

研究員報告書

第 8 号

(1987.3)

岡 山 理 科 大 学

岡山理科大学情報処理センター

岡山市理大町 1-1

Tel (0862) 52-3012

目 次

(昭和61年度)

1. 量子スピン系の新しいモンテカルロ・アプローチ

理学部応用数学科助教授 門 脇 真 示 1

京都大学工学部数理工学科教授 上 田 顯

2. 結晶におけるスパッタリングの計算機シミュレーション

教 養 部 竹 内 渉 13

3. A C A T

Professor Yasunori Yamamura 20

4. 固体内低速原子衝突

応 用 物 理 中 川 幸 子 40

5. 低エネルギーイオンの反射

大学院材質理学専攻 金 子 敏 明 43

6. 金属錯体のX線結晶解析

化 学 科 柴 原 隆 志 48

7. 多重辞書類似度法による手書き漢字識別の研究

工学部電子工学科助教授 塩 野 充 50

量子スピン系の新しいモンテカルロ・アプローチ

理学部応用数学科助教授 門 脇 真 示

京都大学工学部数理工学科教授 上 田 顯

量子スピン系の分配関数をモーメント展開によって評価するための簡便なモンテカルロ法を以前公表した。¹⁾今回、10個足らずの展開係数を内挿点として用いた有理関数近似による内挿公式を導入することにより必要となるすべての展開係数を一挙に求められるよう改良した。これにより、系の次元性によらず、かなり大きなスピン・サイズの有限スピン系へ適用可能となった。一例として、本方法を一次元スピン 1/2 等方的ハイゼンベルク強磁性体に適用する。

スピン 1/2 等方的ハイゼンベルク模型における N スピン系のハミルトニアンは次式で与えられる。

$$\mathfrak{H} = -1/2 J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \mu H \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \quad (1)$$

ただし、 $\vec{\sigma}$ はパウリのスピン演算子、 $J (> 0)$ は交換エネルギー、 $\langle ij \rangle$ は最近接スピン対、 μ は磁気モーメント、 H は z 方向の外部磁場を表わす。第一項の和は最隣接スピン・サイト i と j についてとる。また、周期境界条件を仮定している。 (ij) でサイト i と j におけるスピン状態の交換をおこなう演算子を定義することにする。Dirac 恒等式 $\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j = 2(ij) - 1$ ²⁾ を用いれば、ハミルトニアン(1)は

$$\mathfrak{H} = -J \sum_{b=1}^{N_b} (i_b j_b) - \mu H \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + 1/2 J N_b \quad (2)$$

で与えられる。ただし、 N_b は最近接ボンドの総数である。 $(i_b j_b)$ における添字 b はサイト i_b と j_b を結ぶボンドの番号であり、総和 \sum_b は N_b 個のボンドについてとる。エネルギーの原点を $-1/2 J N_b$ だけシフトすれば、系のハミルトニアンは

$$\mathfrak{H} = -J \sum_{b=1}^{N_b} (i_b j_b) + \mathfrak{H}_0 \quad (3)$$

で与えられる。ただし、 \mathfrak{H}_0 は(2)式の第二項である。詳細は省くが、置換群の性質³⁾ を利用してまとめあげると、零磁場中でのこの系の分配関数は次式のように簡単化できる。

$$Z = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{a_r}{r!} \tau^r, \quad \tau = k_B T/J \quad (4)$$

$$a_r = \sum_{C_r} A(C_r), \quad A(C_r) = 2^{k(C_r)}$$

ただし, C_r は r 個のボンド番号 b_1, b_2, \dots, b_r のすべてのとり得る組である。零磁場内での帯磁率を求める際に必要となる Z の $L (= \mu H/J)$ についての 2 階微分は

