするとき

$$\Delta\theta_1 \ll \alpha \quad , \text{かつ} \quad L < \lambda_s(\Delta\theta_1) \tag{221}$$

であれば，大角度へ放出されたイオンは物質内でただ 1 回の後方散乱 (生起確率は非常に小さいが) を受けたことになる．すなわち，それは図 30(a) のような後方１回散乱過程とみなせる．なお，$\Delta\theta_1$ はイオンの軌道をどの程度まで直進とみなすかの許容度を与えるパラメータであって，その設定には任意性がある．$\Delta\theta_1 \to 0$ のとき $\lambda_s(\Delta\theta_1) \to 0$ となることは明らかである．

例えば，1 MeV He が Si に入射する場合 $\Delta\theta_1 = 1^\circ$ ($\theta = 1.14^\circ$) にとると，$\lambda_s \simeq 1.2\,\mu$m となり，これは飛程 (Range) の 20%程度である．このような状況では固体中でのイオンの軌道を扱う際にエネルギー損失あるいは原子による多重散乱の影響を考慮する必要があるにしても，ほとんどの後

方散乱イオンは Si 中での 1 回散乱によって放出されると結論できる．他のイオン，物質の組み合わせに対しても類似の扱いが可能である．

以上の議論ではクーロンポテンシャルを用いたが，低速イオンの散乱あるいは小角度の散乱では遮へいクーロンポテンシャルを使う必要がある．その場合には，微分散乱断面積はラザフォード散乱の場合より小さくなるので，$\lambda_s$ は上記の見積もりより大きい値となる．

## 12.2 ラザフォード後方散乱分光

イオンの後方 1 回散乱過程に基づくラザフォード後方散乱分光 (Rutherford Backscattering Spectroscopy, RBS) に触れておく. RBS は核子あたり 0.1–1 MeV の $He^+$ 等の軽イオンを物質に入射させ，後方散乱測定によって表面あるいは表面近傍の元素分析，原子構造解析を行う標準的な方法である．RBS の特徴として，

- イオン・原子衝突が原子ポテンシャルの遮へい長 (∼0.1Å) より短い距離で起きるので，散乱強度はラザフォード散乱断面積で与えられる．
- したがって，散乱強度はイオンの荷電状態や電子状態によらない．
- イオンと標的原子の 2 体の弾性散乱を利用するので，標的原子の固体内結合状態についての情報は原理的に得られない (§15.2 参照).

等が挙げられる．

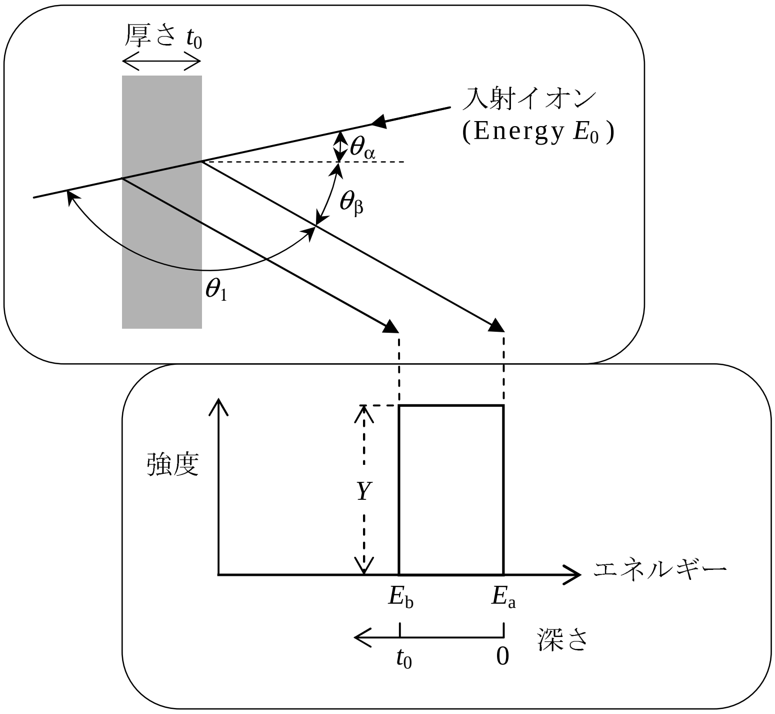


図 31: ラザフォード後方散乱分析法の測定原理

RBS の測定原理を薄膜試料の場合について図 31 に示す．角度 $\theta_1$ の方向で測定されたイオンのエネルギースペクトル上で $E_A, E_B$ はそれぞれ薄膜の表面原子および背面原子によって後方散乱を

受けたイオンのエネルギーである．後者は試料を通過した分だけエネルギーを損失している．深さ $t\,(0 \le t \le t_0)$ で角度 $\theta_1$ の後方散乱を受けて外部へ出たイオンのエネルギー $E(t)$ は

$$\begin{aligned} E(t) &= k\left[E_0 - \frac{t}{\cos\theta_\alpha}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)\right] - \frac{t}{\cos\theta_\beta}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right) \\ &= kE_0 - \left(\frac{k}{\cos\theta_\alpha} + \frac{1}{\cos\theta_\beta}\right)\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)t \end{aligned} \tag{222}$$

で表される．ここで $k$ は (23) で与えられている．図 31 において $E_\mathrm{a} = E(0), E_\mathrm{b} = E(t_0)$ であり，後方散乱エネルギーと試料深さは 1：1 に対応している．スペクトルの面積は薄膜内の原子数密度 $(N)$ および (55) のラザフォード微分散乱断面積を用いると，

$$(E_\mathrm{a} - E_\mathrm{b})\cdot Y \propto (\text{散乱イオンの数}) \propto N\cdot\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_1}, \tag{223}$$

すなわち

$$Y \propto \frac{N}{E_\mathrm{a} - E_\mathrm{b}}\cdot\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_1} \propto \frac{N}{\mathrm{d}E/\mathrm{d}x}\cdot\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_1} \tag{224}$$

の比例関係があるので，スペクトル強度 $Y$ は阻止能に反比例することがわかる．

以上は単原子種で構成される薄膜の場合であるが，複数の原子種を含む試料の後方散乱スペクトルは，複数の $k$ の値に対応するスペクトルの単純な重ね合わせである．試料が単結晶の場合，ビームを結晶軸方向に入射させると入射イオンのほとんどが結晶格子のすき間に沿って進行するため，後方散乱は起きにくくなる．これは §8.3 で述べたチャネリング効果である．このような条件では，結晶中に格子欠陥があれば後方散乱強度が増加するので，結晶性の評価 (characterization) にイオンチャネリングを用いることができる．

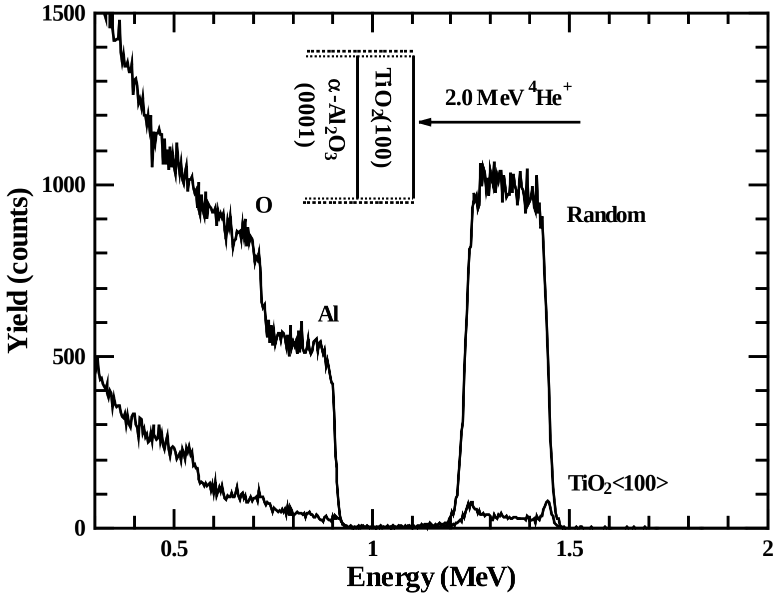


図 32: サファイア ($\alpha$–$Al_2O_3$) の (0001) 面上にエピタキシャル成長した rutile 型 $TiO_2$ 膜 (厚さ 5000 Å) の RBS スペクトル．2.0 MeV $^4He^+$ の 165° 後方散乱測定 [42].

図 32 はサファイア上にエピタキシャル成長した光触媒材料 $TiO_2$ 膜 (厚さ 5000 Å) の RBS による側定例で，$\langle 100\rangle$ チャネリング入射および非チャネリング (ランダム) 入射の場合のスペクトルを

示す．この実験条件での Ti, O に対する $k$ の値 [(23) 式] はそれぞれ 0.720, 0.366 であり，したがって表面に存在するこれらの原子からは，$kE_0 = 1.44, 0.731$ MeV に散乱収量が得られることになる．1.2–1.5 MeV の収量は $TiO_2$ 膜中の Ti により散乱された He によるものであり，0.9 MeV より低エネルギーの収量は $TiO_2$ 膜中の O からの散乱のほかにサファイア基盤中の Al, O によるものを含む．Al に対しては，$kE_0 = 1.11$ MeV であるが He は $TiO_2$ 層通過によるエネルギー損失分 (約 0.2 MeV) だけ低エネルギー側にずれている．アルミナ中の O はランダム入射のスペクトルでは明確に見えないが，チャネリング入射では $TiO_2$ 中の O からの収量が相対的に低下するため，0.55 MeV 付近の段差として認められる．特にチャネリング入射のスペクトルにより，$TiO_2$ の $\langle 100 \rangle$ 軸方向はサファイアの $\langle 110 \rangle$ 軸方向と一致し，チャネリングの規格化収量は $\chi_{min} \simeq 3\%$ であることから，良質な $TiO_2$ 単結晶が成長していることが結論される．

RBS の深さ分解能は，図 32 のような半導体検出器を用いる通常の計測方法では 100 Å 程度であり，これで十分な場合も多い．高分解能が必要な場合には磁場あるいは電場による偏向分析器が用いられる．特に，斜入射測定等の実験条件を適切に設定すれば，深さ分解能は 1 原子層に達し，基盤表面上に形成された薄膜の表面・界面分析が可能である [43].

## 12.3　180° 散乱強度の異常増加

アモルファス固体，多結晶 (あるいは結晶の非チャネリング方向) に MeV イオンを入射させ，後方 180° 付近の狭い角度領域 (180±0.1° 程度) で後方散乱スペクトルを測定すると，表面層近傍からの実効散乱断面積がラザフォード散乱微分断面積の 2–3 倍になることが知られている [44]. 図 33 に 0.5 MeV He イオンの多結晶 Pt による RBS 測定例を示す．なお，スペクトルは横軸を散乱深さとして表示されている．測定方向 178.5°(図の $\psi = 1.5°$) ではイオンの後方 1 回散乱過程による典型的なスペクトル形になっているが，179.918°(図の $\psi = 0.082°$) では表面近傍からの散乱強度は最大約 3 倍に増大している．

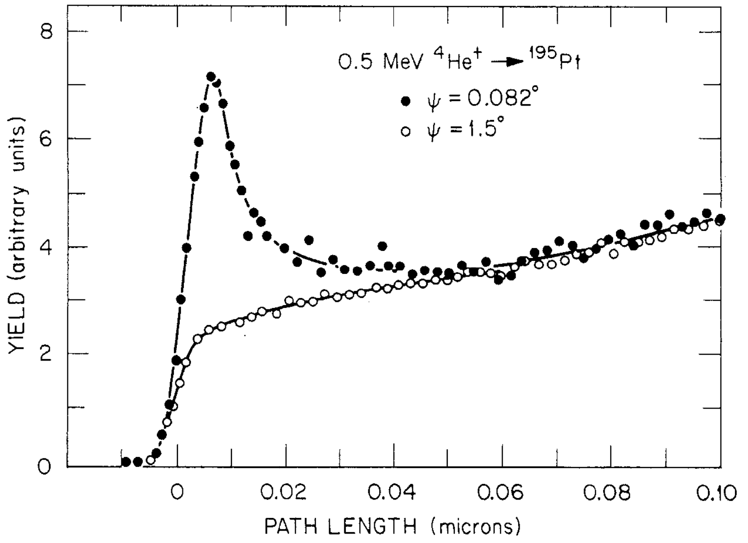


図 33: 多結晶 Pt による 0.5 MeV He イオンの 180° 近傍における後方散乱スペクトル [45].

この現象は，表面付近の原子によるクーロンシャドー形成の結果，表面層近傍において入射イオンフラックスが空間的に不均一になることに起因する．すなわち，イオンの入射方向から表面

近傍を見たときに，原子相互のすき間では入射時よりも実効的に強いフラックスが生成され，したがって表層下の多くの原子には収束されたイオンが入射している．このとき，入射方向と逆向きの経路を辿って 180° 方向へ放出されるイオンを考えると，それらは 2 体衝突の場合とは異なって図 34 に示すような複数の経路が可能である (180° 以外の方向ではこのような可逆経路は形成されにくい)．そのため 180° 方向では散乱強度が増大する．試料の深い位置 (MeV イオンに対して数 100 Å 以上の深さ) ではシャドーは相互に重なり合う状況になって消滅するため，イオンフラックスは固体内で均一になり，散乱強度の増大効果は見られなくなる．

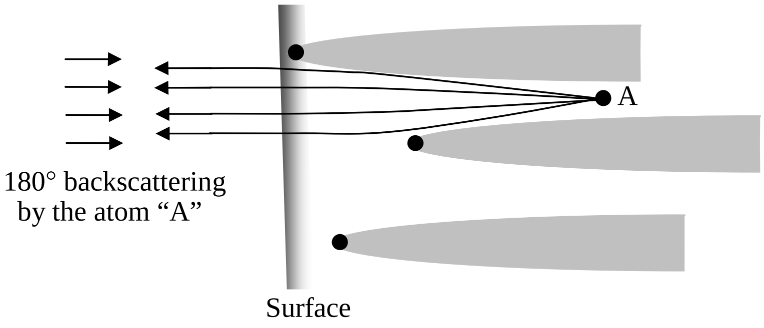


図 34: 後方 180° における RBS 強度増大の説明図

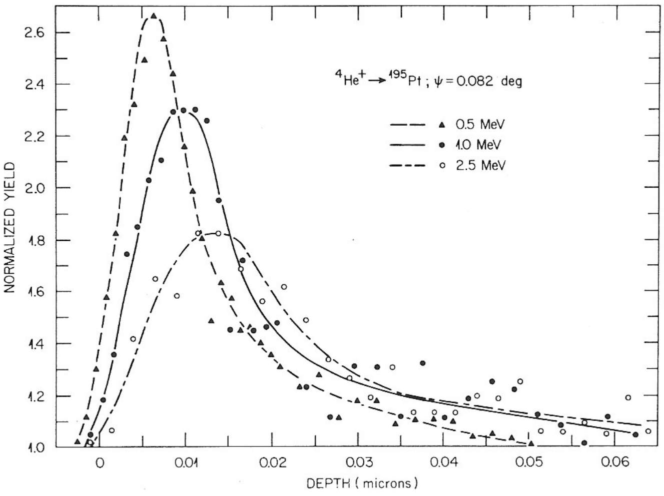


図 35: 後方 180° 強度増大ピークの入射エネルギー依存性．縦軸は増大ピークの無いスペクトル ($\psi \geq 1.5°$) に対する比 [45]．

図 35 は多結晶 Pt の $\psi = 0.082°$ における散乱強度増大ピークの入射エネルギー依存性を示す．ピークは He 入射エネルギーの増加とともに，試料の深い位置へ移動することがわかる．これは，He 入射エネルギーの増加につれてクーロンシャドーが細くなって [§7]，イオンフラックスはより深い位置で収束するようになり，このことを反映して散乱強度増大ピークは表面から深い位置で観測されることで説明される．このような効果の詳細はコンピュータシミュレーションによるイオン散乱軌道の解析により解明されている [46]．

## 13　イオン誘起電子放出

加速イオン (あるいは原子) が原子に衝突して電離が起きれば，電子が原子外に放出される．その際，イオンから相手電子への直接の運動エネルギー移行によって電離が起きる場合を運動学的電子放出 (kinetic electron emission), イオンまたは相手原子のエネルギー準位差のみで電離が起きる場合をポテンシャル電子放出 (potential electron emission) と呼ぶ．オージェ電子放出は後者の例であり，オージェ電子放出の過程自体には入射イオンのエネルギー等は無関係である．相手が固体の場合には，フェルミ準位近傍の固体内電子の遷移を介したポテンシャル電子放出が起きる．一般にボーア速度 (68) を大体の境界として，それ以上の速度領域のイオンでは運動学的電子放出が支配的であるのに対し，それに比べて十分遅い速度領域ではポテンシャル電子放出が主要となる．本書で扱う対象は前者である．

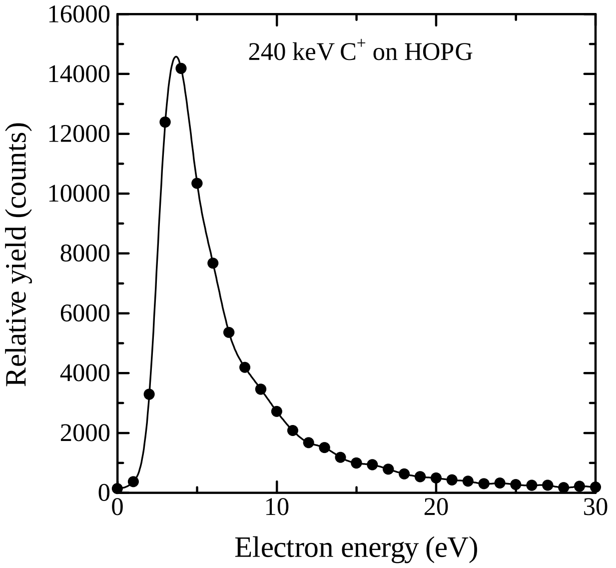


図 36: 240 keV の $C^+$(ボーア速度の 0.9 倍) の衝突により，高配向層状グラファイト (HOPG) 表面から試料後方 (180°) へ放出された電子のエネルギースペクトル [47].

固体からのイオン誘起 2 次電子放出 (主に運動学的放出) の一例として，ボーア速度程度の $C^+$ の衝突によってグラファイトから放出された 2 次電子のスペクトルを図 36 に示す．一般に，試料の後方で測定される 2 次電子スペクトルは測定角度にあまり依存せず，2–5 eV にピークを持ち，高エネルギー側に単調減少する長い尾を引いている．2 次電子の総数のほとんどを占めるのは数 10 eV 以下の放出電子であり，したがって 2 次電子電流値はそれらの低速電子放出に対応している．長い尾の部分にはオージェピーク，イオン・原子衝突に特有な過程で生成された電子によるピーク，あるいはそれらが固体内で弾性・非弾性散乱を受けて変形したものが重畳している (§13.1).

### 13.1　イオン・原子衝突による電子放出

イオン・原子衝突に特有な電子放出の過程は，気体ターゲットによる単回衝突条件下での実験から詳細を知ることができる．そのような実測例として，30 MeV $O^{5+}$ の衝突により，$O_2$ 気体ターゲットから発生した電子のエネルギースペクトルの測定角度依存性，および測定角 25° におけるスペクトルの入射イオン電荷依存性を図 37 に示す．図中の (T), (P) はそれぞれターゲット，イオ

ン (Projectile) から放出された電子であることを示す．イオンから発生する K–shell オージェ電子ピークはドプラー効果によって測定角依存性 (前方ほど高エネルギーにピークを持つ) を示すので，測定角依存性を持たないターゲット $O_2$ からのオージェ電子ピークと区別できる．オージェ電子ピーク以外にも，イオンと $O_2$ の外殻電子との 2 体衝突 (Binary collision) によるピーク，および $O^{5+}$ 自身の電離によって放出された電子による電子損失ピーク (Electron loss) が見られる．2 体衝突ピークのエネルギーは後述の (225) で与えられる．また電子損失ピークのエネルギーはイオンとほぼ同速度の自由電子の運動エネルギーに等しい [§13.4 参照]．なお，図 37(b) から明らかなように，$O^{6+}$に比べて$O^{4+}$，$O^{5+}$ の損失電子は急激に増加しており，それらが主に電離エネルギーの小さい L 殻の電離に起因することを示している．

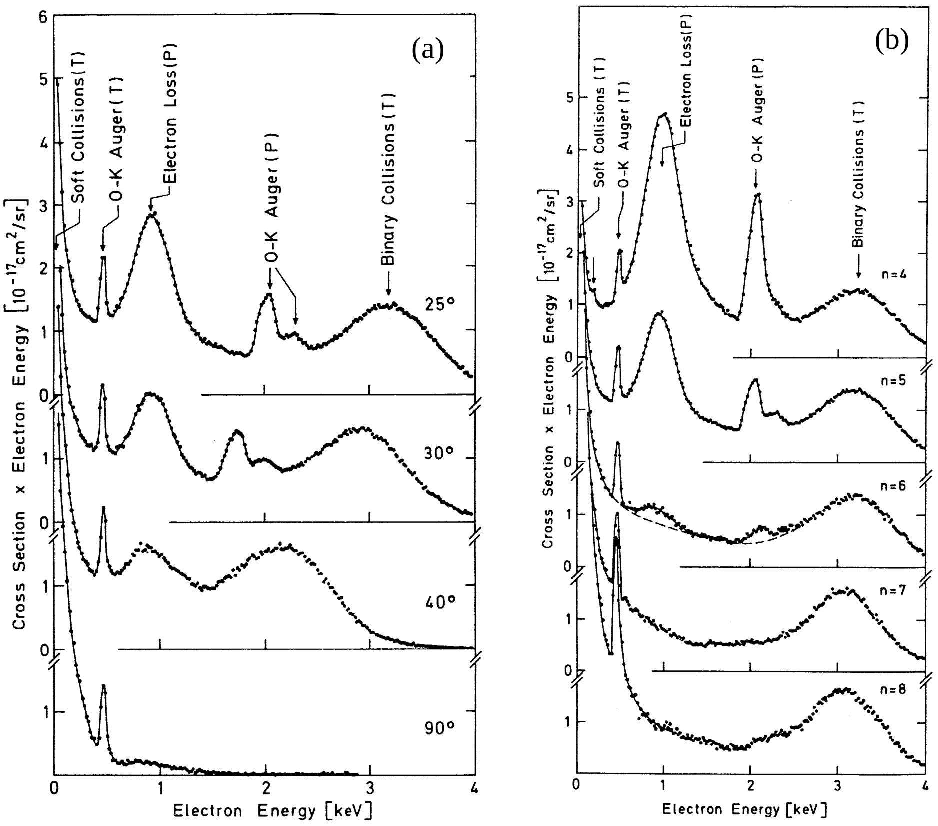


図 37: 30 MeV $O^{5+}$ と気体 $O_2$ との衝突により発生した電子の (a) エネルギースペクトルの測定角度依存性，および (b) 測定角 25° におけるスペクトルの入射イオン荷電依存性．[48, 49].

## 13.2 運動学的電子放出の 2 体衝突モデル

加速イオン誘起による原子からの運動学的電子放出をイオン・電子の 2 体衝突で近似するモデル (Binary encounter model) は，大きい運動量移行の結果として生じる 2 次電子の生成過程の記述に適している [50, 51, 52]．実際，希薄な気体に加速イオンを入射させて測定される放出電子スペクトルとその角度依存性，すなわち 2 重生成断面積 (double–differential production cross section) の概略を説明できる．標的が固体の場合には，電離された電子は固体原子による弾性，非弾性散乱を受けた後に表面から放出されるので観測されたエネルギースペクトルを 2 体衝突モデルによる計算と直接比較することはできないが，固体内原子の電離過程についてはこのモデルを使用でき

る．2 体衝突モデルの詳細については多くの文献があるので，ここではその概要を述べることにする．

### 13.2.1　静止電子へのエネルギー移行

最初に，入射イオンと静止した自由電子との弾性衝突を実験室系で扱う．簡単のため，イオンは捕獲電子を持たないとし，原子番号を $Z_1$，質量を $M_1$，速度は $V_1$，したがって $E_1 = M_1V_1^2/2$ の運動エネルギーを持つとする．$m_e \ll M_1$ であるから，(20) により，電子の得る運動エネルギーは

$$T = \frac{4m_eM_1E_1}{(m_e+M_1)^2}\cos^2\varphi \simeq 2m_eV_1^2\cos^2\varphi \tag{225}$$

で与えられる．なお，電子の反跳角 $\varphi$ は $0 \le \varphi \le \pi/2$ の範囲にある．$T$ の最大値 $E_B$ は $\varphi = 0$ のときで

$$E_B = 2m_eV_1^2 \tag{226}$$

と書ける．$E_B$ を 2 体衝突ピークエネルギー (Binary-encounter peak energy) と呼ぶ．これは，イオンが気体あるいは薄膜を通過する際に前方 (0°) へ放出される電子のエネルギー分布が $E_B$ にピークを持つことによる [49]．(58) により，反跳された電子のエネルギー分布 $\mathscr{Y}_0$ は

$$\mathscr{Y}_0(T) = \frac{d\sigma}{dT} = \frac{Z_1^2e^4}{4\pi\varepsilon_0^2E_BT^2} \tag{227}$$

と表される．ただし，静止電子に対しては $0 \le T \le E_B$ である．MeV/u 領域のイオンから見れば，固体内の価電子あるいは外殻電子は静止電子とみなされるので，これらの電子への移行エネルギーは近似的に (227) で与えられる．

**問題 13–1** (28)，(51) を用いると，(225) の “古典力学風”表現 ($b$ で表す) として

$$T = \frac{2G^2}{m_eV^2}\frac{1}{b^2+(G/m_eV^2)^2} = \frac{4G^2}{b^2E_B+4G^2/E_B} \tag{228}$$

が得られることを示せ，ただし $G = Z_1e^2/4\pi\varepsilon_0$ である．

### 13.2.2　エネルギー移行と軌道速度

軌道速度の大きい内殻電子への移行エネルギーは $E_B$ を超えることがある．その理由はイオンとの相対速度が軌道速度よりも大きくなりうるためである．その際，電子が自由電子ではなく，内殻に束縛されている効果を考慮しなければならない．ここでは，２つの代表例すなわちイオン・電子の正面衝突および追突を考察しよう．イオンと軌道速度 $v_2$ の電子が互いに反対方向に走って来て正面衝突する場合，電子への移行エネルギー $T_+$ は

$$\begin{aligned} T_+ &= m_e(2V_1+v_2)^2/2 - m_ev_2^2/2 \\ &= E_B + 2m_eV_1v_2 \end{aligned} \tag{229}$$

で与えられる．対照的に，イオンが電子に追突する場合の移行エネルギー $T_-$ は

$$T_- = E_B - 2m_eV_1v_2 \tag{230}$$

となる．もちろん，$T_-$ は $V_1 > v_2$ のときだけ意味を持つ．電子は原子から離れる際に，束縛エネルギー $\mathscr{I}$ に相当する運動エネルギーを失うので，例えば，観測される最大運動エネルギー $E_{\max}$ は

$$E_{\max} = T_+ - \mathscr{I} \tag{231}$$

と書ける．

前方 0° への反跳の際の移行エネルギーに，$T_+$，$T_-$ の 2 つの値があることからわかるように，一般に電子が軌道速度分布を持つ場合，移行エネルギーと電子の反跳角の間には静止電子に対する (225) のような 1：1 の対応関係は成立しない．したがって，軌道電子の放出強度は $T$ と $\varphi$ についての 2 重微分断面積で表現される．2 重微分断面積を $\varphi$，すなわち立体角について積分すれば，全放出方向についてのエネルギースペクトルを求めることができ，これより内殻電離断面積等を求めることができる．

静止電子とは対照的に，軌道速度を持つ電子はイオンの進行方向に対して $\pi/2$ 以上の角度へも放出されうることに注意したい．この効果は，速い軌道電子が遅いイオンによって電離される場合に顕著であり，大きな運動量変化 (方向変化) と小さいエネルギー移行が特徴である [53].

### 13.2.3 軌道電子の電離

2 体衝突モデルでは，軌道電子の電離を，軌道速度と同じ速度の自由電子が入射イオンによってクーロン散乱される過程とみなす．したがって，相手の原子核によるクーロン力を無視しているため，イオン・電子の近接衝突に起因する高エネルギー電子の放出に対して良い近似である．図 38 において，加速イオンに固定された座標系から相手原子中の電子を見たとき，電子の速度は軌道速度とイオン速度とのベクトル差 $V_r$ で表される．もちろん，このときの電子の散乱はラザフォード微分散乱断面積で書かれる．

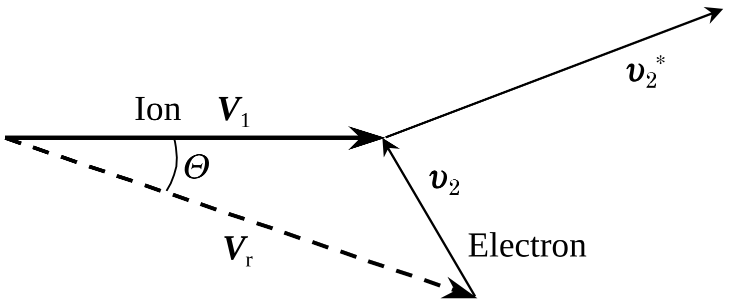


図 38: 入射イオン (速度 $V_1$) と軌道電子 (速度 $v_2$) の 2 体衝突

加速イオンに固定された座標系では散乱後の電子の速度は散乱前と同じ (弾性散乱) であるが，実験室座標系に変換すれば一般には衝突前後で運動量移行が生じるので非弾性散乱となる．運動量移行によって運動エネルギーが増せば原子軌道から飛び出る (電離) ことが可能になる．実際の計算においては，実験室座標系への変換は数学的に極めて込み入っているが，解析的な結果が得られる.[23]

[23] その計算には複数の研究者がチャレンジした経緯があり，計算ミスあるいは先人の公表結果に気づかずに公表された論文等々の指摘がある [52]. (236), (237) は，それらの研究者の共同成果とも言える．

まず，原子から放出される軌道電子のエネルギー $E_\mathrm{e}$ は，電子への移行エネルギーから $\mathscr{I}$ を引いたもの，すなわち

$$E_\mathrm{e} = T - \mathscr{I} \tag{232}$$

と表される．軌道速度 $v_2$ が方位に依らないとすれば，全放出方向についてのエネルギースペクトル $\mathscr{Y}_1(E_\mathrm{e})$ は

$$\mathscr{Y}_1(E_\mathrm{e}) = \begin{cases} 0 & (T < \mathscr{I}, T > T_+)\,, \\ \mathscr{Y}_0(T)\, f_\mathrm{A}(v_2) & (\mathscr{I} \le T \le T_-)\,, \\ \mathscr{Y}_0(T)\, f_\mathrm{B}(v_2) & (T_- \le T \le T_+) \end{cases} \tag{233}$$

のように表される [50, 52]．ここで，$T_+$ and $T_-$ は，それぞれ (229)，(230) で定義されている．また，$f_\mathrm{A}(v_2), f_\mathrm{B}(v_2)$ は

$$f_\mathrm{A}(v_2) \;=\; 1 + \frac{2m_\mathrm{e}v_2^2}{3T}\,, \tag{234}$$

$$f_\mathrm{B}(v_2) \;=\; \frac{m_\mathrm{e}v_2^2}{12T}\left[\left(\frac{2V_1}{v_2}\right)^3 + \left(1 - \sqrt{1 + \frac{2T}{m_\mathrm{e}v_2^2}}\right)^3\right] \tag{235}$$

で与えられる．当然のことであるが，$\mathscr{I} = 0$，すなわち $v_2 = 0$ のときは，$\mathscr{Y}_1(E_\mathrm{e})$ は $\mathscr{Y}_0(T)$ に一致する．

原子内電子の軌道速度の大きさは，束縛エネルギーに対応する期待値をほぼ中心としてその周囲に分布している．速度分布を $\mathscr{F}(v_2)$ とするとき，全放出方向についてのエネルギースペクトル $\mathscr{Y}_2(E_\mathrm{e})$ は，$v_\mathrm{c} = |(1 - T/E_\mathrm{B})V_1|$ を用いて

$$\mathscr{Y}_2(E_\mathrm{e}) = \begin{cases} \mathscr{Y}_0(T)\left[\int_0^{v_\mathrm{c}} f_\mathrm{A}(v_2)\mathscr{F}(v_2)\,\mathrm{d}v_2 + \int_{v_\mathrm{c}}^{\infty} f_\mathrm{B}(v_2)\mathscr{F}(v_2)\,\mathrm{d}v_2\right] & (\mathscr{I} < T \le E_\mathrm{B})\,, \\ \mathscr{Y}_0(T)\int_{v_\mathrm{c}}^{\infty} f_\mathrm{B}(v_2)\mathscr{F}(v_2)\,\mathrm{d}v_2 & (T \ge E_\mathrm{B}) \end{cases} \tag{236}$$

と表される．

### 13.2.4　水素様原子の電離

水素様原子の軌道電子に対しては，その速度分布 $F_0(v_2)$ は解析的に表される [§15.3, (346)]．したがって，(236) において $\mathscr{F}(v_2) = F_0(v_2)$ とおき，積分を実行すれば水素様原子に対する $\mathscr{Y}_2(E_\mathrm{e})$ を求めることができる．結果を表示するために，2 個の無次元パラメータ，$\alpha$ と $\omega$ を

$$\alpha \;=\; T/\mathscr{I} = 1 + E_\mathrm{e}/\mathscr{I}\,, \quad \omega = E_\mathrm{B}/\mathscr{I}$$

により定義する．さらに，

$$\beta = \frac{\omega}{4}\left(1 - \frac{\alpha}{\omega}\right)^2, \quad \alpha_1 = \alpha - 1\,, \quad \beta_1 = 1 + \beta\,, \quad \tau = \alpha + \beta$$

と表すことにする．これらのパラメータを用いて，水素様原子に対する $\mathscr{Y}_2(E_e)$ は

$$\mathscr{Y}_2(E_e) = \begin{cases} \mathscr{Y}_0(T)\,(\mathscr{S}_1+\mathscr{S}_2)/\pi\alpha & (\mathscr{I} < T \le E_B)\,, \\ \\ \mathscr{Y}_0(T)\,\mathscr{S}_2/\pi\alpha & (T \ge E_B) \end{cases} \tag{237}$$

と表現される．ここで,

$$\begin{aligned} \mathscr{S}_1 &= \frac{32\beta^{3/2}\alpha}{3\beta_1^3} + \left(\frac{4}{3}+\alpha\right)(\pi - 2\mathscr{R}_1)\,, \\ \mathscr{S}_2 &= \frac{16}{3\beta_1^3}\left(\frac{4}{3}\omega^{3/2} - \beta^{3/2}\alpha + \frac{\alpha\tau^{3/2}}{\alpha_1}\right) + \left(\frac{4}{3}+\alpha\right)\mathscr{R}_1 - \left(\frac{4}{3}+\frac{\alpha}{\alpha_1}\right)\mathscr{R}_2 \end{aligned}$$

であり，さらに $\mathscr{R}_1$，$\mathscr{R}_2$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} \mathscr{R}_1 &= \arctan\beta^{-1/2} + \frac{\beta^{1/2}}{\beta_1^3}\left(1+\frac{8\beta}{3}-\beta^2\right), \\ \mathscr{R}_2 &= \alpha_1^{-3/2}\ln\left(\frac{\tau^{1/2}-\alpha_1^{1/2}}{\beta_1^{1/2}}\right) + \frac{\tau^{1/2}}{\beta_1^3}\left(2+\frac{14\beta}{3}+\frac{8\alpha}{3}\right) + \frac{\tau^{1/2}}{\beta_1\alpha_1} \end{aligned}$$

を表す.

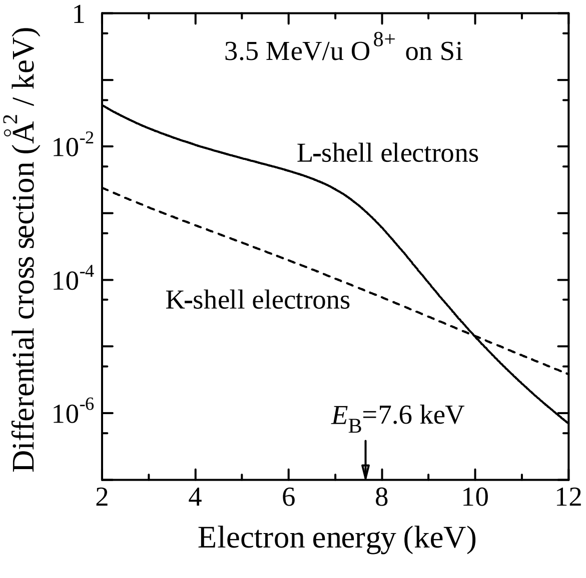


図 39: 3.5 MeV/u $O^{8+}$ による Si 原子の K, L 殻電子の電離 (反跳) 断面積 $\mathscr{Y}_2(E_e)$．K, L 殻それぞれの電子数 (2 および 8 個) を考慮した計算結果 [54].

図 39 に 3.5 MeV/u $O^{8+}$ 入射による Si 原子の K, L 殻電離に対する $\mathscr{Y}_2(E_e)$[(237) 式] を示す．ここで，Si の K 電子 2 個は $\mathscr{I} = 1839$ eV, L 電子 8 個のうち 2 個 ($L_1$) は $\mathscr{I} = 149$ eV，残りの 6 個 ($L_{2,3}$) は $\mathscr{I} = 99$ eV である．したがって，(電子の軌道速度)：(イオン速度）の比は L 殻電子に対しては 0.2–0.3 に過ぎない．このことを反映して，電離された L 殻電子のエネルギーは主に $E_B$ 以下の領域に分布し，ここでの $\mathscr{Y}_2(E_e)$ の値は，Si の価電子 (速度軌道 ≪ イオン速度) の場合に相当

する (227) の値にほぼ一致する (問題 13–3)．これとは対照的に，K 殻電子に対しては上述の速度比はほぼ 1 であり，軌道速度の効果により K 殻電子の $\mathscr{Y}_2(E_e)$ は $E_B$ を超えても急激には減少しないことがわかる．

**問題 13–2** $Z_1, \alpha, \omega$ を入力して (237) を計算するコンピュータプログラムを作成し，図 39 に示された結果を再現せよ．

**問題 13–3** 問題 13–2 において，L 電子 8 個を静止電子とみなして，(227) から 4 keV における電子スペクトル強度 (L 電子の電離による) を求め，図 39 の結果とほぼ一致することを確かめよ [答: $1.09 \times 10^{-2}$ Å$^2$/keV].

### 13.2.5 非水素様原子の電離

中性原子を含めた非水素様原子の電離を扱う場合には，個々の軌道電子の $\mathscr{F}(v_2)$ を求め，(236) により $\mathscr{Y}_2(E_e)$ を計算しなければならないが，一般には水素原子のような解析解は得られない．しかしながら，非水素様原子に対しても，$\mathscr{I}$ として束縛エネルギーの値を用いて計算された $\mathscr{Y}_2(E_e)$ により，少なくとも水素から Ar までの気体のイオン衝突電離の実験結果を大略説明できることが示されている [51].