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial L^2} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{d_r}{r!} \tau^{-r}, \quad L = \mu H/J, \quad (5)$$

$$d_r = \sum_{C_r} D(C_r), \quad D(C_r) = A(C_r) \sum_{\ell=1}^N \mu \ell L^2$$

で与えられる。ここに, 各 μ は $1 \mu_1 + 2 \mu_2 + \dots + N \mu_N = N$ を満たされなければならない。 $\mu \ell$ は長さ ℓ のサイクルの個数, $k(C_r)$ は独立なサイクルの個数であり, $\sum \mu \ell$ に等しい。熱力学的諸量を評価するには展開係数 A_r および D_r を求める必要がある。(4)および(5)式のすべての展開係数を求めることは最新のスーパー・コンピュータをもってしても不可能である。幸い次のような内挿公式を導入することにより僅か 10 個足らずの内挿点によって十分高次の項までの展開係数の内挿値を与えることができることが分かった。つまり, $\ln A_r/N (= y_r)$ は $r/N (= x_r)$ の単調減少関数とみなせるとし,

$$y_r = \frac{\beta_0 + \beta_1 x_{r1} + \beta_2 x_{r2} + \dots + \beta_m x_{rm}}{\alpha_0 + \alpha_1 x_{r1} + \alpha_2 x_{r2} + \dots + \alpha_n x_{rn}} \quad (6)$$

なる有理関数近似による内挿公式を仮定した。 M 個の定数 α_1, \dots, β_m は斉一次方程式

$$\sum_{i=0}^m \beta_i x_{rk}^i - y_{rk} \sum_{i=0}^n \alpha_i x_{rk}^i = 0, \quad k = 1, 2, \dots, M \quad (7)$$

を解くことによって決定される。

さて, $N = 10, 20, 30$ および 128 の一次元系に対して本方法を適用し, その精度と有用性を示そう。一次元系に対しては, N_b は N に等しい。最初, $A_r (= a_r/N_s)$ は $r = 0$ で最大値 2^N をとり, r が大きくなるにつれて急速に減少していき, その後は徐々に減少し, $r = \infty$ で基底状態の縮重度である $N+1$ に収束していく。MC 値 \bar{A}_r がサンプル数 N_s を増やして行くとどのように収束して行くかをみるために, $N = 30$ にたいして, 幾つかの A_r を N_s の関数としてプロットしたのが図 1 に示してある。 $N_s \gtrsim 5 \cdot 10^6$ にたいして, 相対誤差は 0.2~0.5% である。熱力学的諸量はこのような誤差をもつ沢山の項の和で与えられる。しかしながら, 熱力学的諸量の相対誤差は個々の項の誤差よりはるかに小さいので十分な精度が期待できる。図 2 は前述の内挿公式によってえられた \bar{A}_r の値に基づく r/N の関数としての $\ln \bar{A}_r/N$ の値を示している。対応する r は表 1 にかけてある。括弧内の数値はサンプル数である。 $N = 128$ の 2 つのケースについては, ケース (a) は各熱力学的諸量の計算にたいして用いられ, ケース (b) は展開係数の極限值への収束性, 零点エントロピーお

よび零点エネルギーの収束性のチェックに対してのみ適用される (表 V 参照)。 A_r の内挿値の精度はモンテカルロ法によって直接に評価された A_r 値とあまりかわらないようである。 $\ln \bar{A}_r/N$ は N によらず $r=0$ で値 $\ln 2$ をとり, 十分大きな r においては零点エネルギーに対応する値 $\ln(N+1)/N$ に近づく。表 II では, $r/N=100$ での \bar{A}_r の値を与え, 加えて $N=128$ に対する $r/N=2000$ での値も与えてある。これは, 与えられたスピン・サイズに対して零度に近づくにはどれだけ多くの展開係数が必要となるかということに対して何等かの情報を与えるものである。 $N=128$ のケースは, $r=12,800$ で \bar{A}_r の値は $A_\infty (=129)$ の値からはかなり外れているが, 僅か $5 \cdot 10^3$ 個の N_s ではあるが $r=256,000$ のとき 140.176 を得ている。このことは本方法の有用性を支持するものである。