### 13.2.6 電子スペクトルの $Z_1^2$ スケーリング

2 体衝突モデルによる電子スペクトルの (236)，あるいは (237) は入射粒子と軌道電子を規定する 3 個のパラメータ，$Z_1, \omega, \alpha$，すなわち $Z_1, V_1, \mathscr{I}$ で書かれている．これらのうち，スペクトルの形を特徴づけるのは $V_1$ と $\mathscr{I}$ である．なぜなら，$Z_1$ はスペクトルの形には無関係であり，単にスペクトル強度を $Z_1^2$ 倍にする効果しか持たない．実際，同速度で電子を束縛していない全電離イオン (fully stripped ion) の電離に対して，このような $Z_1^2$ スケーリングが成立する．部分電離イオン (partially stripped ion) の場合には，電離は遮へいクーロンポテンシャルを通じて起きるため $Z_1^2$ スケーリングは成り立たない．

## 13.3 固体ターゲットと $Z_1^2$ スケーリング

固体ターゲットでは，固体内原子の電離によって生成された 2 次電子は固体内で弾性・非弾性散乱を受けた後に表面から放出されるが，その際に，弾性・非弾性散乱によって更に生成された 2 次電子も含まれる（カスケードによる生成）．また，それらの電子は固体表面から外部へ脱出する際に，仕事関数 (3–5 eV) に等しい運動エネルギーを失う．しかしながら，観測されるスペクトルは $Z_1^2$ スケーリングを示すことは注目に値する．一例として，図 40 は，Si ターゲットに 3.75 MeV/u の種々のイオンビームを入射させ，180° 方向で測定された電子スペクトルを示す．縦軸は入射イオン数で規格化された電子収量をさらに $Z_1^2$ で割って示してある．$Z_1^2$ の値が 1($^2$H) から 289(Cl) までの広い範囲に対して，これらのスペクトルは 20%以内の精度で良く一致し，特に約 2 keV 以上の領域ではスペクトルの形が同じであることは，縦方向にずらして重ねてみれば理解される．この例は，$Z_1^2$ スケーリングが固体ターゲットについても成り立つことを示す.[24] これは線形システムの入力と出力の関係そのものと言える．すなわち，固体内原子から電離された直後の電子の運動量分布が §13.2.6 で述べた $Z_1^2$ スケーリングに従うために，弾性・非弾性散乱あるいはカスケード

[24]Si, Cl 等の重イオンは Si 中で完全に電離していないため $Z_1^2$ スケーリングから少しずれている．

生成等の過程があっても，表面から放出される電子のスペクトル強度はやはり $Z_1^2$ に比例するためである．

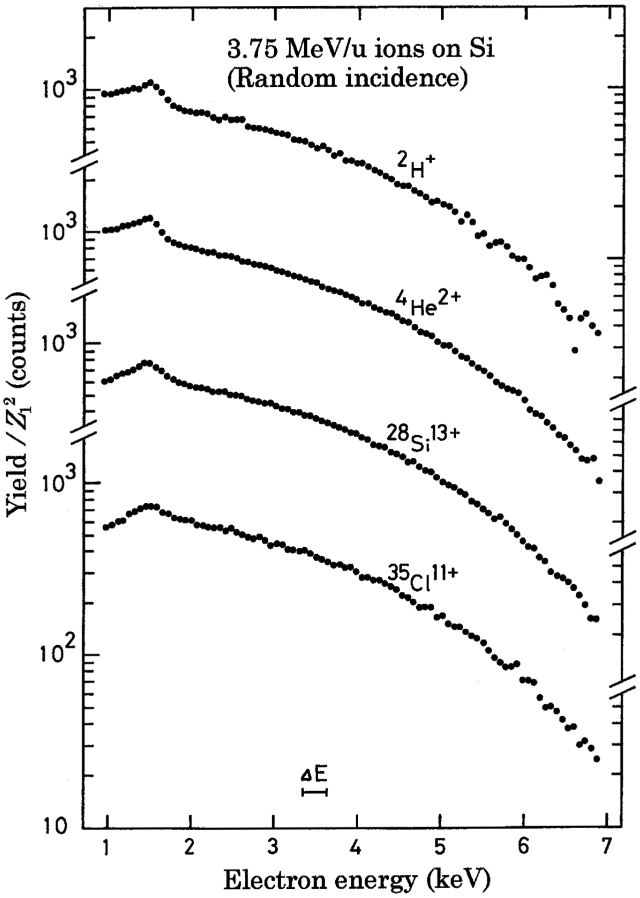


図 40: 3.75 MeV/u の重陽子, He, Si, Cl イオンを Si に入射 (非チャネリング方向) させ, 180° 方向で測定された規格化電子スペクトル．1.6 keV 近傍のピークは Si の KLL オージェ電子による [55].

## 13.4　0° 電子分光

すでに図 37 に示した前方 25° における電子スペクトルから予想されることであるが，気体あるいは薄膜を標的としてイオンビームを入射させ，前方 0° 方向で電子スペクトルを測定すると，スペクトルには ~$E_B$ のエネルギーに 2 体衝突電子によるピーク，およびイオンと同速度の自由電子の運動エネルギー $E_L$，すなわち

$$E_L = \frac{m_e V_1^2}{2} = \frac{E_B}{4} \tag{238}$$

にピークが観測される．後者は，イオンから電離した損失電子 (loss electron) あるいはイオンの連続エネルギー帯に乗ってイオンと一緒に走るコンボイ電子 (convoy electron) によるものである．

図 41 は，20 MeV の $Au^{15+}$ が He 気体中を通過する際に，0° 方向で観測された電子のエネルギースペクトルである．図中，下の 2 つのスペクトルは He 通過後の Au の電荷 (15+, あるいは 14+) とのコインシデンス測定によるものである (“TOTALS”は非コインシデンス測定による)．上の 2 つ

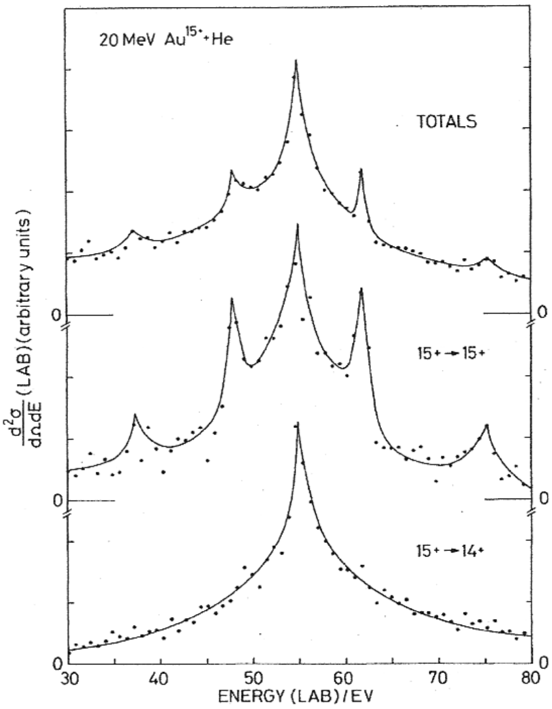


図 41: 20 MeVAu$^{15+}$ を気体 He に衝突させ，0° 方向で測定した放出電子のエネルギースペクトル．下 2 つのスペクトルはそれぞれ Au$^{15+}$，Au$^{14+}$ とのコインシデンス測定によるもの (“TOTALS”は非コインシデンス測定)[56].

のスペクトルでは $E_{\rm L} = 55.3\,\mathrm{eV}$ の鋭い損失電子ピークを中心に約 $\pm 7, \pm 20\,\mathrm{eV}$ に 2 対の電離電子ピークが現れている．これらは Au の自動電離 (autoionization) のためである.[25]

Au に固定された座標において，電離電子の放出速度を $v_{\rm i}$ とするとき，0°, 180° 方向に放出された電子の速度は，実験室系 (0° 電子分光測定系) ではそれぞれ $V + v_{\rm i}, V - v_{\rm i}$ であり，これらに相当する電子エネルギーが 1 対のピークを形成している．なお，Au$^{14+}$ とのコインシデンス測定にはそのようなピークが見られないことから，これらのピークは

$$\mathrm{Au}^{15+} + \mathrm{He} \to (\mathrm{Au}^{14+})^{**} + \mathrm{He}^{+} \to \mathrm{Au}^{15+} + \mathrm{He}^{+} + e^{-} \tag{239}$$

のように，まず He からの 1 電子捕獲によって Au の 2 重励起状態が作られ，その後に自動電離により Au の 1 電子が放出される過程が支配的であることが結論される．すなわち Au$^{15+}$ による He からの 2 電子捕獲 (Au$^{15+}$ → Au$^{13+}$) とその後の自動電離による 1 電子放出過程 (Au$^{14+}$ + He$^{2+}$ + $e^{-}$) は極めて弱いことがわかる．

この例のように，0° 電子分光は入射イオン静止系 (イオンに固定された座標系) における，原子衝突・散乱実験と等価である．また，$\sim E_{\rm B}$ のエネルギーに現れる 2 体衝突電子によるピークの 0° 電子分光は，入射イオン静止系における電子衝突・散乱実験と等価である．このように 0° 電子分光の実験から特に高電離状態にある原子による電子・原子・分子散乱データが得られることは注目に値する [53]. 参考のため，電子のエネルギースペクトルを実験室系から入射イオン静止系へ変換する表式を §15.4 に示す.

[25] オージェ過程において，内殻空孔へ遷移する電子よりも外側の殻から電子放出が起きる場合を自動電離と呼ぶ.

# 14　荷電粒子と固体の誘電応答

固体内に外部からイオン等の正荷電粒子を持ち込んで静止させると，その周囲には固体内電子の一部 (金属では自由電子) が集まり，正電荷のクーロン場を弱めるであろう．逆に，負荷電粒子が持ち込まれた場合には，周囲の電子密度が減少することによって負電荷のクーロン場を弱めるであろう．このような効果は固体内電子による静電遮へいと呼ばれる [57].

これに対し，外部から持ち込まれた荷電粒子が固体内を運動する場合には，遮へいの効果は荷電粒子の周囲の固体電子密度の “ゆらぎ”すなわち時間・空間変化を誘起することは想像できるだろう．その変化のしかた, すなわち誘電応答は低速イオンの阻止能，分子イオンの物質透過等に関わる基礎的なイオンビーム・固体相互作用のひとつであるが，その扱いは固体の光応答と本質的に同じである．また運動するイオンの周囲の自由電子の時間・空間変化は水面を進む船の後方に生成される波に似ていることから，ウェイク (wake，航跡) と呼ばれる．荷電粒子の誘電応答を扱うにあたり，まず電場中での固体電子の運動から考察する．

## 14.1　固体中のプラズマ振動

図 42 に示すように，固体内の板状の領域内の自由電子が板面に垂直な $y$ 方向に $s$ だけ変位したとする．固体の自由電子密度を $n_0$ とすれば，板の上, 下面にはそれぞれ分極電荷密度 $\mp n_0 es$ が生じるので，領域内には

$$E = \frac{n_0 es}{\varepsilon_0} \tag{240}$$

の電場が誘起される．電子の運動方程式は

$$m_\mathrm{e}\frac{\mathrm{d}^2 s}{\mathrm{d}t^2} = -eE = -\frac{n_0 e^2 s}{\varepsilon_0} \tag{241}$$

であるから，これらの自由電子は

$$\omega_\mathrm{p} = \sqrt{\frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m_\mathrm{e}}} \tag{242}$$

の角振動数 (プラズマ角振動数) で同位相の単振動をすることがわかる．

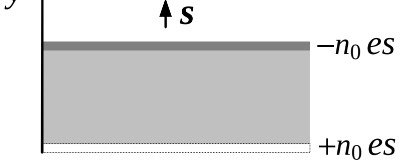


図 42: 自由電子の変位と分極電荷

荷電粒子のこのような集団運動をプラズマ振動という. なお，球形領域の電子変位に対しては プラズマ角振動数は $\omega_\mathrm{p}/\sqrt{3}$ となる [57]. また，誘電率の異なる物質の界面上では電子の面密度分布の時間揺らぎに対応する界面プラズマ振動が存在し，特に真空に接した表面ではプラズマ角振動数は $\omega_\mathrm{p}/\sqrt{2}$ であることが導かれる [例題 14–1].

**例題 14–1** 自由電子密度がそれぞれ $n_0, n_1$ の 2 種類の金属 A, B の界面におけるプラズマの角振動数 $\omega_{\rm int}$, および B の部分が真空のときの A の表面プラズマの角振動数 $\omega_{\rm s}$ はどのように表されるか？
**解答** 界面での電場および電束密度の接続条件に基づく説明は関連文献に与えられているので [57], ここでは直感的に答を予測しておく．A, B の界面上での電子密度は実質的に $(n_0+n_1)/2$ と見なせるから，(242) で $n_0 \to (n_0+n_1)/2$ に置き換えれば，$\omega_{\rm int}^2 = (\omega_{\rm p}^2 + \omega_{\rm p}'^2)/2$ が得られる．ただし，$\omega_{\rm p}' = \sqrt{n_1 e^2/\varepsilon_0 m_{\rm e}}$ は B のプラズマ角振動数である．B が真空の場合は $n_1 = 0$，したがって $\omega_{\rm p}' = 0$ であるから，$\omega_{\rm s} = \omega_{\rm p}/\sqrt{2}$ を得る．

## 14.2 振動電場と誘電関数

光 (電磁波) などの振動電場に対する誘電体中の電子の応答は，復元力と摩擦力の作用する古典力学モデルで大略説明される．振動電場による電子の変位を $u$ とし，復元力は $u$ に比例し，さらに摩擦力は時間 $t$ における変位速度 $\mathrm{d}u/\mathrm{d}t$ に比例すると仮定しよう．これらの仮定は微小で緩やかな振動に対応している．電子の運動方程式は

$$m_{\rm e}\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}t^2} = -\mu u - m_{\rm e}\eta\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} - eE(t) \tag{243}$$

と表される．ここで $\mu, \eta$ は定数，$E(t)$ は振動電場である．実際，光や運動する荷電粒子による誘電応答は，振動磁場によるローレンツ力を無視した (243) で扱うことができる (**例題 14–2**, **例題 14–3**)．角振動数 $\omega$ で振動する電場に対して，電子は追随運動すなわち同じ角振動数で分極すると考えられる．したがって，定数 $\alpha, \beta$ を用いて

$$E(t) = E_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t+\alpha)}, \tag{244}$$

$$u(t) = u_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t+\beta)} \tag{245}$$

のように複素数で表示しよう．ここで $E_0, u_0$ は振幅を表す．$E(t), u(t)$ は一般に位相が異なる (後者は遅れて応答する) ので $\alpha \neq \beta$ であることに注意したい．もちろん，これらの複素数表示において物理的に意味を持つのはそれらの実数部である．(244), (245) を (243) に代入してこの振動系の固有振動数

$$\omega_0 = \sqrt{\mu/m_{\rm e}} \tag{246}$$

を用いれば，

$$u(t) = \frac{-eE(t)}{m_{\rm e}(\omega_0^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\eta\omega)} \tag{247}$$

が得られる．

対象とする固体内領域では電場は位置によらず一定であるとして長波長 (波数 $k=0$) の光の応答を考察する．分極した電子の双極子モーメントは $eu(t)$ であるから，固体中で分極を起こす電子の密度を $n_{\rm p}$ とすれば，分極 $P$ は (247) により

$$P = -n_{\rm p} e u(t) = \frac{n_{\rm p} e^2 E(t)}{m_{\rm e}(\omega_0^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\eta\omega)} \tag{248}$$

と書ける．ところで，電束ベクトル $D$ と固体の誘電率 $\varepsilon$ は

$$D = \varepsilon_0 E + P = \varepsilon E \tag{249}$$

で関係付けられている．(249) はもともと静電場に対する関係式であるが，時間に依存する電場に対しても拡張して使用される． (249) により，$\varepsilon$ は $\omega$ の関数として

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 + \frac{n_\mathrm{p} e^2}{m_\mathrm{e}(\omega_0^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\eta\omega)} \tag{250}$$

と書かれる. このように角振動数の関数 (一般には波数ベクトルにも依存する) としての誘電率は誘電関数と呼ばれる．$\varepsilon$ の実部と虚部をそれぞれ $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ ($\varepsilon = \varepsilon_1 + \mathrm{i}\varepsilon_2$) とすれば

$$\varepsilon_1 = \mathrm{Re}\{\varepsilon(\omega)\} = \varepsilon_0 + \frac{n_\mathrm{p} e^2}{m_\mathrm{e}} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\eta\omega)^2}\,, \tag{251}$$

$$\varepsilon_2 = \mathrm{Im}\{\varepsilon(\omega)\} = \frac{n_\mathrm{p} e^2}{m_\mathrm{e}} \frac{\eta\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\eta\omega)^2} \tag{252}$$

となる.

特に金属中の自由電子や半導体の自由キャリアー (伝導帯の電子および価電子帯の正孔) に対しては復元力が働かないので，$\mu = 0$ すなわち $\omega_0 = 0$ であって，(250) は

$$\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 - \frac{\omega_\mathrm{p}^2}{\omega(\omega + \mathrm{i}\eta)} \tag{253}$$

となる．(253) による物質の光応答の扱いはドルーデ (Drude) モデルと呼ばれる.

誘電関数の虚部の持つ意味を示すために，電場が誘電体内で消費する仕事量 $W$ を求めてみよう．Maxwell の電磁気学によれば，振動電場は物質内に

$$I_\mathrm{p}(t) = \frac{\partial D(t)}{\partial t} = \varepsilon\,\frac{\partial E(t)}{\partial t} \tag{254}$$

で与えられる変位電流を生起する.[26] 複素数表示された $I_\mathrm{p}(t), E(t)$ のそれぞれの実部により，求める仕事量は

$$\begin{aligned} W &= \mathrm{Re}\{I_\mathrm{p}(t)\} \cdot \mathrm{Re}\{E(t)\} \\ &= -\omega E_0\,[\varepsilon_1 \sin(\omega t + \alpha) - \varepsilon_2 \cos(\omega t + \alpha)] \cdot E_0 \cos(\omega t + \alpha) \\ &= -(\omega/2) E_0^2\, \varepsilon_1 \sin 2(\omega t + \alpha) + \omega E_0^2\, \varepsilon_2 \cos^2(\omega t + \alpha) \end{aligned} \tag{255}$$

と表される.[27] 振動の 1 周期 $T = 2\pi/\omega$ についての $W$ の平均値 $W_\mathrm{av}$ を求めよう.

$$\frac{1}{T}\int_0^T \sin 2(\omega t + \alpha)\,\mathrm{d}t = 0\,,\quad \frac{1}{T}\int_0^T \cos^2(\omega t + \alpha)\,\mathrm{d}t = \frac{1}{2}$$

であるから

$$W_\mathrm{av} = \frac{1}{2}\omega E_0^2\,\varepsilon_2 = \frac{1}{2}\omega E_0^2\,\mathrm{Im}\{\varepsilon(\omega)\} \tag{256}$$

が得られる．すなわち，誘電体の単位体積に対して振動電場が単位時間にする仕事，言い換えれば誘電体が吸収するエネルギーが $W_\mathrm{av}$ である．結局，(243) において摩擦力を与えるパラメータ $\eta$

[26]真空の場合 ($D = \varepsilon_0 E$) の変位電流が実質的な仕事をしないことは自明なので，最初から $\partial D(t)/\partial t = \partial P(t)/\partial t$ として計算しても (256) が得られる.

[27]一般に，複素数 $Z$ に対して $(\mathrm{Re}\,\{Z\})^2 \neq \mathrm{Re}\,\{Z^2\}$ であり，$W$ は $E(t)$ の 2 次式なので複素数表示のままでは扱えない [58].

が $\mathrm{Im}\{\varepsilon(\omega)\}$ を介して $W_{av}$ を決定づけていることがわかる．

**例題 14–2** 自由空間の電磁波に対して，(243) では電磁波の磁束密度 $B(t)$ による電子の運動の効果は無視されている．その理由を示せ．
**解答** 自由空間の電磁波の関係 $|E(t)| = c|B(t)|$ を用いると，電子に働くローレンツ力に関して

$$e|v_e \times B(t)| \le e\frac{|v_e|}{c}|E(t)| \le e|E(t)| \tag{257}$$

を得る．ただし，$\mathrm{d}u/\mathrm{d}t = v_e$ と表した．物質内に閉じ込められた電子のとりうる運動エネルギーは高々10 eV ($|v_e|/c = 0.00626$) であるから，常に $|v_e|/c \ll 1$ である．したがって，(257) より磁気力は電気力に比べて無視できることがわかる．

## 14.3　誘電応答とフーリエ変換

一般に，波動は空間座標と時間座標が独立変数であり，それらに対応して波長 $\lambda$ と周期 $T$, あるいは，$\lambda, T$ の代わりに波数 $k = 2\pi/\lambda$ と角振動数 $\omega = 2\pi/T$ の組で波動が規定される．実際，フーリエ変換によれば，座標 $r(x,y,z)$ および時間 $t$ における任意の波動の変位 $\mathscr{A}(r,t)$ は

$$\mathscr{A}(r,t) = \int \mathrm{d}^3k \int \tilde{\mathscr{A}}(k,\omega)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)}\,\mathrm{d}\omega\,, \tag{258}$$

$$\tilde{\mathscr{A}}(k,\omega) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^3r \int \mathscr{A}(r,t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\omega t)}\,\mathrm{d}t \tag{259}$$

と書ける．すなわち，$\mathscr{A}(r,t)$ はいろいろな $k$ $(k_x, k_y, k_z)$ と $\omega$ の単振動の波を $\tilde{\mathscr{A}}(k,\omega)$ の割合で重ねたものに等しい．運動する荷電粒子の誘電応答の扱いでは，関連する物理量が単振動的に時間・空間変化するフーリエ成分を用いることにより，議論を進めることができる．

空間電荷密度 $\rho_{ext}$ の荷電粒子が固体中を走るときに誘起される分極電荷密度，電場および電束密度をそれぞれ $\rho_{ind}(r,t)$，$E(r,t), D(r,t)$ とすれば，それらは Maxwell の方程式より

$$\nabla D = \rho_{ext}(r,t)\,, \tag{260}$$

$$\nabla E = \rho_{sum}(r,t)/\varepsilon_0\,, \tag{261}$$

$$\rho_{sum}(r,t) = \rho_{ext}(r,t) + \rho_{ind}(r,t) \tag{262}$$

の関係を満たす．一般に，$\rho_{ind}(r,t)$ の符号は $\rho_{ext}(r,t)$ と逆になって，分極電荷は荷電粒子のクーロン場を弱める (遮蔽する)．ここで，$\rho_{sum}(r,t), E(r,t)$，$D(r,t)$（の各ベクトル成分) をフーリエ変換して (258) の形に書き，(260), (261) に代入すると

$$\mathrm{i}k\tilde{D}(k,\omega) = \tilde{\rho}_{ext}(k,\omega)\,, \tag{263}$$

$$\mathrm{i}k\tilde{E}(k,\omega) = \tilde{\rho}_{sum}(k,\omega)/\varepsilon_0 = [\tilde{\rho}_{ext}(k,\omega) + \tilde{\rho}_{ind}(k,\omega)]/\varepsilon_0 \tag{264}$$

が得られる．

ここで新たに，誘電関数 $\varepsilon(k,\omega)$ を

$$\tilde{D}(k,\omega) = \varepsilon(k,\omega)\tilde{E}(k,\omega) \tag{265}$$

により定義する. (263), (264) を用いると

$$\tilde{\rho}_{sum}(k,\omega) = \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(k,\omega)}\,\tilde{\rho}_{ext}(k,\omega) \tag{266}$$

の関係が成り立つ．電子気体の密度ゼロの極限(真空中)では $\varepsilon(k,\omega)=\varepsilon_0$ であるから，当然 $\tilde{\rho}_{\rm sum}(k,\omega)=\tilde{\rho}_{\rm ext}(k,\omega)$ になることに注意.

この荷電粒子の周囲に誘起される電磁場に関して，ベクトル・ポテンシャル $A(r,t)$ が $\nabla A=0$ を満たすように定めると，スカラー・ポテンシャルはポアソン方程式を満たす (このようなポテンシャル設定をクーロン・ゲージという [59])．そこで $\rho_{\rm ext}(r,t)$, $\rho_{\rm ind}(r,t)$，$\rho_{\rm sum}(r,t)$ によって生起されるポテンシャルをそれぞれ $\phi_{\rm ext}(r,t)$, $\phi_{\rm ind}(r,t)$, $\phi_{\rm sum}(r,t)$ とすれば，それらのフーリエ成分について

$$\varepsilon_0 k^2\tilde{\phi}_{\rm ext}(k,\omega) = \tilde{\rho}_{\rm ext}(k,\omega)\,, \tag{267}$$

$$\varepsilon_0 k^2\tilde{\phi}_{\rm ind}(k,\omega) = \tilde{\rho}_{\rm ind}(k,\omega)\,, \tag{268}$$

$$\varepsilon_0 k^2\tilde{\phi}_{\rm sum}(k,\omega) = \tilde{\rho}_{\rm sum}(k,\omega) \tag{269}$$

の関係が成り立つ．(266) および (264) を用いると

$$\tilde{\phi}_{\rm sum}(k,\omega) = \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(k,\omega)}\tilde{\phi}_{\rm ext}(k,\omega)\,, \tag{270}$$

$$\tilde{\phi}_{\rm ind}(k,\omega) = \tilde{\phi}_{\rm sum}(k,\omega)-\tilde{\phi}_{\rm ext}(k,\omega)=\left[\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(k,\omega)}-1\right]\tilde{\phi}_{\rm ext}(k,\omega) \tag{271}$$

の関係が得られる．(270) は，外部から電子ガス中に持ち込まれたポテンシャル $\tilde{\phi}_{\rm ext}(k,\omega)$ が誘電応答によって，真空中の場合の $\varepsilon_0/\varepsilon(k,\omega)$ 倍に弱められて $\tilde{\phi}_{\rm sum}(k,\omega)$ になるという動的遮蔽効果を表す.[28] (271) は固体内電子の移動によって生起されるポテンシャルを表しているから，真空中 $[\varepsilon(k,\omega)=\varepsilon_0]$ でゼロになることは明らかである．

**例題 14–3** 一定速度 $v$ で直進する電荷が周囲につくる電場 $E$ および磁束密度 $B$ は，位置 $r$ および時間 $t$ の関数として §15.5 に与えられている．この電磁場によって物質内の電子が運動するとき，$B$ の効果は無視できることを示せ.

**解答** 電子が速度 $v_{\rm e}$ で運動するとき，電子に働くローレンツ力に関して次の不等式が成り立つ．

$$e|v_{\rm e}\times B(r,t)|=\frac{e}{c^2}|v_{\rm e}\times(v\times E(r,t)|\le\frac{|v_{\rm e}|}{c}\cdot\frac{|v|}{c}\cdot|eE(r,t)| \tag{272}$$

ただし，(370) の関係を用いた．**例題 14–2** で述べたように，物質内の電子は $|v_{\rm e}|\ll c$ を満たし，かつ常に $|v|/c<1$ であることから，磁気力は電気力に比べて無視できることがわかる．

**問題 14–1** $E_1(r,t)=-\nabla\phi_{\rm sum}(r,t)$ とするとき，(270), (267) より

$$\tilde{E}_1(k,\omega)=\frac{-\mathrm{i}k\tilde{\rho}_{\rm ext}(k,\omega)}{k^2\varepsilon(k,\omega)} \tag{273}$$

を示せ．なお，$E_1(r,t)=E(r,t)+\partial A(r,t)/\partial t$ である．

## 14.4 荷電粒子の物質透過と誘電応答

$\varepsilon(k,\omega)$ の具体的な表式は次節 (§14.5) で扱うこととし，ここでは荷電粒子に対する誘電応答の結果としての阻止能，非弾性衝突の平均自由距離，あるいはウェイクが $\varepsilon(k,\omega)$ を用いてどのように表されるかを議論する. 実際に，中低速荷電粒子の場合，物質中の自由電子あるいは緩く束縛された電子との相互作用が主要な物理過程である．

[28] ここの “動的”とは $\omega$ に依存するという意味である．

### 14.4.1 誘電応答による阻止能

固体中を速度 $V$ で運動する電荷 $Z_1 e$ の粒子のエネルギー損失すなわち誘電応答による阻止能を $\varepsilon(k,\omega)$ で表してみよう．粒子の電荷すなわち $\rho_{\rm ext}(r,t)$ は

$$\rho_{\rm ext}(r,t) = Z_1 e\,\delta^3(r - Vt) \tag{274}$$

と書ける．ただし，$\delta^3(r - Vt) = \delta(x - V_{\rm x}t)\,\delta(y - V_{\rm y}t)\,\delta(z - V_{\rm z}t)$ の意味である．(259) を用いると

$$\tilde{\rho}_{\rm ext}(k,\omega) \;=\; \frac{Z_1 e}{(2\pi)^3}\frac{1}{2\pi}\int {\rm e}^{{\rm i}(\omega - kV)t}\,{\rm d}t = \frac{Z_1 e}{(2\pi)^3}\,\delta(\omega - kV) \tag{275}$$

が得られる (問題 14–2 参照)．ここで (273), (275) より

$$\tilde{E}_1(k,\omega) = \frac{Z_1 e}{(2\pi)^3}\cdot\frac{-{\rm i}k}{k^2\varepsilon(k,\omega)}\,\delta(\omega - kV) \tag{276}$$

となるので，フーリエ逆変換を行うと

$$E_1(r,t) = \frac{Z_1 e}{(2\pi)^3}\int {\rm d}^3k \int \frac{-{\rm i}k}{k^2\varepsilon(k,\omega)}\,\delta(\omega - kV)\,{\rm e}^{{\rm i}(kr - \omega t)}\,{\rm d}\omega \tag{277}$$

と表される．

粒子の位置 $r = Vt$ では電場は進行方向と逆向きであり，阻止能は粒子が電場に抗して単位距離だけ進む間の仕事 $\mathscr{W}$ に相当する．すなわち，

$$\mathscr{W} = -Z_1 e\frac{V}{V}\cdot\{E(r,t)\}_{r=Vt} = -Z_1 e\frac{V}{V}\cdot\{E_1(r,t) - \partial A(r,t)/\partial t\}_{r=Vt} \tag{278}$$

と書ける．粒子の位置における電磁場は定常状態であるから $\partial A(r,t)/\partial t = 0$ として，(277) を用いると

$$\mathscr{W} = \frac{(Z_1 e)^2}{(2\pi)^3 V}\int {\rm d}\omega \int \frac{{\rm i}kV}{k^2\varepsilon(k,\omega)}\,\delta(\omega - kV)\,{\rm e}^{{\rm i}(kV - \omega)t}\,{\rm d}^3k \tag{279}$$

が得られる．$kV = kV\cos\theta\,(0 \le \theta \le \pi)$ と置いて $\theta$ の積分を行うと $\delta$ 関数のために $t$ が消えて

$$\mathscr{W} = \frac{(Z_1 e)^2}{(2\pi)^2 V^2}\int_0^\infty \frac{{\rm d}k}{k}\int_{-kV}^{kV}\frac{{\rm i}\,\omega}{\varepsilon(k,\omega)}\,{\rm d}\omega \tag{280}$$

となる．なお，$E_1$ の代わりに $E_{\rm ind} = -\nabla\phi_{\rm ind}(r,t)$ を用いても結果は変らない．実際，両者の違いは (271) の右辺第 2 項の $-\tilde{\phi}_{\rm ext}(k,\omega)$，すなわち粒子自身の電荷によるクーロン場の効果である．その効果は結局 (279)，(280) で $\varepsilon(k,\omega)$ を $\varepsilon_0$ に置き換えたものになる．明らかに，この場合の (280) の積分は 0 になって阻止能には関与しないという当然の結果になる．

(280) において，$\varepsilon(k,\omega)$ したがって $\mathscr{W}$ は一般に複素数であり，$\mathscr{W}$ の実数部が誘電応答による阻止能 ${\rm d}E/{\rm d}x$ を与える．${\rm Re}\{{\rm i}/\varepsilon(k,\omega)\} = {\rm Im}\{-1/\varepsilon(k,\omega)\}$ であるから

$$\frac{{\rm d}E}{{\rm d}x} = \frac{(Z_1 e)^2}{(2\pi)^2 V^2}\int_0^\infty \frac{{\rm d}k}{k}\int_{-kV}^{kV}{\rm Im}\left\{\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right\}\omega\,{\rm d}\omega \tag{281}$$

と表される (SI 単位系で [J/m])．すでに (256) で見たように，電磁波のエネルギー移行 (吸収）が ${\rm Im}\{\varepsilon\}$ の形で表されるのと対照的に，(281) すなわち荷電粒子のエネルギー移行は ${\rm Im}\{1/\varepsilon\}$ の形をとる．

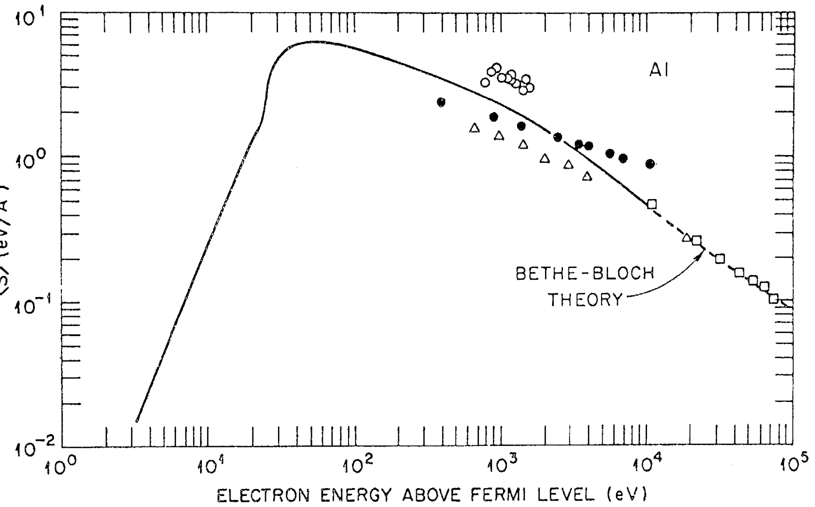


図 43: アルミニウム中を走る電子の阻止能 $\langle S \rangle$ の誘電応答モデルによる計算結果 (実線). プロットは測定値を示す [60].

(281) は Bethe-Bloch 式の適用できない中低速電子 (∼10keV 以下) に対する物質の阻止能 (電子的阻止能) の計算にも利用される．図 43 に，A$\ell$(アルミニウム) 中を走る電子の $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$ の計算例 (Lindhard の誘電関数 §14.5 を使用) を示す [60]．この例では $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$ の値は 30∼100 eV で最大となり，A$\ell$ はこのエネルギー範囲で電子的相互作用が強いことがわかる．約 25 eV 以下ではプラズモン励起が起きなくなるために $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$ の値は減少する．また，10 keV 近辺で Bethe-Bloch 式の値と接続することがわかる．重い物質，例えば金では電子の束縛エネルギー範囲が広いことに対応して，電子的相互作用の強いエネルギー範囲は広がり，30∼1000 eV に及ぶ．

(281) を中低速イオン (∼50keV/u 以下) の阻止能の計算に用いる際には，イオンの荷電状態（したがって核電荷の遮へい効果) を考慮する必要がある．なお，$V \to 0$ における $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x \propto V$ の依存性 (§11) を, 自由電子気体の誘電関数 $\varepsilon(k,\omega)$ から導くことができる [例題 14–4].

**問題 14–2** $a$ を正の実数とするとき, $\mathscr{P}(x) = (\sin ax)/\pi x$ は

$$\mathscr{P}(0) = \frac{a}{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \mathscr{P}(x)\,\mathrm{d}x = 1$$

を満たし, さらに $|x|$ の増大とともに周期 $2\pi/a$ の振動の振幅 $|\mathscr{P}(x)|$ は減衰することを示せ．したがって, $a \to \infty$ では $\mathscr{P}(x)$ はデルタ関数のすべての性質を持つ．こうしてデルタ関数のひとつの表現として

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \lim_{a\to\infty} \int_{-a}^{a} \mathrm{e}^{\mathrm{i}x\xi}\,\mathrm{d}\xi \tag{282}$$

を得る．

### 14.4.2 非弾性散乱の平均自由距離

荷電粒子が自由電子気体中を単位長さ進む間に受ける非弾性衝突の平均回数を $\langle \mu \rangle$ とすれば, 非弾性散乱の平均自由距離は $1/\langle \mu \rangle$ に等しい．ところで，(281) の $\omega$ に関する積分は，荷電粒子

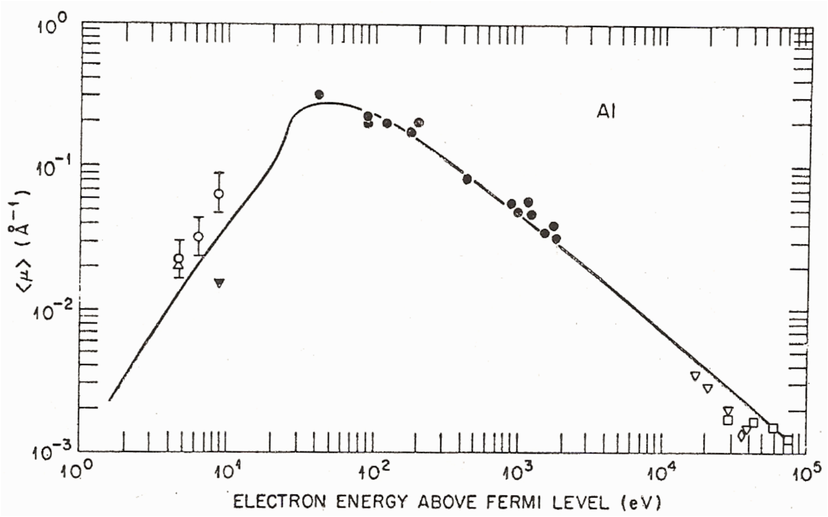


図 44: アルミニウム中を走る電子の平均自由距離 (逆数 $\langle\mu\rangle$ で表示) の誘電応答モデルによる計算結果 (実線)．プロットは測定値を示す [60]

から自由電子気体へのエネルギー移行 $\hbar\omega$ が，$\mathrm{Im}[-1/\varepsilon(k,\omega)]$ の頻度で起きていると解釈できる．このことから

$$\langle\mu\rangle = \frac{(Z_1e)^2}{(2\pi)^2V^2\hbar}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}k}{k}\int_{-kV}^{kV}\mathrm{Im}\left\{\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right\}\mathrm{d}\omega \tag{283}$$

と表されることがわかる．図 44 に，A$\ell$ 中での電子の $\langle\mu\rangle$ の計算例 (Lindhard の誘電関数 §14.5 を使用) を示す [60]．例えば，Al 中を走る 100 eV の電子に対して $1/\langle\mu\rangle \simeq 1/0.2 = 5$ Å である．

### 14.4.3 ウェイク

(271)，(267) に固体中を運動する荷電粒子についての (275) を適用すると

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_{\mathrm{ind}}(k,\omega) &= \left[\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(k,\omega)}-1\right]\frac{\tilde{\rho}_{\mathrm{ext}}(k,\omega)}{\varepsilon_0k^2}\\ &= \frac{Z_1e}{(2\pi)^3\varepsilon_0k^2}\left[\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(k,\omega)}-1\right]\delta(\omega-kV)\end{aligned} \tag{284}$$

が導かれる．(284) のフーリエ逆変換を行うと

$$\begin{aligned}\phi_{\mathrm{ind}}(r,t) &= \frac{Z_1e}{(2\pi)^3\varepsilon_0}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{k^2}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)}\left[\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(k,\omega)}-1\right]\delta(\omega-kV)\,\mathrm{d}\omega\\ &= \frac{Z_1e}{(2\pi)^3\varepsilon_0}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(r-Vt)}\left[\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(k,kV)}-1\right]\frac{\mathrm{d}^3k}{k^2}\end{aligned} \tag{285}$$

が得られる．(285) は，荷電粒子の飛跡近傍に誘起された電子密度に起因するポテンシャル (ウェイクポテンシャル) を表している．

(285) 中の $\varepsilon(k,\omega)$ として (253) を用いれば，ウェイクポテンシャルのパラメータ依存性等の一般的な性質を導くことができる [61, 36, 21]．例えば，粒子の静止系 (粒子に固定された座標系) で見ると，粒子の軌跡上では $\phi_{\mathrm{ind}}$ が波長 $2\pi V/\omega_{\mathrm{p}}$ で周期的に空間変化することが示される．すなわ