さて, 本方法の精確さを $N=10$ に対して厳密な数値計算を用いて求めた熱力学的諸量と比較することによって詳細に調べることとする。表 III は内挿法を用いてえられた展開係数 \bar{A}_r および \bar{D}_r の値を示している。 \bar{A}_r は $r=200$ で極限值 $A_\infty (=11)$ にほとんど収束している。 $r \geq 300$ に対しては僅かに小さな値となっているのはモンテカルロ法による統計誤差によるものと思われる。 $r=2000$ までの展開項を取り込むことによりえられる熱力学的諸量が表 IV にまとめられている。括弧内の数値は厳密な計算値である。比熱を除けば, 本結果は厳密な値とよい一致を示している。比熱において相対的に一致が悪いのは桁落ちが生じるからである。しかし, 僅か 9 個の展開係数を用いて内挿することにより, これらの熱力学的諸量を導き出していることに再度注目戴きたい。表 V は, 本結果が $N=10, 20$ および 30 という小さ目のスピン系に対して零点エントロピー $-\ln(N+1)/N$ および零点エネルギー -0.5 に精確に近かづいていることを示している。左端の欄は熱力学的諸量を求めるのに取り込んだ展開項の個数に関する情報を与えてくれる。 $N=10, 20, 30$ および 128 に対して, エントロピー, 内部エネルギー, 比熱および帯磁率がそれぞれ図 3 から図 6 に示されている。特に $N=128$ に対して, これらの熱力学的諸量の数値は温度 $k_B T/J = 1.00$ から 0.02 までに対して表 VI で示される。展開項の計算に際しては表 I で与えられたケース (a) の値が A_r の内挿に対して用いられ, $r=12,800$ までの項が表 V に示された通りに取り込まれる。帯磁率に対しては, Baker 達⁴⁾ の論文中的 (3.9) 式で与えられた $[4, 5]$ Padé 近似を用いた再計算値もまた表 VI の右端の欄にかけられている。 $k_B T/J = 1.0 \sim 0.2$ に対して, 両者間の一致は申し分ないが, $k_B T/J < 0.2$ に対しては, Baker 達の値の方が本結果より小さくなっている。これは低温においては彼らの Padé 近似による値は帯磁率を過小評価しているものと思われる。これは後述のベキ乗則 $x \sim T^{-r}$ の指数 r の値から明白となる。Chakraverty と Stein⁵⁾ によってえられた $N=128$ に対する帯磁率の値は $k_B T/J = 1.0, 0.6, 0.4$ および 0.2 でそれぞれ $1.869 \pm 0.004, 2.328 \pm 0.007, 2.841 \pm 0.010$ および 4.210 ± 0.022 であり, 本結果とよく一致している。われわれは $k_B T/J = 0.10$ 以下から 0.02 までの温度範囲で, 最小 2 乗法を用いて $N=128$ (a) に対して $r=1.79$ をえた。この値は Bonner と Fisher⁶⁾ によってえられた $r=1.80$ に匹敵する。Lyklema⁷⁾ はまた $r=1.75$ を得ている。Baker 達は $r=1.67$ を算出していて, いずれの値よりも小さい。このことが先に述べた通り低温部において彼らの値と本結果とのずれに関係している。この不一致は Baker 達は高温展開で最初の 21 項目までを厳密に計算し, そのあとで Padé 近似を用いて評価してはいるが, 本方法に比して低温部において重要

となる高次の項が十分に取り込まれていないことによって生じたものと考えられる。 $X_0 k_B T / Nu^2$ の $\log - \log$ カーブを注意深く調べてみると、有限システム・サイズの効果が見られる $k_B T / J \cong 0.02$ 以下では傾きの上昇の度合いが段々と緩やかになって来ている。このことは、システム・サイズを大きくしていくと、更にこのカーブの傾きが上昇し、 $r = 2^8$ に近づいていく可能性があることを示唆するものである。