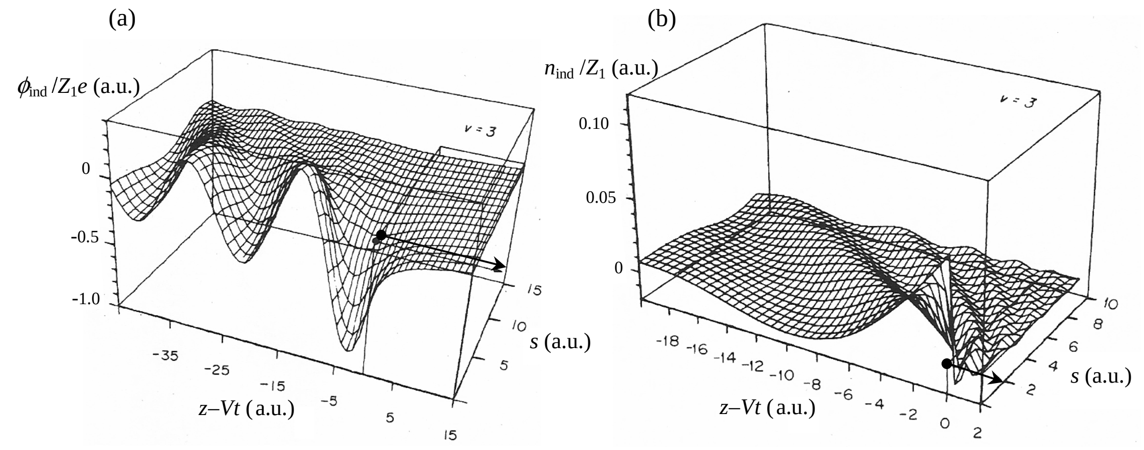


図 45: $V = 3$ a.u.(原子単位) のイオンが C 中 ($\hbar\omega_p = 25$ eV) に誘起する (a) ポテンシャル $\phi_{ind}$，および (b) 電子数密度 $n_{ind} = \rho_{ind}/(-e)$ の計算例 [62].1 原子単位の長さ，速度，エネルギーはそれぞれ 0.5292Å(Bohr 半径), $2.188 \times 10^6$ m/s (Bohr 速度), 27.21 eV (水素原子の電離エネルギーの 2 倍) である．

ち，固体の静止系で見た電子密度は粒子の軌跡上の各位置でプラズマ振動数で時間変化している．実際には (253) による扱いは十分ではない．より現実的に，プラズマ励起の分散 (§14.5.4) や 1 電子励起の効果を取り入れた形の誘電関数を用いて計算されたウェイクポテンシャルを図 45(a) に示す [62]. この計算例では，$V = 3$ a.u.(原子単位) であり, イオンの進行方向を $z$ 軸 (原点はイオンの位置)，円筒座標の径方向を $s = \sqrt{x^2+y^2}$ にとってある．イオンの位置 $(z-Vt = 0, s = 0)$ では $-\partial\phi_{ind}/\partial(z-Vt) < 0$ であるから，イオンには制動力が働き，これが (281) の阻止能を与えている．

荷電粒子の飛跡近傍に誘起される電荷密度すなわち $\rho_{ind}(r,t)$ は，(268) を用いて $\phi_{ind}(r,t)$ の場合と類似の計算から

$$\rho_{ind}(r,t) = \frac{Z_1 e}{(2\pi)^3} \int e^{ik(r-Vt)} \left[ \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(k,kV)} - 1 \right] d^3k \tag{286}$$

のように求められる．図 45(a) と同じ条件で計算された $\rho_{ind}$ を，電子数密度 $n_{ind} = -\rho_{ind}/e$ として示したのが図 45(b) である．粒子のすぐ後ろにはウェイクによる高密度電子の領域が形成されている．

先に述べたように，誘起電子密度の時間変化はプラズマ振動そのものであり，したがって図 45(a), (b) に見られるポテンシャル，電子数密度の振動は本質的には粒子の静止系でみたプラズマ振動とみなせる．なお，ここで述べたウェイクの扱いは線形応答モデルに基づいており，適用条件については注意が必要である．

ウェイクの効果の観測例として良く知られているのは，Gemmell らによる MeV 領域の分子イオンの薄膜通過実験である [64, 63]．薄膜入射により，分子イオンは分子軌道電子の電離あるいは励起を介して構成原子 (あるいはイオン) に解離する．解離した原子の背後にはウェイクが形成され，そのポテンシャルに他の解離原子が捕獲されると，両者が進行方向に沿って並んで走ることが明らかになっている．図 46(a) はその一例で，3 MeV の $HeH^+$ の解離によって生成された $H^+$ について，運動エネルギーと入射方向からの角度を同時観測した結果 (リングパターン) を示す．なお，この実験条件では $He^{2+}$+$H^+$ のような解離が支配的である．H は薄膜入射時に 600 keV($\frac{1}{5} \times 3$ MeV) の運動エネルギーを持つが，膜通過後に前方 (0 mrad) で観測される運動エネルギーは 609 および 591 keV 付近に局在している．これらのエネルギーは，入射方向に対して 0, 180° (H がそれぞれ He の前後の位置) の方向を向いた HeH が $He^{2+}$，$H^+$ に解離され，それらのクーロン反発力で加減

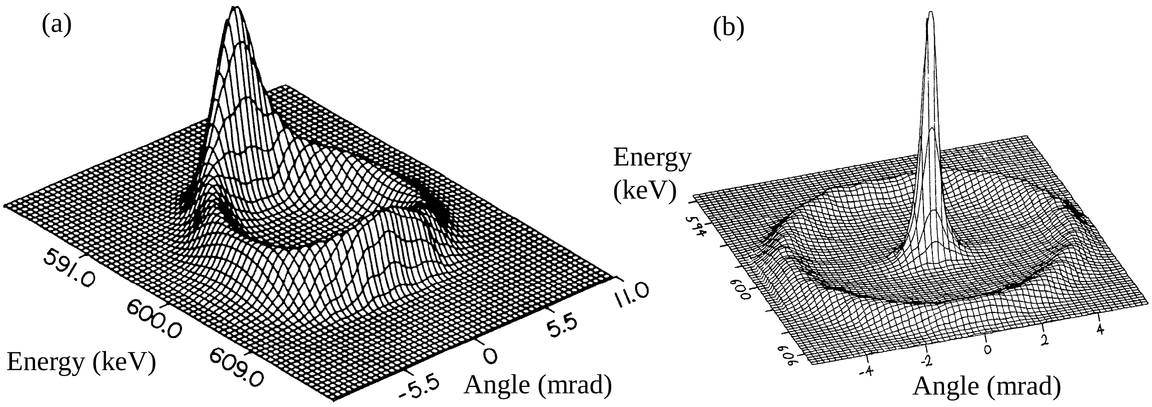


図 46: 3 MeV $HeH^+$ の衝突解離によって生成された水素の運動エネルギーと角度の同時観測結果. (a)195Å の炭素薄膜ターゲット，および (b)He 気体ターゲットの場合 [63].

速された $H^+$ の運動エネルギーにそれぞれ等しい．すなわち，H と He は進行方向に並んで走る確率が高いことがわかる. 比較のため，気体 He ターゲットについての実験結果を図 46(b) に示す. 気体中ではウェイクは存在しないため，He に対する H の向きは等方的であり，したがってエネルギーと角度のリングパターンに異方性は見られない．ここで，リングパターンは $He^+$+$H^+$ のように解離した $H^+$ によるものであり，中央のピークは解離後に H, He のいずれかが中性であった場合の寄与である.

ウェイクの存在を示す他の例として，共鳴干渉励起 (§10) の観測において，ウェイクポテンシャルによる摂動のために，共鳴準位が Stark 分裂することが知られている [27].

### 14.4.4 分子・クラスター入射における近接効果

加速された分子あるいは原子クラスターが固体に入射すると，個々の入射原子 (あるいはイオン) に対する固体電子系の応答は近傍を併走する隣接原子のクーロン場の影響を受ける．このような近接効果が阻止能にどのように現れるかを議論しよう.

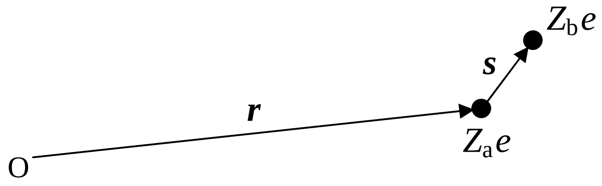


図 47: 固体中を走る 2 原子分子 (原子間隔 $s$)

まず，図 47 のように電荷 $Z_a e$ から $s$ の位置に電荷 $Z_b e$ があり，両者が固体内を同速度 $V$ で走るとする．$Z_a e$ には，それ自身による生成電場に加えて，$Z_b e$ に起因する電場が働く．したがって，この場合の仕事を与える (279) は

$$\begin{aligned}\mathscr{W}_a &= -Z_a e\frac{\boldsymbol{V}}{V}\left[\{\boldsymbol{E}_a(\boldsymbol{r},t)\}_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{V}t}+\{\boldsymbol{E}_b(\boldsymbol{r},t)\}_{\boldsymbol{r}=-\boldsymbol{s}+\boldsymbol{V}t}\right] \\ &= \frac{e^2}{(2\pi)^3 V}\int d\omega\int\frac{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{V}}{k^2\varepsilon(k,\omega)}\,\delta(\omega-\boldsymbol{k}\boldsymbol{V})\,e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{V}-\omega)t}[Z_a^2+Z_aZ_b e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{s}}]\,d^3k \qquad (287)\end{aligned}$$

のように書き直される．ここで例えば$E_\mathrm{a}(r,t)$のように，その物理量に対する各電荷の関与を添え字"a","b"で表示した．同様に電荷$Z_\mathrm{b}e$に対する$\mathscr{W}_\mathrm{b}$は，(287)で"a","b"を入れ替え，さらに$s \to -s$と置き換えたものになる．こうして，この2体系に対する阻止能は$\mathscr{W}_\mathrm{a}+\mathscr{W}_\mathrm{b}$，すなわち

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = \frac{e^2}{(2\pi)^3 V}\int \mathrm{d}\omega \int \frac{\mathrm{i}kV}{k^2\varepsilon(k,\omega)}\,\delta(\omega - kV)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kV-\omega)t}\,\Gamma(ks)\,\mathrm{d}^3k\,, \tag{288}$$

$$\Gamma(ks) = Z_\mathrm{a}^2 + Z_\mathrm{b}^2 + 2Z_\mathrm{a}Z_\mathrm{b}\cos ks \tag{289}$$

と表される．さらに，$\Gamma(ks)$に関して$k$に対する$s$の方位の平均値

$$\langle\Gamma(ks)\rangle = Z_\mathrm{a}^2 + Z_\mathrm{b}^2 + 2Z_\mathrm{a}Z_\mathrm{b}\frac{\sin ks}{ks} \tag{290}$$

を用いれば(問題14–3)，(281)に相当する表現として

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = \frac{e^2}{(2\pi)^2V^2}\int_0^\infty \langle\Gamma(ks)\rangle\frac{\mathrm{d}k}{k}\int_{-kV}^{kV}\mathrm{Im}\left\{\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right\}\omega\,\mathrm{d}\omega \tag{291}$$

が得られる．(291)において，2電荷間の相互作用すなわち$s$依存性は$\langle\Gamma(ks)\rangle$の$\sin ks/ks$の項で表されており，この項を特に近接効果の"干渉項"と呼ぶことがある．

原子数3以上の分子・クラスターに対しては(290)を書き直せば，(291)をそのまま阻止能式として使用できる．実際，$n$個の電荷の系の場合には

$$\langle\Gamma(ks)\rangle = \sum_{i=1}^{n}\left(Z_i^2 + \sum_{j(\neq i)}^{n} Z_iZ_j\frac{\sin ks_{ij}}{ks_{ij}}\right) \tag{292}$$

と表されることは自明であろう．ここで$s_{ij}$は電荷間の距離である．

**問題14–3** 関数$f(ks) = \cos ks, \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}ks}$のそれぞれについて，$ks = ks\cos\theta\ (0 \le \theta \le \pi)$と表すことにより，$s$の$k$に対する方位の平均値$\langle f(ks)\rangle$は

$$\langle f(ks)\rangle = \frac{1}{4\pi}\int_0^\pi f(ks)\,2\pi\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = \frac{\sin ks}{ks} \tag{293}$$

になることを示せ．

## 14.5 Lindhardの誘電関数

自由電子気体に対する$\varepsilon(k,\omega)$の解析表現は，Lindhardの誘電関数として知られている[39, 65]．Lindhardの原著論文では，電磁場のスカラーおよびベクトルポテンシャルにそれぞれ対応する2種類の誘電関数が扱われているが，前者は中低速荷電粒子の阻止能，ウェイクのみならず固体内電子系の励起を扱う上で重要である．以下では，その導出過程，すなわち単振動摂動電場の誘起する自由電子気体の密度揺らぎ(誘導電荷の生成)の計算をやや詳しく説明しよう．

### 14.5.1 自由電子気体と一次摂動

量子力学によれば，自由電子の波動関数$\psi_n(r)$は

$$\psi_n(r) = \mathscr{V}^{-1/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_n r} \tag{294}$$

と書かれる．ここで，$\psi_n(r)$ は体積 $\mathscr{V}$ の立方体内で規格化 (Box normalization) されていて，波数ベクトル $k_n$ は，例えば $x$ 方向について $(k_n)_x = 2\pi n_x/\mathscr{V}^{1/3}\,(n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$ であり，$y, z$ 方向も同様に書けるので，自由電子の運動エネルギー固有値 $E_n$ は

$$E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m_{\mathrm{e}} \tag{295}$$

で与えられる [26]．自由電子の集合である自由電子気体はいろいろな $n$ の値を持っていて，例えば絶対温度 0K では，その分布状態は，基底状態からフェルミエネルギー (あるいはフェルミ運動量) に至るまですき間無く詰められた状態 (0K のフェルミ分布) に相当する．

このような自由電子気体に荷電粒子が入射し，そのポテンシャル場 (§14.3) が (294) の電子状態に対する摂動として作用すると考える．いま注目するのはポテンシャルのフーリエ変換の $(k, \omega)$ 成分であるが，後に (304) に示すように，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)}$ の項だけでは実際の摂動にはなり得ず，摂動ハミルトニアン $H'(r,t)$ は，反位相 $(-k, -\omega)$ の摂動が付加された実数型，すなわち

$$\begin{aligned} H'(r,t) &= -e\,\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)}\mathrm{e}^{\gamma t} + (\text{complex conjugate}) \\ &= -e\,\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)\,[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\omega t)}]\mathrm{e}^{\gamma t} \end{aligned} \tag{296}$$

と置かければならない ($e > 0$: 電気素量)．ここで $\mathrm{e}^{\gamma t}\,(\gamma > 0)$ の項は $t = -\infty$ で $H'$ がゼロになるように付加したもので，計算の最終段階 (§14.5.2, §14.5.3) で $\gamma \to 0$ とする．なお，ポテンシャルは実数であるからフーリエ成分について $\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(-k,-\omega) = \tilde{\phi}^*_{\mathrm{sum}}(k,\omega)$ であり，(296) で $\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}$ は実数であることから，結局 $\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(-k,-\omega) = \tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)$ であることに注意.

状態 $\psi_n$ へ摂動 $H'(r,t)$ が作用し，電子の状態が $\Psi_n(r,t)$ に変化したとする．時間に依存する摂動の 1 次近似によれば，摂動後の状態は

$$\Psi_n(r,t) = \psi_n(r)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} + \sum_m a_m(t)\,\psi_m(r)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m t/\hbar} \tag{297}$$

のように表される [26]．ここで，$n \to m$ の遷移に対応する確率振幅 $a_m(t)$ は 1 次の微小量として

$$a_m(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^{t} \langle\psi_m|H'(r,\tau)|\psi_n\rangle\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_m-E_n)\tau/\hbar}\,\mathrm{d}\tau \tag{298}$$

で与えられる．

まず (296) の第一項すなわち $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)}$ の項による摂動を調べよう．(298) の行列要素を計算すると

$$\begin{aligned} \langle\psi_m| - e\,\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega\tau)}\mathrm{e}^{\gamma\tau}|\psi_n\rangle &= \frac{-e\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\tau+\gamma\tau}}{\mathscr{V}}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k_n-k_m)r}\,\mathrm{d}^3 r \\ &= -e\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\tau+\gamma\tau}\,\frac{(2\pi)^3}{\mathscr{V}}\delta^3(k_n+k-k_m) \end{aligned} \tag{299}$$

となるので [(282) 参照]，(299) を (298) へ代入して $\tau$ に関する積分を行い，デルタ関数の性質 $\delta(x) = \delta(-x)$ および (295) 等の関係を使うと

$$a_m(t) = b_m(t)\cdot\frac{(2\pi)^3}{\mathscr{V}}\delta^3(k_m-k_n-k)\,, \tag{300}$$

$$b_m(t) = \frac{2m_{\mathrm{e}}e\,\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)}{\hbar^2}\cdot\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar(k_m^2-k_n^2)t/2m_{\mathrm{e}}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t+\gamma t}}{(k_m^2-k_n^2)-2m_{\mathrm{e}}(\omega+\mathrm{i}\gamma)/\hbar} \tag{301}$$

が得られる．(300) のデルタ関数により，この場合の運動量遷移は $k_m = k_n + k$ に限られるから，この遷移を "$n+k$" と表記すれば (297) は 1 次摂動の範囲で

$$\Psi_n(r,t) = \psi_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hbar k_n^2 t/2m_\mathrm{e}} + b_{n+k}\,\psi_{n+k}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hbar|k_n+k|^2 t/2m_\mathrm{e}} \tag{302}$$

すなわち，$m = n$ および $m = n+k$ の 2 項の和で書かれる．(302) の第二項で $a_{n+k}$ の代わりに $b_{n+k}$ が現れたのは，最初に述べた波数の離散幅 $2\pi/\mathscr{V}^{1/3}$ により，$k_m$ 空間の体積素が $(2\pi/\mathscr{V}^{1/3})^3$ とみなせるからである．実際，(297) において

$$\sum_m \quad \to \quad \frac{\mathscr{V}}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3 k_m$$

のように置き換え，その後にデルタ関数の演算を行えば (302) が得られる．

反位相すなわち (296) の $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\omega t)}$ の項による摂動は，上述の扱いにおいて $k \to -k, \omega \to -\omega$ のように置き換えれば得られる．したがって，この場合の運動量遷移は $k_m = k_n - k$ に限られることに注意．

### 14.5.2 電荷の生成と $\varepsilon(k,\omega)$

電子気体モデルで固体内自由電子を扱う場合，それらは固体内の正電荷 (固体内原子核による) の間に一様に広がっているために電荷密度は実質的にゼロであるとみなせる．したがって，自由電子気体に入射荷電粒子のポテンシャルが摂動として加わった際には，摂動前の電子分布からのずれが実効電荷 $\rho_n$ を生起することになる．すなわち

$$\rho_n(r,t) = -e\left[|\Psi_n(r,t)|^2 - |\psi_n(r,t)|^2\right] = -e\left[\Psi_n^*(r,t)\Psi_n(r,t) - \mathscr{V}^{-1}\right] \tag{303}$$

と表される．$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)}$ で変化する摂動に対しては，(302), (303), (294) より ($b$ の 1 次の項までを残して)

$$\begin{aligned}\rho_n(r,t) &= \frac{-e}{\mathscr{V}}\left[b_{n+k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hbar(k^2+2kk_n)t/2m_\mathrm{e}} + b_{n+k}^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar(k^2+2kk_n)t/2m_\mathrm{e}}\right] \\ &= \frac{-2m_\mathrm{e}e^2\tilde{\phi}_\mathrm{sum}(k,\omega)}{\hbar^2\mathscr{V}}\left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)}}{k^2+2kk_n-2m_\mathrm{e}(\omega+\mathrm{i}\gamma)/\hbar}\right. \\ &\qquad\left.+\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\omega t)}}{k^2+2kk_n-2m_\mathrm{e}(\omega-\mathrm{i}\gamma)/\hbar}\right]\mathrm{e}^{\gamma t}\end{aligned} \tag{304}$$

が得られる．右辺の [ ] 内の第 1 項は摂動と同位相で振動するのに対し，第 2 項は反位相で振動している．$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\omega t)}$ で変化する摂動についても同じような状況が生じる．このことから，摂動ハミルトニアンが両方の位相項を (296) のような形で含んでいれば，摂動と応答に関して必然的にフーリエ成分を 1:1 に対応づけられることが理解できよう．

反位相の摂動に対する実効電荷 $\rho_n'$ は，(304) で $k \to -k, \omega \to -\omega$ と置き換えたものになるから，生起された全電荷 $\rho_\mathrm{ind}$ は，$\rho_n + \rho_n'$ を電子気体中の全電子数について加えれば得られる．すなわち，摂動前の全電子の $k_n$ に関する分布関数を $F(k_n)\,\mathrm{d}^3k_n$ とすれば

$$\rho_\mathrm{ind} = \frac{-2m_\mathrm{e}e^2\tilde{\phi}_\mathrm{sum}(k,\omega)}{\hbar^2\mathscr{V}}\int F(k_n)(B_n\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)} + B_n^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\omega t)})\,\mathrm{e}^{\gamma t}\,\mathrm{d}^3k_n\,, \tag{305}$$

$$B_n = \frac{1}{k^2+2kk_n-2m_\mathrm{e}(\omega+\mathrm{i}\gamma)/\hbar} + \frac{1}{k^2-2kk_n+2m_\mathrm{e}(\omega+\mathrm{i}\gamma)/\hbar} \tag{306}$$

となる．$\rho_{\mathrm{ind}}$ によって誘起されるポテンシャル $\phi_{\mathrm{ind}}(r,t)$ を (296) と同様に

$$\phi_{\mathrm{ind}}(r,t) = \tilde{\phi}_{\mathrm{ind}}(k,\omega)\,[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\omega t)}]\mathrm{e}^{\gamma t} \tag{307}$$

と置いてポアソン方程式 $\nabla^2\phi_{\mathrm{ind}} = -\rho_{\mathrm{ind}}/\varepsilon_0$ に代入し，フーリエ成分を比較すると[29]

$$\tilde{\phi}_{\mathrm{ind}}(k,\omega) = -\frac{2m_{\mathrm{e}}e^2\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)}{\varepsilon_0\hbar^2k^2\mathscr{V}}\int F(k_n)\,B_n\,\mathrm{d}^3k_n \tag{308}$$

が得られる．その際，$\gamma \to 0$ の条件下では $B_n$ は実数と見なせることに注意．摂動ポテンシャルは外部から持ち込まれた電荷によるポテンシャル $\phi_{\mathrm{ext}}(r,t)$ と誘電応答によって生じたポテンシャル $\phi_{\mathrm{ind}}(r,t)$ の和であるから，それらのフーリエ成分について

$$\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega) = \tilde{\phi}_{\mathrm{ext}}(k,\omega) + \tilde{\phi}_{\mathrm{ind}}(k,\omega) \tag{309}$$

が成り立つ．(270) によれば，$\varepsilon(k,\omega)/\varepsilon_0 = \tilde{\phi}_{\mathrm{ext}}(k,\omega)/\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)$ であるから

$$\frac{\varepsilon(k,\omega)}{\varepsilon_0} = 1 - \frac{\tilde{\phi}_{\mathrm{ind}}(k,\omega)}{\tilde{\phi}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)} = 1 + \frac{2m_{\mathrm{e}}e^2}{\varepsilon_0\hbar^2k^2\mathscr{V}}\int F(k_n)\,B_n\,\mathrm{d}^3k_n \tag{310}$$

と表される．あるいは，(242) の $\omega_{\mathrm{p}}$ を用いれば

$$\frac{\varepsilon(k,\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{2m_{\mathrm{e}}^2\omega_{\mathrm{p}}^2}{\hbar^2k^2}\int f(k_n)\,B_n\,\mathrm{d}^3k_n \tag{311}$$

が得られる．ここで $f(k_n)$ は $F(k_n)$ を全電子数 $(n_0\mathscr{V})$ で割った規格化分布関数で

$$\int f(k_n)\,\mathrm{d}^3k_n = 1 \tag{312}$$

を満たす.

**問題 14–4** (311) は固体内電子に対して導かれた結果であるが, 正電荷 (平均以下の電子密度が対応する) に対しても結果は同じであることを確かめよ [ヒント：(296), (303) で $-e \to e$].

### 14.5.3 $\varepsilon(k,\omega)$ の解析表現

(311) の積分を計算することにより，$\varepsilon(k,\omega)$ の具体的な表式を求めてみよう．まず，$f(k_n)$ を 0K のフェルミ分布で近似する．すなわちフェルミ運動量を $k_{\mathrm{f}}$ として

$$f(k_n)\,\mathrm{d}^3k_n = \begin{cases} C\times 2\pi k_n^2\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}k_n & (0\le k\le k_{\mathrm{f}}) \\ 0 & (k>k_{\mathrm{f}}) \end{cases}\quad, \tag{313}$$

と置く．ここで $\theta$ は $k_n$ と $k$ のなす角であり, $C = 3/4\pi k_{\mathrm{f}}^3$ は規格化定数である．(311), (313) により，初等積分を行って $\varepsilon(k,\omega)$ の式が得られる (問題 14–5 参照)．結果はフェルミ速度 $v_{\mathrm{f}} = \hbar k_{\mathrm{f}}/m_{\mathrm{e}}$, および 2 個の無次元パラメータ $z = k/2k_{\mathrm{f}}, u' = (\omega + \mathrm{i}\gamma)/kv_{\mathrm{f}}$ により

$$\frac{\varepsilon(k,\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{3\hbar^2\omega_{\mathrm{p}}^2}{4m_{\mathrm{e}}^2v_{\mathrm{f}}^4z^2}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{8z}[1-(z-u')^2]\ln\frac{z-u'+1}{z-u'-1} + \frac{1}{8z}[1-(z+u')^2]\ln\frac{z+u'+1}{z+u'-1}\right) \tag{314}$$

[29](305) の $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)}, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\omega t)}$ は積分変数を含まないので，それぞれ積分の外に出せることに注意.

と表される．なお，複素数をパラメータとする対数は主値をとるものとする．

ここで, (298) の積分の発散を避けるために導入されたパラメータ $\gamma$ を取り去ろう．$\gamma \to 0$ の極限に対して，$u = u'_{\gamma=0} = \omega/kv_{\mathrm{f}}$ を用いて

$$\frac{\varepsilon(k,\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{3\hbar^2\omega_{\mathrm{p}}^2}{4m_{\mathrm{e}}^2 v_{\mathrm{f}}^4 z^2}\left[g_1(u,z) + \mathrm{i}g_2(u,z)\right] \tag{315}$$

のように実数部 $g_1$ と虚数部 $g_2$ を分けて表現すれば

$$g_1(u,z) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8z}[1-(z-u)^2]\ln\left|\frac{z-u+1}{z-u-1}\right| + \frac{1}{8z}[1-(z+u)^2]\ln\left|\frac{z+u+1}{z+u-1}\right|, \tag{316}$$

$$g_2(u,z) = \begin{cases} \pi u/2 & (z+u<1)\,, \\ \pi[1-(z-u)^2]/8z & (|z-u|<1<z+u)\,, \\ 0 & (|z-u|>1) \end{cases} \tag{317}$$

であることが示される (問題 14–6 参照). こうして，一連の解析表現すなわち Lindhard の誘電関数が得られた.

**例題 14–4** 低速イオンに対する自由電子気体の阻止能がイオン速度 ($V$) に比例することを示せ.
**解答** 低速 ($V < v_{\mathrm{f}}$) の場合には電子系はポテンシャルの緩やかな時間変化，すなわち $u = \omega/kv_{\mathrm{f}} \simeq 0$ のみを感じるであろう．この場合，$z+u \simeq k/2k_{\mathrm{f}} < 1$ すなわち微小な運動量移行を仮定し，(316), (317) で $u$ に関して 1 次の項までをとれば

$$g_1(u,z) \simeq \frac{1}{2} + \frac{1}{4z}[1-z^2]\ln\left|\frac{z+1}{z-1}\right| = g_1(0,z)\,, \tag{318}$$

$$g_2(u,z) = \frac{\pi u}{2} \tag{319}$$

と表される．(316) が $u$ の偶関数であるため，(318) では $u$ の 1 次項は現れないことに注意．(315) において $3\hbar^2\omega_{\mathrm{p}}^2/4m_{\mathrm{e}}^2v_{\mathrm{f}}^4z^2 = 3\omega_{\mathrm{p}}^2/v_{\mathrm{f}}^2k^2$ と書けるので，(318), (319) を用いると

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\left\{\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right\} &\simeq \frac{1}{\varepsilon_0}\cdot\frac{(3\,\omega_{\mathrm{p}}^2/v_{\mathrm{f}}^2k^2)\pi u/2}{[1+(3\,\omega_{\mathrm{p}}^2/v_{\mathrm{f}}^2k^2)g_1(0,z)]^2} \\ &= \frac{3\pi\omega_{\mathrm{p}}^2 v_{\mathrm{f}}}{2\varepsilon_0}\cdot\frac{k\,\omega}{[v_{\mathrm{f}}^2k^2 + 3\,\omega_{\mathrm{p}}^2 g_1(0,z)]^2} \end{aligned} \tag{320}$$

が得られる．(320) を (281) に代入して $\omega$ の積分を行うと $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x \propto V$ となることがわかる．なお，高速イオンに対しては Lindhard の誘電関数は自由電子気体に対する Bethe の阻止能公式を与えることが示される [39].

**問題 14–5** (311) に (313) を用い，$kk_n = kk_n\cos\theta$ として $0 \le \theta \le \pi$ で積分し，次に $k_n$ についての積分を行って (314) を導け.
**問題 14–6** 一般に，複素数 $w = x + \mathrm{i}y$ に対して $\ln w = \ln R + \mathrm{i}\,\theta$ ($R = \sqrt{x^2+y^2}, \tan\theta = y/x, -\pi < \theta \le \pi$) であるから，$|y| \to 0$ として $w$ を実軸に近づける場合には

$$\mathrm{Im}\{\ln w\} = \begin{cases} 0 & (x>0, y\to\pm 0)\,, \\ \pi & (x<0, y\to +0)\,, \\ -\pi & (x<0, y\to -0) \end{cases} \tag{321}$$

のようになる．(314) の対数項のそれぞれについて $x, y$ に相当する部分を求め，上述の 3 つの場合を考慮しつつ $\gamma \to 0$ の極限をとって (316), (317) を導け.

### 14.5.4 プラズマ振動の分散関係

(266), (262) によれば，電子系への摂動としての外部電荷 $\tilde{\rho}_{\mathrm{ext}}(k,\omega)$ がゼロであっても $\varepsilon(k,\omega)=0$ の条件が満たされていれば，$\tilde{\rho}_{\mathrm{sum}}(k,\omega)=\tilde{\rho}_{\mathrm{ind}}(k,\omega)\neq 0$ となり得るので，誘導電荷が存在できる．簡単な例として，(253) で $\varepsilon(\omega)=0$ と置けば，$\omega=\omega_{\mathrm{p}},\eta=0$ となり，これは §14.1 で述べたプラズマ振動に相当する．自由電子気体について，$\varepsilon(k,\omega)=0$ を満たす $k,\omega$ の関係すなわちプラズマ振動の分散関係を求めてみよう．

まず (315) で $\mathrm{Im}\{\varepsilon(k,\omega)\}=0$ すなわち $g_2=0$ の条件から考察する．(317) によれば，$z+u<1$ あるいは $|z-u|<1<z+u$ の場合には，$g_2=0$ を満たす $u,z$ の関係が 1 つ与えられる (前者では $u=0$)．さらに $\mathrm{Re}\{\varepsilon(k,\omega)\}=0$ から $u,z$ の関係がもう一つ与えられるので，これらを連立させると $\{\varepsilon(k,\omega)\}=0$ は $(u,z)$ 平面上の点になってしまい，分散関係は有限な範囲を形成しないので，物理的な意味を持たない．これに対し，$|z-u|>1$ の条件では常に $g_2=0$ であるから，この場合のみを検討すればよいことが分かる．この条件のもとで，分散関係は $\mathrm{Re}\{\varepsilon(k,\omega)\}=0$ より

$$1+\frac{3\hbar^2\omega_{\mathrm{p}}^2}{4m_{\mathrm{e}}^2v_{\mathrm{f}}^4z^2}\,g_1(u,z)=0 \tag{322}$$

で与えられる．

(322) のままでは分散関係を解析的に表すことができない．特に重要であるのは遷移確率の大きい，したがって運動量移行の小さい遷移の分散関係であるから，$k\sim 0$ すなわち $z\sim 0$ の場合の $u$ の $z$ 依存性を求めてみよう．

$-1<\xi<1$ の場合の展開式

$$\ln(1+\xi)=\xi-\frac{\xi^2}{2}+\frac{\xi^3}{3}-\frac{\xi^4}{4}+\cdots \tag{323}$$

を用いると

$$\begin{aligned}
\ln|z-u\pm 1| &= \ln\left|(z-u)\left(1\pm\frac{1}{z-u}\right)\right| \\
&= \ln|z-u|\pm\frac{1}{z-u}-\frac{1}{2(z-u)^2}\pm\frac{1}{3(z-u)^3}-\frac{1}{4(z-u)^4}+\cdots, \qquad (324)\\
\ln|z+u\pm 1| &= \ln\left|(z+u)\left(1\pm\frac{1}{z+u}\right)\right| \\
&= \ln|z+u|\pm\frac{1}{z+u}-\frac{1}{2(z+u)^2}\pm\frac{1}{3(z+u)^3}-\frac{1}{4(z+u)^4}+\cdots \qquad (325)
\end{aligned}$$

が得られる．(316), (324), (325) により

$$g_1(u,z)=\frac{1}{3(z^2-u^2)}+\frac{z^2+3u^2}{15(z^2-u^2)^3}+\cdots \tag{326}$$

と表される．(326) を (322) に代入し，$u^2$ についての 3 次方程式を解けば，$z^2$ の関数として表された $u^2$ すなわち分散関係が得られることが分かる．$u^2$ の $z^2$ に関する展開表現は

$$u^2=\frac{\beta}{z^2}+\frac{3}{5}+z^2+\cdots,\qquad \beta=\frac{\hbar^2\omega_{\mathrm{p}}^2}{4m_{\mathrm{e}}^2v_{\mathrm{f}}^4} \tag{327}$$

となるから (問題 14–7 参照)，$\omega,k$ を用いて書き直せば

$$\omega^2=\omega_{\mathrm{p}}^2+\frac{3}{5}v_{\mathrm{f}}^2k^2+\frac{\hbar^2}{4m_{\mathrm{e}}^2}k^4+\cdots \tag{328}$$

が得られる．すなわち，このようなプラズマ励起においては自由電子系へのエネルギー移行 $\hbar\omega$ と運動量移行 $\hbar k$ は (328) の関係を満たさなければならない．エネルギー移行が $\hbar\omega_{\mathrm{p}}$ であっても $k \neq 0$ の場合にはプラズマは励起されず，個別電子励起 (1 個の電子へのエネルギーと運動量の移行) になる．

**問題 14–7** (327) を (326) に代入した結果を用いると，(322) の左辺は $z^2$ を変数として表される．左辺を $z^2$ の冪で表示し，$z^4$ 以上の項を無視すれば (322) が満たされることを確かめよ．

# 15 付録

## 15.1 固体原子の熱振動変位

デバイ模型 (Debye model) により，固体内原子の熱振動変位を扱う．以下では，固体内原子の 3 次元振動の性質を 1 次元調和振動子の物理を使って議論する．絶対温度 $T$ の熱平衡状態にある 1 次元調和振動子の運動量と変位をそれぞれ $p, q$ と書けばハミルトニアンは

$$H(p,x) = \frac{p^2}{2M} + \frac{M\omega^2 q^2}{2} \tag{329}$$

ただし，$M$ は原子の質量，$\omega$ は固有角振動数である．熱平衡状態では，エネルギー等分配則により，全エネルギーの期待値は位置エネルギーの平均値の 2 倍に等しいから，期待値を $\langle\rangle$ で表すことにすれば

$$\langle E\rangle = M\omega^2\langle q^2\rangle \tag{330}$$

の関係がある．$\langle E\rangle$ は調和振動の量子数 $n$ の期待値 $\langle n\rangle$ を用いて，

$$\langle E\rangle = \left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{331}$$

と表すこともできる．さらに，$\langle n\rangle$ は Bose–Einstein 分布

$$\langle n\rangle = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \tag{332}$$

にしたがう．(330)–(332) より，固有角振動数 $\omega$ の 1 次元調和振動の平均 2 乗振幅として

$$\langle q^2\rangle = \frac{\hbar}{2M\omega}\coth(\hbar\omega/2kT) \tag{333}$$

が得られる．

次に，固体中における $\omega$ の分布 $D(\omega)$ としてデバイ分布

$$D(\omega) = \begin{cases} 3\,\omega^2/\omega_\mathrm{d}^3 & (\omega \le \omega_\mathrm{d})\,, \\ 0 & (\omega > \omega_\mathrm{d}) \end{cases} \tag{334}$$

を仮定する．ここで $\omega_\mathrm{d}$ はデバイ分布における $\omega$ の最大値であり，$\int D(\omega)\,\mathrm{d}\omega = 1$ のように規格化されている．こうして固体中の 1 次元平均 2 乗振幅 $\langle x_1^2\rangle$ は

$$\begin{aligned}\langle x_1^2\rangle &= \int_0^{\omega_\mathrm{d}} \langle q^2\rangle D(\omega)\,\mathrm{d}\omega \\ &= \frac{3\hbar}{M\omega_\mathrm{d}}\left[\frac{1}{4} + \frac{1}{\omega_\mathrm{d}^2}\int_0^{\omega_\mathrm{d}} \frac{\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}\,\mathrm{d}\omega\right]\end{aligned} \tag{335}$$

と表される．さらに

$$\Theta = \hbar\omega_\mathrm{d}/k \tag{336}$$

によりデバイ温度 (Debye temperature) $\Theta$ を定義すると

$$\langle x_1^2\rangle = \frac{3\hbar^2}{Mk\Theta}\left[\frac{1}{4} + \frac{T}{\Theta}G(\frac{\Theta}{T})\right] \tag{337}$$

のように書ける．ここで $G$ はデバイ関数 (Debye function)

$$G(\xi) = \frac{1}{\xi}\int_0^{\xi} \frac{t}{e^t - 1}\,dt \tag{338}$$

である．$G(\xi)$ を図 48 に示す．特別な場合として (337) において $T \to 0$ の極限値

$$\langle x_1^2 \rangle_{T\to 0} = \frac{3\hbar^2}{4Mk\Theta} \tag{339}$$

は原子のゼロ点振動の平均 2 乗振幅を表す.

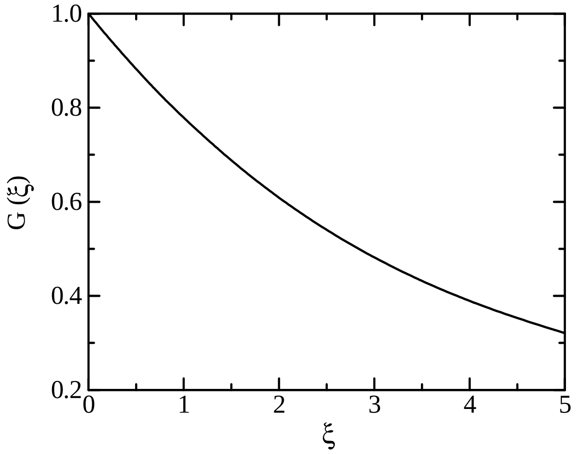


図 48: デバイ関数．$G(\xi \to \infty) = 0$ である．

参考のため，いくつかの物質についての $\Theta$, 平均振幅 $\sqrt{\langle x_1^2 \rangle}$ の室温および 0K での値 (ゼロ点振動) を表 1 に示す．ダイアモンドの室温における平均振幅は，ゼロ点振動のそれにほぼ等しい．実験的には，$\Theta$ は一般に X 線回折，あるいは比熱の測定から決定され, その値の大小は感覚的には物質の硬軟 (叩いたときの音の高低) に対応している．半導体材料である Si, GaN は金属に比べて塑性変形しにくい硬い物質である．

固体中の原子の熱振動変位が等方的であるとすれば, 2 次元 ($xy$ 平面) での平均 2 乗振幅 $\langle \rho^2 \rangle$ は

$$\langle \rho^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle = 2\langle x_1^2 \rangle\,, \tag{340}$$

3 次元 ($xyz$ 空間) の平均 2 乗振幅 $\langle r^2 \rangle$ は

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = 3\,\langle x_1^2 \rangle \tag{341}$$

と表される.