Table I

N	10	20	30	128 (a)	128 (b)
r	1 (exact)	1 (exact)	1 (exact)	1 (exact)	1 (exact)
	9 (10^6)	10 (10^7)	10 (10^7)	5 (10^6)	10 (10^6)
	25 (10^6)	50 (10^7)	50 (10^7)	20 (10^6)	50 ($2 \cdot 10^6$)
	71 (10^6)	150 (10^7)	100 (10^7)	75 ($5 \cdot 10^6$)	128 ($7 \cdot 10^6$)
	150 (10^7)	300 (10^7)	150 (10^7)	128 ($7 \cdot 10^6$)	640 ($6 \cdot 10^6$)
	200 (10^7)	500 (10^7)	300 (10^7)	640 ($6 \cdot 10^6$)	1280 ($7 \cdot 10^6$)
	300 (10^7)	1000 (10^6)	500 (10^7)	1280 ($7 \cdot 10^6$)	3840 ($2 \cdot 10^6$)
	500 (10^6)	1500 (10^6)	2001 (10^6)	3840 ($2 \cdot 10^6$)	12800 (10^5)
	2000 (10^6)	3000 ($2 \cdot 10^7$)	6000 (10^6)	12800 (10^5)	256000 ($5 \cdot 10^3$)

Table II

N	r	\bar{A}_r	A_∞
10	1000	11.0001	11
20	2000	21.0206	21
30	3000	31.7175	31
128	12800	8598.1593	129
128	256000	140.1760	129

Table III

r	N_s	\bar{A}_r	\bar{D}_r
1	exact	512.000000	6144.000000
9	10^6	75.399512	1430.038344
25	10^6	24.904694	710.895544
71	10^6	12.305882	472.517800
150	10^7	11.054856	441.430312
200	10^7	11.002578	440.112954
300	10^7	10.996298	439.935792
500	10^6	10.992076	439.763856
2000	10^6	10.992055	439.935091

Table IV

$k_B T/J$	S/Nk_B	$-E/NJ$	C_H/Nk_B	$X_O k_B T/Nu^2$
1.00	0.56370 (0.55874)	0.37107 (0.37678)	$1.3460 \cdot 10^{-1}$ ($1.2969 \cdot 10^{-1}$)	1.8602 (1.8685)
0.90	0.54917 (0.54491)	0.38486 (0.38861)	$1.4098 \cdot 10^{-1}$ ($1.3270 \cdot 10^{-1}$)	1.9462 (1.9484)
0.80	0.53223 (0.52913)	0.39924 (0.40200)	$1.4638 \cdot 10^{-1}$ ($1.3509 \cdot 10^{-1}$)	2.0496 (2.0450)
0.70	0.51240 (0.51095)	0.41408 (0.41561)	$1.5015 \cdot 10^{-1}$ ($1.3713 \cdot 10^{-1}$)	2.1757 (2.1647)
0.60	0.48911 (0.48964)	0.42919 (0.42943)	$1.5166 \cdot 10^{-1}$ ($1.3945 \cdot 10^{-1}$)	2.3322 (2.3166)
0.50	0.46152 (0.46390)	0.44432 (0.44355)	$1.5051 \cdot 10^{-1}$ ($1.4305 \cdot 10^{-1}$)	2.5305 (2.5153)
0.40	0.42830 (0.43138)	0.45921 (0.45811)	$1.4710 \cdot 10^{-1}$ ($1.4846 \cdot 10^{-1}$)	2.7881 (2.7819)
0.30	0.38658 (0.38794)	0.47373 (0.47320)	$1.4325 \cdot 10^{-1}$ ($1.5229 \cdot 10^{-1}$)	3.1305 (3.1407)
0.20	0.32969 (0.32825)	0.48778 (0.48797)	$1.3518 \cdot 10^{-1}$ ($1.3723 \cdot 10^{-1}$)	3.5692 (3.5838)
0.10	0.25834 (0.25821)	0.49853 (0.49853)	$5.5886 \cdot 10^{-2}$ ($5.8702 \cdot 10^{-2}$)	3.9467 (3.9476)
0.09	0.25285 (0.25270)	0.49905 (0.49906)	$4.5576 \cdot 10^{-2}$ ($4.6072 \cdot 10^{-2}$)	3.9653 (3.9659)
0.08	0.24826 (0.24804)	0.49944 (0.49946)	$3.2831 \cdot 10^{-2}$ ($3.3430 \cdot 10^{-2}$)	3.9765 (3.9798)
0.07	0.24467 (0.24440)	0.49971 (0.49973)	$2.1474 \cdot 10^{-2}$ ($2.1594 \cdot 10^{-2}$)	3.9897 (3.9892)
0.06	0.24212 (0.24189)	0.49988 (0.49989)	$1.2235 \cdot 10^{-2}$ ($1.1634 \cdot 10^{-2}$)	3.9963 (3.9947)
0.05	0.24055 (0.24047)	0.49996 (0.49997)	$5.5805 \cdot 10^{-3}$ ($4.6351 \cdot 10^{-3}$)	3.9999 (3.9972)
0.04	0.23982 (0.23991)	0.50000 (0.50000)	$1.5721 \cdot 10^{-3}$ ($1.066 \cdot 10^{-3}$)	4.0012 (3.9976)

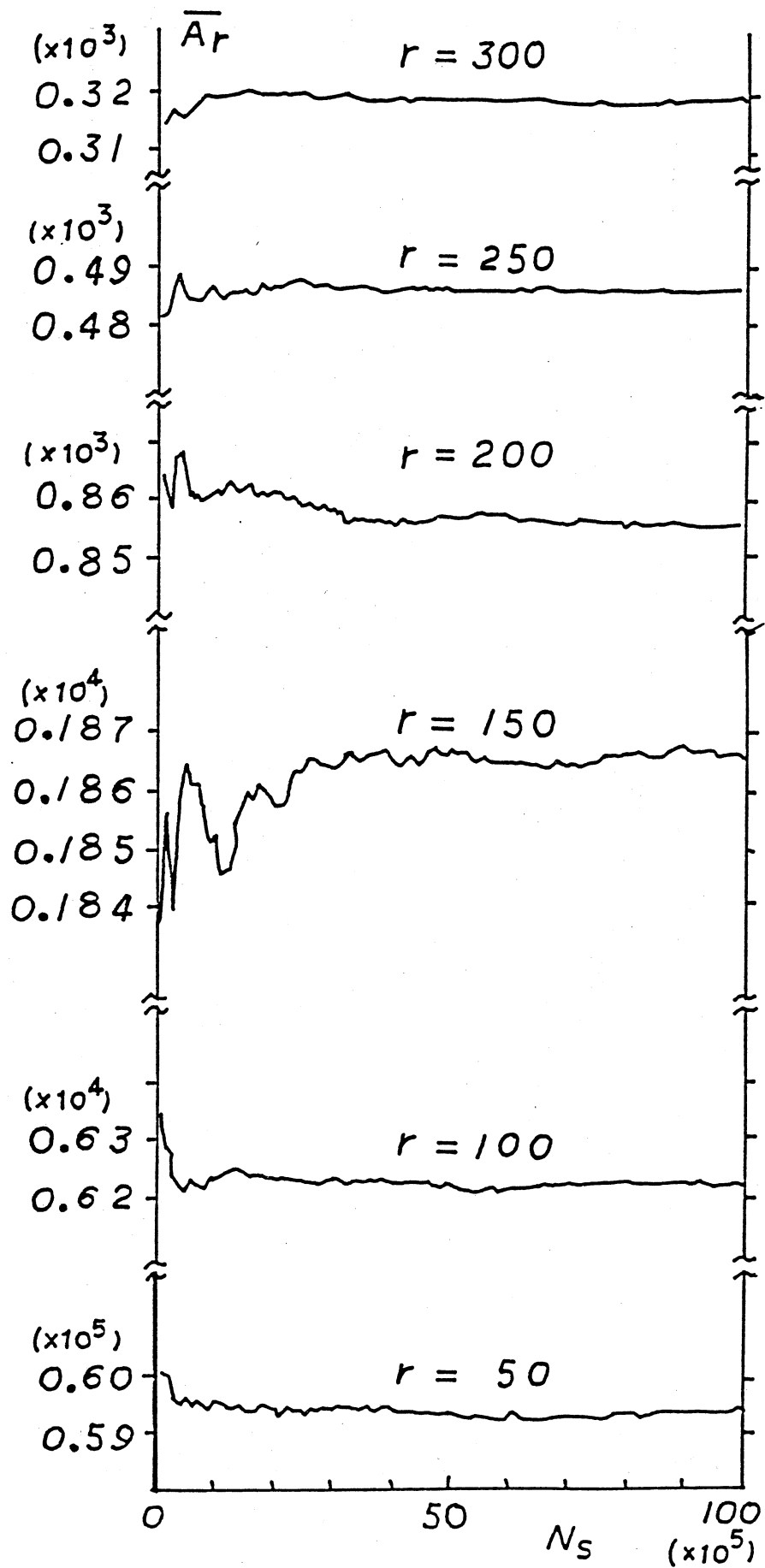
Table V

N	$k_B T/J$	S/Nk_B	zero-point entropy	$-E/NJ$	the used terms		
10	0.040	0.23980	0.2397895	0.50000	0	~	2000
20	0.010	0.15233	0.1522261	0.50000	0	~	3000
30	0.006	0.11442	0.1144662	0.50000	0	~	6000
128	0.020	0.13689	0.0379673	0.49916	0	~	12800
128	0.003	0.05924	0.0379673	0.49996	0	~	50000

Table VI

$k_B T/J$	S/Nk_B	$-E/NJ$	C_H/Nk_B	Ours	$X_O k_B T/Nu^2$ Padé
1.00	0.55935	0.37488	0.12885	1.8716	1.8689
0.90	0.54559	0.38794	0.13217	1.9535	1.9490
0.80	0.52987	0.40129	0.13467	2.0528	2.0464
0.70	0.51177	0.41484	0.13613	2.1764	2.1676
0.60	0.49076	0.42847	0.13630	2.3348	2.3238
0.50	0.46601	0.44205	0.13493	2.5466	2.5340
0.40	0.43623	0.45540	0.13182	2.8469	2.8348
0.30	0.39901	0.46835	0.12683	3.3141	3.3069
0.20	0.34907	0.48069	0.11952	4.1728	4.1720
0.10	0.27092	0.49204	0.10524	6.5356	6.3842
0.09	0.25997	0.49308	0.10262	7.0493	6.8247
0.08	0.24806	0.49410	$0.99537 \cdot 10^{-1}$	7.6910	7.3566
0.07	0.23501	0.49507	$0.95881 \cdot 10^{-1}$	8.5155	8.0136
0.06	0.22057	0.49601	$0.91511 \cdot 10^{-1}$	9.6144	8.8512
0.05	0.20436	0.49690	$0.86247 \cdot 10^{-1}$	$1.1143 \cdot 10^1$	9.9615
0.04	0.18583	0.49773	$0.79861 \cdot 10^{-1}$	$1.3393 \cdot 10^1$	$1.1521 \cdot 10^1$
0.03	0.16400	0.49849	$0.72009 \cdot 10^{-1}$	$1.6934 \cdot 10^1$	$1.3911 \cdot 10^1$
0.02	0.13689	0.49916	$0.61897 \cdot 10^{-1}$	$2.2934 \cdot 10^1$	$1.8169 \cdot 10^1$