**問題 15–1**　$T \to 0$ および $\infty$ の極限では，$\langle E \rangle$ はそれぞれ $\hbar\omega/2, kT$ に近づくことを確かめよ．
**問題 15–2**　(335) を導け.

表 1: 固体のデバイ温度および平均熱振動変位 $\sqrt{\langle x_1^2 \rangle}$ の室温 (298K) および 0K での値 $u_{298\mathrm{K}}, u_{0\mathrm{K}}$.

| Material | $\Theta$ (K) | $u_{298\mathrm{K}}$ (Å) | $u_{0\mathrm{K}}$ (Å) | 文献 |
|---|---|---|---|---|
| Diamond | 2000 | 0.042 | 0.039 | [13] |
| Al | 390 | 0.105 | 0.059 | [13] |
| Si | 540 | 0.075 | 0.049 | [13] |
| GaN | 880 | 0.058 | 0.032 | [66] |
| W | 310 | 0.050 | 0.025 | [13] |
| Au | 170 | 0.087 | 0.033 | [13] |
| Pb | 88 | 0.164 | 0.045 | [13] |

## 15.2　孤立原子と固体原子によるイオン散乱

RBS の解析では，化学的に結合している固体内原子によるイオンの散乱を孤立原子による散乱として扱っている. その妥当性の根拠を明確にするために，原子の結合の有無はイオン散乱にどのように反映されるのかを考察しておこう.

固体内において，原子の熱振動の速度 $v_{\mathrm{themal}}$ は $10^5$cm/s 程度であり，これは例えば 0.05 eV の H，あるいは 0.8 eV の O の速度に等しい. すなわちイオン散乱分光で用いられる 1keV 以上の粒子 (軽イオン) の速度は常に $v_{\mathrm{themal}}$ に比べて非常に大きく，衝突時に原子が受け取る反跳運動量 $p$ は一瞬のうちに，すなわち原子が熱振動変位した位置において止まった状態で移行が完了している.

簡単のため，$p$ は標的原子の原子核を励起することなしに，弾性的に移行したとする ($p$ は 2 体の弾性衝突として計算される).　固体内原子間の結合状態をバネで表現するモデルを用いれば，原子の力学的状態は調和振動子で近似される. その振動数を $\nu_{\mathrm{phonon}}$ とすれば，調和振動子のエネルギー準位 (フォノンの励起準位) は等間隔 $h\nu_{\mathrm{phonon}}$ で並んでいるから，原子の質量を $M$ として反跳エネルギー $E_{\mathrm{R}}$ が

$$E_{\mathrm{R}} = \frac{|p|^2}{2M} < h\nu_{\mathrm{phonon}} \tag{342}$$

であればフォノンは励起されず，したがって振動状態は不変であるから原子の周囲のバネはいわば凍結状態になっている. この場合には $p$ は標的試料全体の反跳に使われる. 標的の質量は通常の実験では $M \times 10^{22}$ 程度であるから，これは $M$ に比べて実質的に $\infty$ であり，したがって $E_{\mathrm{R}} = 0$ になるのでイオンは散乱によって運動エネルギーを失わない.

このような “無反跳過程”は量子力学系に特有な効果で，固体内原子から放出される $\gamma$ 線の Mössbauer 効果として観測される [68].　しかしながら，イオン散乱の実験では無反跳過程は検出困難である. 実際，イオンの速度を下げて $E_{\mathrm{R}}$ が $h\nu_{\mathrm{phonon}}$ すなわち 10 meV 程度を超えないような条件を設定し，散乱イオンのエネルギーの精密測定を企てても，固体内電子の励起による数 eV 以上のエネルギー損失は避けられない. また，(119) から明らかなように，小角度のラザフォード散乱の実験室系における散乱角は標的原子の質量に依存しない. そのため，$E_{\mathrm{R}}$ の小さい小角散乱の角度測定から無反跳過程を検出することも原理的に不可能である.

イオン散乱分析では $E_{\mathrm{R}}$ はフォノン励起エネルギーよりもはるかに大きく，したがって固体内原子の結合の効果は無視しうるほど小さい. もちろん孤立原子の場合と違ってフォノン励起をとも

なうが，その励起エネルギーは電子励起エネルギーに比べて小さいので問題にならない．

## 15.3　水素様イオンの軌道電子速度

１電子系である水素様イオンの軌道電子速度 $v_2$ の分布 $F_0(v_2)$ を求めてみよう．量子力学による扱いでは，軌道電子速度分布は電子波動関数の運動量表示と等価であり，それはFock により導かれた．

$F_0(v_2)$ は古典統計力学によっても同じ表現が得られるので，まずそれを示そう．電子の束縛エネルギーを $\mathscr{I}\,(>0)$ とすれば

$$-\mathscr{I} = \frac{m_{\mathrm{e}} v_2^2}{2} - \frac{Z_2 e^2}{r} \tag{343}$$

であるが，電子のとりうる状態をミクロカノニカル分布と仮定すれば

$$F_0(v_2)\,\mathrm{d}v_2 = C_0 \left( \int \delta\left(\mathscr{I} + m_{\mathrm{e}} v_2^2/2 - Z_2 e^2/r\right) \mathrm{d}^3 r \right) 4\pi v_2^2\,\mathrm{d}v_2 \tag{344}$$

と書ける.[30]　ここで $\delta(X)$ は変数 $X$ に対するデルタ関数を表す．また，$C_0$ は規格化定数であり

$$\int_0^\infty F_0(v_2)\,\mathrm{d}v_2 = 1 \tag{345}$$

となるように定める．(344) 中の積分により，水素様イオンの軌道電子速度分布 (Fock 分布) が

$$F_0(v_2)\,\mathrm{d}v_2 = \frac{32 u^5 v_2^2}{\pi (v_2^2 + u^2)^4}\,\mathrm{d}v_2 \tag{346}$$

のように求まる (問題 15–3)．ここで，$u$ は

$$m_{\mathrm{e}} u^2/2 = \mathscr{I} \tag{347}$$

で定義される．図 49 に $q = v_2/u$ を横軸として $F_0(q)$ を示す. ボーアの古典的原子模型に相当する分布 $\delta(v_2 - u)\,\mathrm{d}v_2$ との違いが理解できるであろう．$v_2 \le u$ と $v_2 \ge u$ における $F_0(v_2)$ の比 (面積比) は 0.71 : 0.29 であり，分布には明確な上限はない．

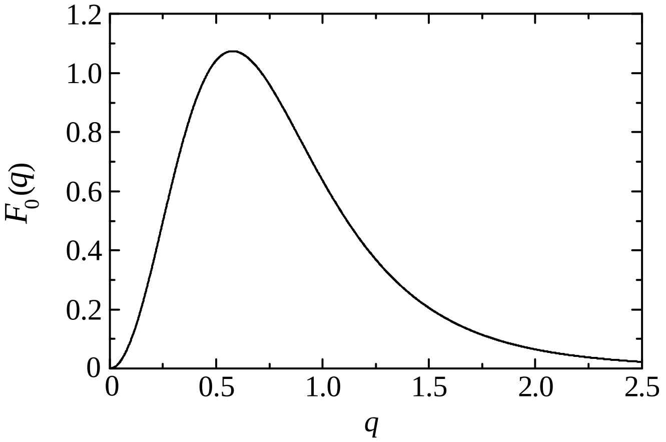


図 49: 水素様イオンの軌道電子速度分布 (Fock 分布)．$q = v_2/u$ を変数として表示してある．

[30]原子のトーマス–フェルミモデル (§6.2) における古典統計力学の使用と同じ考えかたである．

Fock 分布の量子力学的な導出を，水素の基底状態について示しておく [67]．まず，(83) のフーリエ変換で定義される，‘波数 $k$ の空間における波動関数’ $u_{1s}(k)$ を求めよう．実際，

$$\begin{aligned} u_{1s}(k) &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \psi_{1s}(r)\exp(-\mathrm{i}k\cdot r)\,\mathrm{d}^3 r \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\int_0^\infty 2\pi r^2\,\mathrm{d}r\int_0^\pi \exp(-\frac{r}{a_0})\exp(-\mathrm{i}kr\cos\theta)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi^5 a_0^5}}\frac{1}{(a_0^{-2}+k^2)^2} \end{aligned} \tag{348}$$

が得られる．ところで，(348) の逆フーリエ変換は

$$\psi_{1s}(r) = \int u_{1s}(k)\exp(\mathrm{i}k\cdot r)\,\mathrm{d}^3 k \tag{349}$$

であるから，(349) は「1s 電子状態とは，種々の波数 $k$ を持つ自由電子を表す平面波 $\exp(\mathrm{i}k\cdot r)$ を $u_{1s}(k)$ の割合で重ね合わせたものである」ことを意味する．これより，1s 電子の波数ベクトルが $k$ と $k+\mathrm{d}k$ の間に見出される確率は規格化定数を $C_\mathrm{n}$ として $C_\mathrm{n}|u_{1s}(k)|^2\,\mathrm{d}^3k$ のように表されることが理解される．通常，$C_\mathrm{n}$ は全確率が 1，すなわち

$$\int C_\mathrm{n}|u_{1s}(k)|^2\,\mathrm{d}^3k = 1 \tag{350}$$

となるように決められる．その結果，$C_\mathrm{n}=(2\pi)^3$ となる．波数と速度の間には，$k=m_\mathrm{e}v_2/\hbar$ の関係があるので，1s 軌道電子の速度分布は

$$\begin{aligned} (2\pi)^3|u_{1s}(k)|^2\mathrm{d}^3k &= (2\pi m_\mathrm{e}/\hbar)^3|u_{1s}(m_\mathrm{e}v_2/h)|^2\mathrm{d}^3v_2 \\ &= \left(\frac{2\pi m_\mathrm{e}}{\hbar}\right)^3\frac{1}{\pi^5 a_0^5}\frac{1}{[(m_\mathrm{e}v_2/h)^2+a_0^{-2}]^4}\,\mathrm{d}^3v_2 \end{aligned} \tag{351}$$

で与えられる．(351) は (346) に一致する (問題 15–5).

**問題 15–3** 一般に変数 $X$ の関数を $F(X)$ と書くとき

$$\int F(X)\,\delta(X)\,\mathrm{d}X = F(0) \tag{352}$$

である．この性質を用いて (344) 中の積分を行い，(346) を導け.

**問題 15–4** (346) は電子の速度が $v_2$ と $v_2+\mathrm{d}v_2$ の間に見出される確率を表している．このことから，運動エネルギーの量子力学的期待値は

$$\frac{m_\mathrm{e}}{2}\int_0^\infty v_2^2 F_0(v_2)\,\mathrm{d}v_2 = \frac{m_\mathrm{e}}{2}u^2 = \mathscr{I}\ , \tag{353}$$

すなわち束縛エネルギーに一致することを示せ.

**問題 15–5** 水素原子に対して $a_0=\hbar/m_\mathrm{e}u$ であることを示し，これを用いて (351) は (346) に一致することを示せ.

### 15.4　実験室系から入射イオン静止系への断面積変換

図 50 のように，実験室系において速度 $V$ のイオンが標的を電離した結果，速度 $v_1$ の電子が発生したとする．この電子の入射イオン静止系における速度を $v_0$ とすれば $v_1 = v_0 + V$，すなわち

$$v_1 \cos\theta_1 = v_0 \cos\theta_0 + V\ , \tag{354}$$

$$v_1 \sin\theta_1 = v_0 \sin\theta_0 \tag{355}$$

であるから，角度の関係式

$$\tan\theta_1 = \frac{\sin\theta_0}{\frac{V}{v_0} + \cos\theta_0} \tag{356}$$

を得る．(356) が 2 質点の弾性散乱における角度の関係式 (27) と類似になるのは，ベクトルの関係式 (354) と (17)，および (355) と (18) がそれぞれ対応することの結果である．

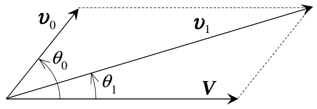


図 50: 実験室系と入射イオン静止系における速度ベクトル

実験室系における電子のエネルギースペクトルは，電子エネルギー $E_1$ と方向 $\Delta\Omega_1 = 2\pi \sin\theta_1 \Delta\theta_1$ に依存する 2 重微分断面積 $\partial^2\sigma/\partial E_1 \partial\Omega_1$ で表される．その積分から得られる断面積は

$$\int \frac{\partial^2\sigma}{\partial E_1 \partial\Omega_1} \mathrm{d}E_1\, \mathrm{d}\Omega_1 = \int \frac{\partial^2\sigma}{\partial E_1 \partial\Omega_1} \cdot J\, \mathrm{d}E_0\, \mathrm{d}\Omega_0 \tag{357}$$

のように書き換えられる．ここで $J$ はヤコビアン (Jacobian) であり，次の行列式で与えられる．

$$J = \frac{\partial(E_1, \Omega_1)}{\partial(E_0, \Omega_0)} = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial E_1}{\partial E_0} & \dfrac{\partial E_1}{\partial \Omega_0} \\ \dfrac{\partial \Omega_1}{\partial E_0} & \dfrac{\partial \Omega_1}{\partial \Omega_0} \end{vmatrix} \tag{358}$$

こうして，(357) の右辺の非積分関数が入射イオン静止系におけるエネルギースペクトル，すなわち

$$\frac{\partial^2\sigma}{\partial E_0 \partial\Omega_0} = \frac{\partial^2\sigma}{\partial E_1 \partial\Omega_1} \cdot J \tag{359}$$

であることがわかる．

$J$ の要素を求めよう．入射イオンと同速度の電子の運動エネルギーを

$$E' = \frac{mV^2}{2} \tag{360}$$

と表し，$E_0 = mv_0^2/2, E_1 = mv_1^2/2$ に注意すると，(354) および (355) から

$$E_1 = E_0 + 2\sqrt{E_0 E'}\cos\theta_0 + E' \tag{361}$$

を得る．これより

$$\frac{\partial E_1}{\partial E_0} = 1 + \sqrt{\frac{E'}{E_0}}\cos\theta_0 \tag{362}$$

$$\frac{\partial E_1}{\partial \Omega_0} = \frac{1}{2\pi\sin\theta_0}\frac{\partial E_1}{\partial\theta_0} = -\frac{\sqrt{E_0E'}}{\pi} \tag{363}$$

になる．次に (356) から

$$\frac{\partial\Omega_1}{\partial E_0} = 2\pi\sin\theta_1\frac{\partial\theta_1}{\partial E_0} = \pi\sin\theta_1\cos^2\theta_1\sin\theta_0\sqrt{E'/E_0}\,(\sqrt{E'}+\sqrt{E_0}\cos\theta_0)^{-2} \tag{364}$$

を得る．ただし，$\theta_1$ は (356) により変数 $E_0,\theta_0$ で表される．さらに (355)，(356) から

$$\frac{\partial\Omega_1}{\partial\Omega_0} = \frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_0}\cdot\frac{\partial\theta_1}{\partial\theta_0} = \sqrt{\frac{E_0}{E_1}}\cdot\frac{1+t\cos\theta_0}{1+t^2+2t\cos\theta_0}\text{ , ただし } t = \sqrt{\frac{E'}{E_0}}\,, \tag{365}$$

が導かれる．ただし，$E_1$ は (361) で与えられる．以上から $J$ を変数 $E_0,\theta_0$ で書くことができた．

特に 0° 電子分光 (§13.4) では $\theta_1 = 0°$，したがって (356) から $\theta_0 = 0, 180°$ であるが，いずれの場合も上述の $J$ を計算することにより

$$\frac{\partial^2\sigma}{\partial E_0\partial\Omega_0} = \sqrt{\frac{E_0}{E_1}}\cdot\frac{\partial^2\sigma}{\partial E_1\partial\Omega_1} \tag{366}$$

を得る．この場合，(361) は $\sqrt{E_1} = |\sqrt{E_0}\pm\sqrt{E'}|$ と書ける．

### 15.5　等速で直進する点電荷のつくる電磁場

静止した点電荷はクーロン静電場をつくるが，運動する点電荷は空間の位置 $r$ および時間 $t$ に依存する電場 $E(r,t)$ と磁束密度 $B(r,t)$ を生起する．この電磁場はマクスウェルの方程式の解として導かれるが，電磁場のローレンツ変換から導いてもよい．導出の詳細は中上級の電磁気学テキストにゆずることにして [69]，以下に概略のみをまとめておく．

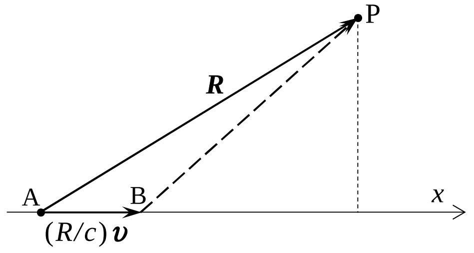


図 51: $x$ 軸上を一定速度 $v$ で走る点電荷が P 点につくる電磁場. 時刻 $t$ における $q$ の位置を B とすれば，同時刻 $t$ における P 点の電磁場は遅延時刻 $t-R/c$ における $q$ の位置 A で決まる．

図 51 のように，$x$ 軸上を一定速度 $v$ で走る点電荷 $q$ が，時刻 $t$ において空間の位置ベクトル $r$ の点 P につくる電磁場を求める．ここで，$R$ は $q$ から P に引いたベクトルである ($q$ の位置ベクト

ルは $r-R$). 電磁場は有限な速度 $c$ で伝わるので，伝播による遅延時間を考慮して $q$ による電磁ポテンシャルを重ね合わせることにより P における電磁場が導かれる．結果は以下のようになる．

$$E(r,t) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 R_1^3}\left(R - \frac{R}{c}v\right)\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) \tag{367}$$

$$B(r,t) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 R_1^3 c^2}(v \times R)\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) \tag{368}$$

$$R_1 = R - \frac{v \cdot R}{c} \tag{369}$$

ただし，$R, R$ は遅延時刻 $t - R/c$ における値である．$E(r,t)$ の方向は $R - (R/c)v$，すなわち図 51 における B→P の方向に一致する．(367), (368) から，P における電磁場が次の関係を満たすことがわかる．

$$B(r,t) = \frac{v \times E(r,t)}{c^2} \tag{370}$$

### 15.6　加速器による元素・物質分析のミニ技術史

本書で扱われている物理現象の多くは加速器によるイオンビームを利用して観測される．ここで，加速器の応用としての元素・物質分析の技術史を概観しておこう [70].