⊠ 1



☒ 2

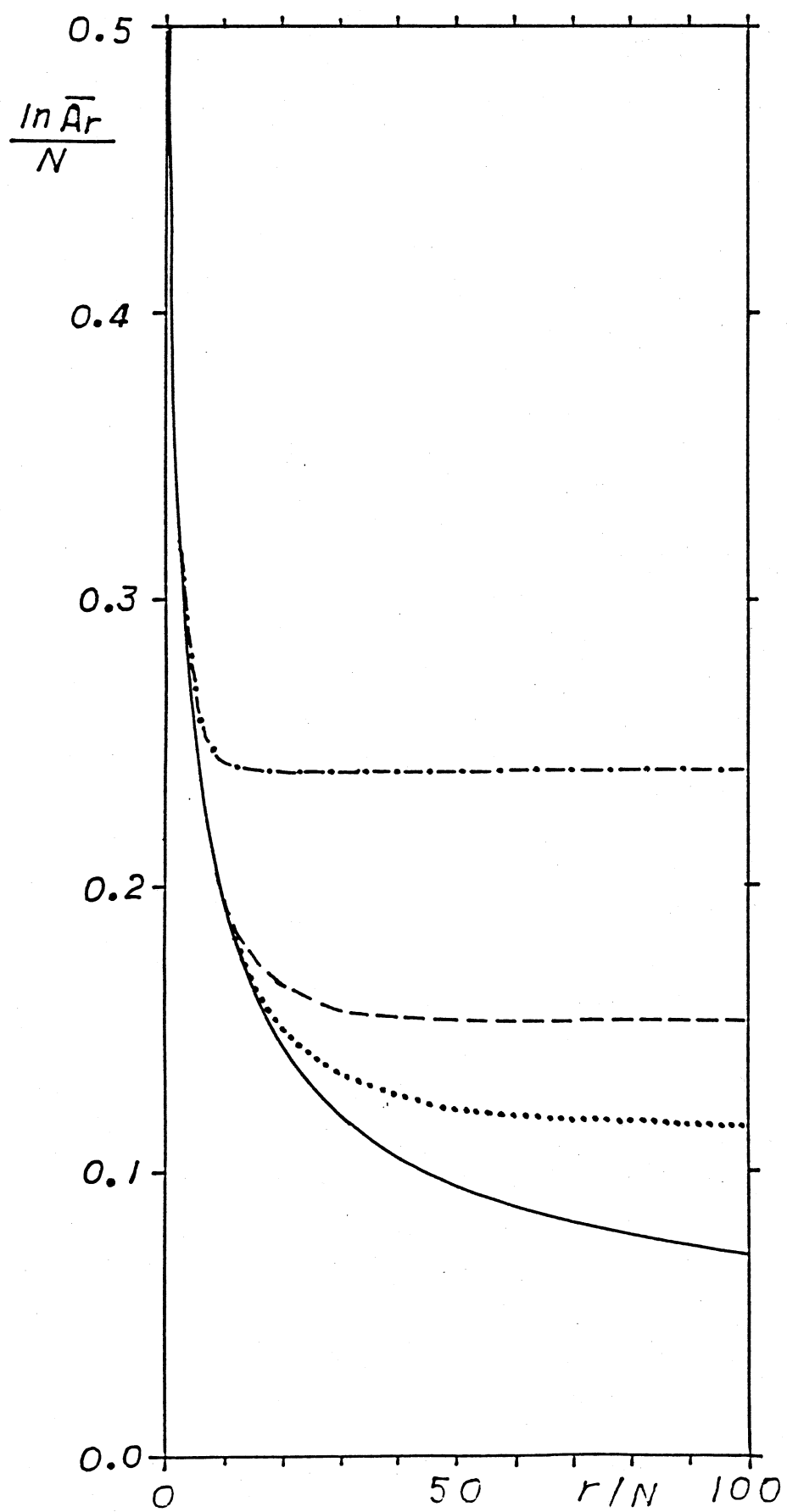