イオンビームを含めた放射線による物質の計測・評価技術の進歩は物質の原子構造もしくは格子欠陥の研究手段の歴史的発展に他ならない [71]. 物質の構造解析技術の代表ともいえる X 線回折は 1910 年頃の発見から約 40 年を経て，1950 年頃に技術的成熟を遂げている．X 線結晶解析の発展から成熟に至る経過をほぼ 20 年だけあとにずらすと，評価技術のもう一つの代表である電子顕微法 (electron microscopy) の発展史になる．

その後に現れた多種多様な放射線応用技術は 1950 年前後から，上記 2 つの実験技術の届かない部分を担うような方向へ高度化されてきた．基盤的な実験設備が，その出現時期には予想外であった物質評価技術に転用され，発展することがある．その好例は，放射線利用の拡大を促した加速器の普及とその利用技術の展開である．技術史において，世界初の 1 MeV 級加速器（Van de Graaff 方式の静電型）が世に現れたのは 1933 年のことである [72]. 物質構造の研究に加速器が登場するようになった契機の一つは 1960 年頃のイオンチャネリングと関連現象の発見であろう．簡単に言えば，道具（加速器）ができてから約 30 年を経て，その新しい利用法が見出され，結果として従来の回折結晶学にイオンビーム結晶解析法が新規に加わったのである．

このようなビーム応用の基礎となる物理現象が，ほぼ同時期に解明されたことも特記すべきである．事実，加速器利用原子物理の研究が 1950 年代に始まり，阻止能，荷電変換，イオン誘起 X 線，イオン誘起電子放出など，放射線と物質の相互作用の膨大な基礎データと知識が蓄積された．より一般的な視野に立てば，原子分子物理，放射線物理，物性・固体電子論，原子核物理等の複合知識に基づいて，放射線から物質への多様な形態のエネルギー・運動量移行の物理が整備されたと言える．これらの知識基盤が，加速器利用による分析技術の急速な発展と成熟をもたらしたのである．

物質・材料の側から原子レベルでの計測・評価の歴史を見ると，それらが工学的な性格を帯び始めたのは 1960 年代半ばである．重要な出来事として，「評価」の原義にあたる characterization

が米国で学術用語として定義され，計測・評価の内容が標準化された [73]．狙いはもちろん先端的産業へつながる機能材料開発の系統化と効率化である．この時期以降，人間の好奇心に基づく自然探求から社会性を帯びた競争的産業の一翼へと，多くの評価技術の立場が変貌してゆくことになる．

朝日新聞　2010年(平成22年)7月6日　火曜日　12版▲　科学　22

# 最新科学　古代人像見えた

## DNA解析・CT…精度向上

太古の人類像に迫る重要な発見や研究成果が国内外で相次いでいる。古い人骨のDNAを解読する技術や加速器など最新の分析機器を使い、研究の新たな地平が切り開かれている。現生人類の直系祖先と、地上から消え去った「われら以外の人類」。その姿が科学の力で解明になりつつある。（松尾一郎）

グリーンランドの永久凍土から見つかった約4千年前の毛髪の持ち主は、茶色の目ではげやすい男だった——。今年2月、デンマークなどの研究チームが、ゲノム（全遺伝情報）の解読結果から古代人の体質を推定した研究を報告した。

5月には、独マックスプランク進化人類学研究所などの国際チームは、現生人類以外では初めてとなる約4万年前のネアンデルタール人のゲノム解読結果の概要を発表。現生人類との混血の可能性が判明した。

「これまでは古人類の骨が出たらその形を調べた。今は骨片の遺伝子からプロファイリング（人物像の分析）もできる時代になった」。国立科学博物館（科博）の篠田謙一グループ長（分子人類学）は説明する。

人類学にDNA解析の手法が応用されてまだ日は浅いが、細胞内の小器官「ミトコンドリア」のDNAを調べる手法は一般化してきた。

核DNAは各細胞に2セットしかなく構成する塩基も長大だが、ミトコンドリアDNAは一つの細胞に多数あり、塩基も短く解析が比較的容易だからだ。突然変異を起こす確率も高く、変異の比較で系統関係を調べたり、分岐した年代を推定したりするのにも役立つ。3月に新たに存在が報告された4万8千年～3万年前の未知の人類「デニソワ人」の推定にもこの方法が応用された。

一方、最先端のゲノム解読は、次世代シーケンサーと呼ばれるDNA配列を同時並行で大量に読み取置の開発が可能にした。古人骨く断片化されたDNA配列を読り、現生人類のゲノム解読結果らし合わせながら分析する。

### 440万年前の頭復

昨年10月に報告された440前のラミダス猿人の研究では、イクロフォーカスX線CT（マロCT）」が力を発揮した。化を台の上に置いて回転させながX線を照射して骨や歯の断面影。医療用CTよりも精細な画得られる。

東京大学総合研究博物館の諏教授（自然人類学）は「精細なのため、歯のような小さなもの約1時間かけます」。表面を覆ナメル質の厚さの微妙な違いまかり、データはコンピューター在に組み合わせられる。

ラミダス猿人の頭部復元では片の断面を1万枚以上撮影。そち5千枚の画像から60以上の骨歯の3次元データをつくり、頭に組み上げた。

1万8千年前の沖縄本島に「港川人」の頭骨もマイクロC撮影、研究に役立てている。港は「縄文人の祖先」とされたが年は否定的な証拠が出つつある

科博の河野礼子研究員や東大の久保大輔さんらは港川人のマCTデータを解析、科博の海介研究主幹（古人類学）と下あ復元。国内外のデータと比較し方要素が強く本土の縄文人とはでない可能性を示した。これが1ストラリア先住民の特徴を含た復元モデル制作に結びつい

### 0.5ミリグラムでも年代測

年代測定の精度も高まってい



最近の主な人類学の成果報告

| | | |
|---|---|---|
| 2009年5月 | 独南部の洞穴で、約3万5千年前のビーナス像発見 | |
| 6月 | 独南部で、約3万5千年前の鳥の骨などのフルート発見 | |
| 10月 | エチオピアの440万年前のラミダス猿人①の化石研究から最古期の人類像を提示 | CT |
| 12月 | DNA研究で日本などアジア人の祖先はアフリカからインド・東南アジアを経て、大陸を北上した、と判明 | DNA |
| | 沖縄本島の約1万8千年前の港川人②の頭骨をマイクロCTを利用して再構成 | CT |
| 2010年2月 | 沖縄県石垣島の洞穴の人骨は2万年前と判明 | AMS |
| | グリーンランドの4千年前の男性の髪からゲノムの約8割を解読 | DNA |
| 3月 | ロシア・シベリア南部の4万8千年～3万年前の骨のDNAから未知の人類「デニソワ人」の存在浮上 | DNA |
| 4月 | 南アフリカ共和国の洞穴で、195万～178万年前のセディバ猿人の頭の骨など発見③ | |
| 5月 | クロアチアの約4万年前のネアンデルタール人の骨片からゲノム解読。現生人類との混血の可能性 | DNA |

グラフィック・加藤啓太郎 / The Asahi Shimbun

図 52: 加速器質量分析 (AMS) による年代測定は DNA 解析，CT 観察と並ぶ人類学の最新手法である．

# 参考文献


[1] H. Kudo, T. Kumaki, K. Haruyama, Y. Tsukamoto, S. Seki, H. Naramoto, Nucl. Instrum. Methods B **174**, 512 (2001).

[2] H. Kudo, *Ion-Induced Electron Emission from Crystalline Solids* (Springer Tracts in Modern Physics No. 175, Springer, Berlin, Heidelberg, 2002).

[3] 八木浩輔「原子核と放射」，朝倉書店，1980, 第 2 章.

[4] 最近の水素分析例として，A. Yamazaki, K. Sasa , S. Tomita, S. Ishii, H. Naramoto, M. Sataka, H. Kudo, G. Itoh, and M. Ohkubo, AIP Advances 9, 105111 (2019); doi: 10.1063/1.5099528.

[5] H. Kudo, H. Naramoto, M. Sataka, S. Ishii, K. Sasa, S. Tomitai: Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 554 (2024) 165404.

[6] N. F. Mott, H. S. Massey: *The Theory of Atomic Collisions*, 3rd ed. (Oxford University Press, Oxford, 1965) Chap. 2

[7] 高柳和夫「電子・原子・分子の衝突」, 培風館, 1972, および高柳和夫「原子衝突」，朝倉書店, 2007, 第 4 章.

[8] C. Froese Fischer: At. Data **4**, 301 (1972)

[9] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark: *The Stopping Power and Ranges of Ions in Solids*, Pergamon, New York, 1985.

[10] R. Smith, ed.: *Atomic and Ion Collisions in Solids and at Surfaces* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997)

[11] J. Lindhard: Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **34**, No. 14, 1 (1965).

[12] L. C. Feldman, J. W. Mayer, S. T. Picraux: *Materials Analysis by Ion Channeling* (Academic Press, New York, 1982)

[13] D. S. Gemmell: Rev. Mod. Phys. **46**, 129 (1974)

[14] M. T. Robinson and O. S. Oen: Phys. Rev., **132**, 2385 (1963).

[15] L. A. Giannuzzi, B. I. Prenitzer, B. W. Kempshall: “Ion–Solid Interactions”. In: *Introduction to Focused Ion Beams*, ed. by L. A. Giannuzzi and F. A. Stevie (Springer, New York, 2005) Chap. 2, §4.3

[16] J. H. Barrett: Phys. Rev. B **3**, 1527 (1971)

[17] H. D. Betz: Rev. Mod. Phys. **44**, 465 (1972)

[18] K. Shima, T. Mikumo, H. Tawara: At. Data Nucl. Data Tables **34**, 173 (1986)

[19] K. Shima, N. Kuno, M. Yamanouchi, H. Tawara: At. Data Nucl. Data Tables **51**, 173 (1992)

[20] P. Sigmund, *Stopping of Heavy Ions* (Springer Tracts in Modern Physics Vol. 204, Springer, Berlin, Heidelberg, 2004).

[21] イオンビーム工学 [イオン・固体相互作用編]，藤本文範・小牧研一郎編，内田老鶴圃，第 3 章，1995

[22] S. Datz, F. W. Martin, C. D. Moak, B. R. Appleton, L. B. Bridwell: Radiat. Eff. **12**, 163 (1972)

[23] A. Brunelle, S. Della-Negra, J. Depauw, D. Jacquet, Y. Le Beyec, and M. Pautrat: Phys. Rev. A **59**, 4456 (1999)

[24] 東俊行，日本物理学会誌，**56**, 502 (2001)

[25] 相対性理論の視覚的な説明として，Newton (ニュートンプレス, 東京), 2005 年 7 月号，“相対性理論”

[26] L. I. Schiff: *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (McGraw-Hill, New York, 1968)

[27] S. Datz, C. D. Moak, O. H. Crawford, H. F. Klause, P. F. Dittner, J. Gomez del Campo, J. A. Biggerstaff, P. D. Miller, P. Hvelplund, H. Knudsen: Phys. Rev. Lett. **40**, 843 (1978)

[28] H. Wakamatsu: Master thesis, Univ. of Tsukuba, 2006 (未公表データ)，　電子分光による RCE 測定に関して, H. Kudo, M. Nagata, H. Wakamatsu, S. Tomita: Nucl. Instr. and Meth., B **229**, 227 (2005)

[29] S. Datz, C. D. Moak, O. H. Crawford, H. F. Klause, P. D. Miller, P. F. Dittner, J. Gomez del Campo, J. A. Biggerstaff, H. KnudsenP. Hvelplund: Nucl. Instrum. Methods B **170**, 15 (1980)

[30] C. Kondo, S. Masugi, Y. Nakano, A. Hatakeyama, T. Azuma, K. Komaki, Y. Yamazaki, T. Murakami, and E. Takada: Phys. Rev. Lett., **97**, 135503 (2006)

[31] P. Sigmund: *Particle Penetration and Radiation Effects*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2006

[32] C. Lehmann: *Interaction of Radiation with Solids and Elementary Defect Production* (North-Holland, Amsterdam, 1977)

[33] 金子洋三郎,「化学のための原子衝突入門」, 培風館, 1999

[34] 高柳和夫,「原子分子物理学」，朝倉書店，2000

[35] ランダウ，リフシッツ,「量子力学 2」，§146, 1963 (好村，井上訳，東京図書).

[36] 山崎泰規「粒子線物理学」，丸善，1994.

[37] O. B. Firsov: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **36**, 1517 (1959) [Sov. Phys. JETP **9**, 1076 (1959)]

[38] J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schiøtt: Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **33**, No. 14 (1963)

[39] J. Lindhard: Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **28**, No. 8 (1954).

[40] B. Fastrup, P. Hvelplund: Can. J. Phys., **46**, 489 (1968)

[41] F. H. Eisen, Can. J. Phys., **46**, 561 (1968)

[42] S. Yamamoto, T. Sumita, Sugiharuto, A. Miyashita and H. Naramoto: Thin Solid Films **401**, 88 (2001)

[43] 木村健二，万波通彦: 表面科学 **14**, 385 (1993)

[44] P. P. Pronko, B. R. Appleton, O. W. Holland, S. R. Willson: Phys. Rev. Lett., **43**, 779 (1979)

[45] B. R. Appleton, O. W. Holland, J. H. Barrett: Nucl. Instr. and Meth., **191**, 507 (1981)

[46] O. W. Holland and J. H. Barrett: Phys. Rev. B **35**, 6495 (1987)

[47] H. Kudo, W. Iwazaki, R. Uchiyama, S. Tomita, K. Shima, K. Sasa, S. Ishii, K. Narumi, H. Naramoto, Y. Saitoh, S. Yamamoto, and T. Kaneko, Jpn. J. Appl. Phys., **45** L565 (2006)

[48] N. Stolterfoht, D. Schneider, D. Burch, H. Wieman, J. S. Risley: Phys. Rev. Lett., **33**, 59 (1974)

[49] N. Stolterfoht: “Excitation in energetic ion–atom collisions accompanied by electron emission”. In: *Structure and Collisions of Ions and Atoms*, ed. by I. A. Sellin (Springer, Berlin, Heidelberg, 1978) pp. 155–199

[50] L. H. Thomas: Proc. Cambridge Philos. Soc. **23**, 713 (1927)

[51] M. E. Rudd, J. H. Macek: Case Studies At. Phys. **3**, 47 (1972)

[52] M. E. Rudd, Y-K. Kim, D. H. Madison, T. J. Gay: Rev. Mod. Phys. **64**, 441 (1992)

[53] N. Stolterfoht, R. D. DuBois, R. D. Rivarola: *Electron Emission in Heavy Ion–Atom Collisions* (Springer, Berlin, Heidelberg, 1997) Chap. 5

[54] H. Kudo, N. Nakamura, K. Shibuya, K. Narumi, S. Yamamoto, H. Naramoto, K. Sumitomo, S. Seki: Nucl. Instrum. Methods B **168**, 181 (2000)

[55] H. Kudo, K. Shima, K. Masuda, S. Seki: Phys. Rev. B **43**, 12729 (1991)

[56] L. H. Andersen, M. Frost, P. Hvelplund, H. Knudsen, S. Datz: Phys. Rev. Lett., **52**, 518 (1984)

[57] C. Kittel: *Introduction to Solid State Physics*, 6th edition (John Wiley & Sons, New York, 1986), Chap. 10.

[58] 例えば，高橋秀俊「電磁気学」，裳華房, 1965，IV 章.

[59] 例えば，戸田盛和「電磁気学 30 講」, 朝倉，1996.

[60] C. J. Tung, J. C. Ashley, R. H. Ritchie: Surf. Sci. **81**, 427 (1979)

[61] V. N. Neelavathi, R. H. Ritchie, W. Brandt: Phys. Rev. Lett. **33**, 302 (1974)

[62] P. M. Echenique, R. H. Ritchie, W. Brandt: Phys. Rev. B **20**, 2567 (1979)

[63] D. S. Gemmell: Chem. Rev., **80**, 301 (1980), および引用文献.

[64] Z. Vager, D. S. Gemmell: Phys. Rev. Lett. **37**, 1352 (1976).

[65] J. M. Ziman: *Principles of the Theory of Solids* (Cambridge Univ. Press, Cambridge) 1972, Chap. 5.

[66] C. Roder, S. Einfeldt, S. Figge, D. Hommel: Phys. Rev. B **72**, 085218 (2005).

[67] 金子敏明「運動量保存と “非保存”」, 共立出版，1999.

[68] C. Kittel: *Quantum theory of solids*, Wiley, 1963, Chap. 20.

[69] 例えば，工藤博「電磁気学演習」，理工図書，2015，問 12.9，問 13.7.

[70] 工藤博：「放射線と産業」特別寄稿，(財) 放射線利用振興協会，112 巻，2006.

[71] 藤田英一「格子欠陥」，朝倉，1980, 第 1 章.

[72] この加速器は 4 半世紀稼動した後に米スミソニアン博物館に展示された. 関連文献：P. Richard, Methods of Experimental Physics, Vol. 17, (Academic, 1980), Chap.1.

[73] 1967 年，米国の National Research Council による．関連文献：鎌田仁，マイクロビームアナリシス（朝倉，1985），4 章.

# あとがき

2024.8.26 の改訂は図のファイル形式の変更 (eps から pdf へ) を含んでいる．これは最近の原稿作成用ソフト (tex) 環境の変化に合わせるためである．それ以外に §8.1 に加筆した．

2022.10.7 の改訂では §4.5 をより詳しく書き直した．これは近年の高エネルギーイオンの応用の広がりに対応するため (2022.10.11 HK).

初版以降 6 回目となる 2018.10.10 の改訂では，微分散乱断面積の座標変換を統一的に記述するため §2.2, §4.2，§4.3 を修正し §15.4 を加えた．さらに，本書のダウンロード数の総計 (2009.4∼2018.5) が $10^4$ 台に至った機会に，読み易さのため図の位置等を修正した．引き続き 2018.10.31 の改訂では §15.4 をより詳細に記述した．(2018.10.31 HK)

本書の「つくばリポジトリ」での公表開始 (2009 年 4 月) から 6 年が経過した．その間のダウンロード総計 5002 件 (2009 年 5 月～2015 年 5 月) という結果は，掲載当初の意図が概ね妥当であったことの証しであろう．2015 年改定版 (Ver.2015-6-3) には，主に電磁気学の視点からの記述 (§14.2，§14.3，§15.5) を加えた．

2015 年 6 月 3 日　工 藤 博

2002 年に *Ion-Induced Electron Emission from Crystalline Solids* (Springer Tracts in Modern Physics No. 175) を Springer からリリースした. この専門書はそれまでの約 20 年にわたる筑波大学大学院の講義「イオンビーム物性」,「放射線物性」の講義ノートを土台として私自身のイオン誘起電子放出の仕事をまとめたものである. そのときに実感したのは，専門書と大学の講義との間をつなぐ良い教科書 — 大学の研究室のセミナーに耐えうるテキスト — が世に乏しいということであった. ためらいつつも，本書「イオンビーム工学」を公開する理由の一つである.

もう一つの理由は電子的公開の魅力である. この公開方式は金銭上の利益を考えなければ良いことずくめである. 広い流通網，著者が随時行える加筆・修正と改訂版のアップロード，学生にとっては無料で入手できる知識 ⋯　　一方，出版社 (権威ある閲読者のチェックが入る) が介在すれば閲読による品質保証は一応確保されることになるが，学生の手の届きにくい高値が付けられるのは必至であろう.

そこで，本稿はインターネット上に構築された筑波大学図書館の「つくばリポジトリ」に試行的に掲載することにした. この原稿は出版社の閲読を経ていないかわりに，大学院の講義と応用原子物理研究室のセミナーで長年使用し，歴代の大学院生および同僚教員諸氏のご指摘に基づく加筆・修正が繰り返されて来た (これらの方々に深く感謝している). 電子公開のメリットのひとつであるアップデートの気楽さのため, 今後も必要であれば加筆・修正作業は続けたいと思っている.

2009 年 4 月 23 日　工 藤 博

工藤　博（くどう　ひろし）　筑波大学名誉教授．理学博士．1947 年東京生まれ．専門は応用原子物理学, イオンビーム実験物理学．京大大学院時代から 2010 年に筑波大学を定年退職するまでの間，京都大学，筑波大学，米国アルゴンヌ国立研究所，日本原子力研究所の静電加速器施設でイオンビーム・物質相互作用の実験研究を行った．2024 年現在，筑波大学タンデム加速器施設で運営関連業務の傍ら物質中の水素 (水), 重水素の分析研究を進めている．
主な著書： ◯ Ion-Induced Electron Emission from Crystalline Solids, Springer (2002). ◯ 電磁気学 (物理学基礎シリーズ 3)，理工図書 (2013). ◯ 電磁気学演習 (物理学基礎シリーズ 4)，理工図書 (2015).