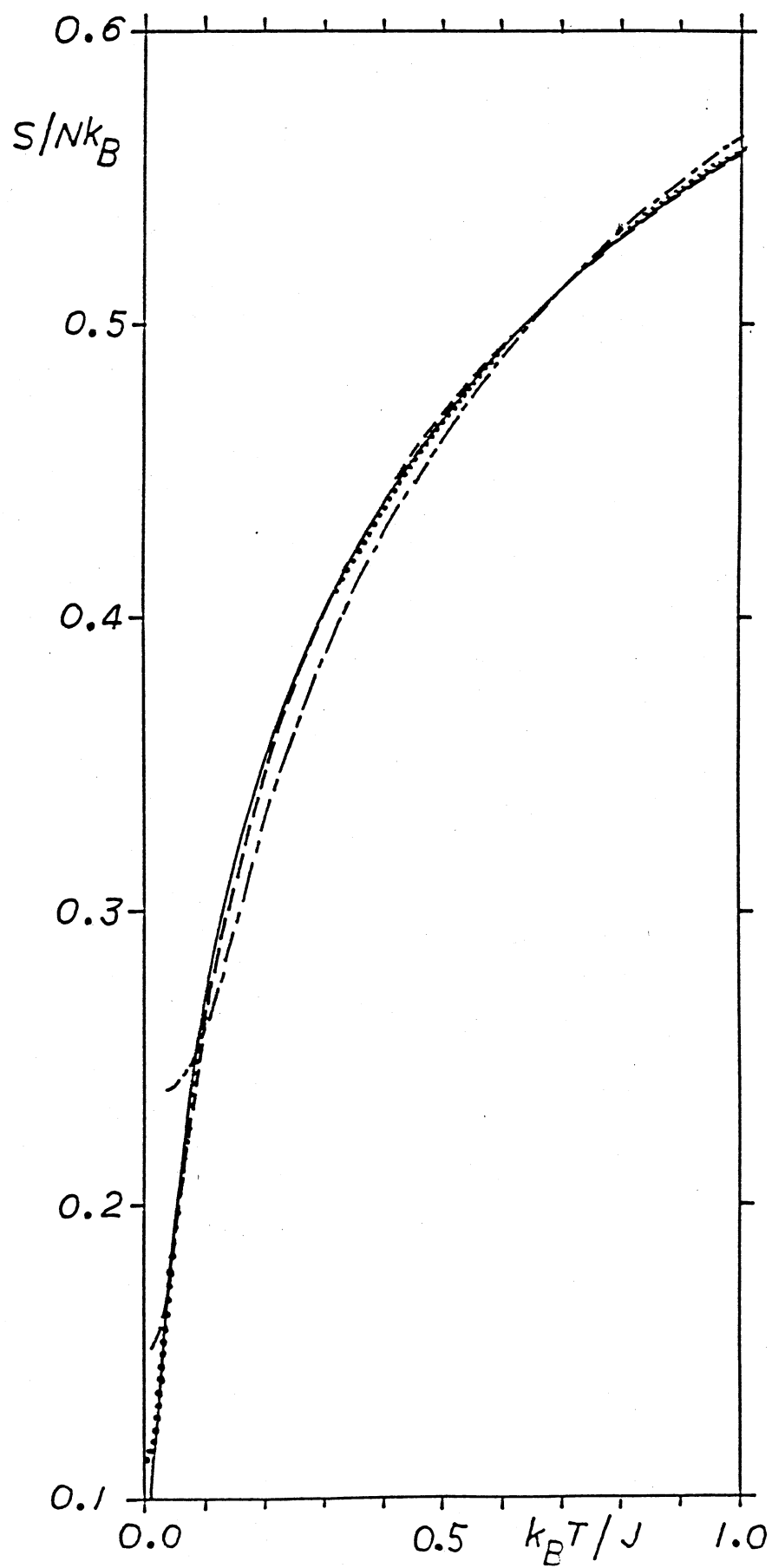
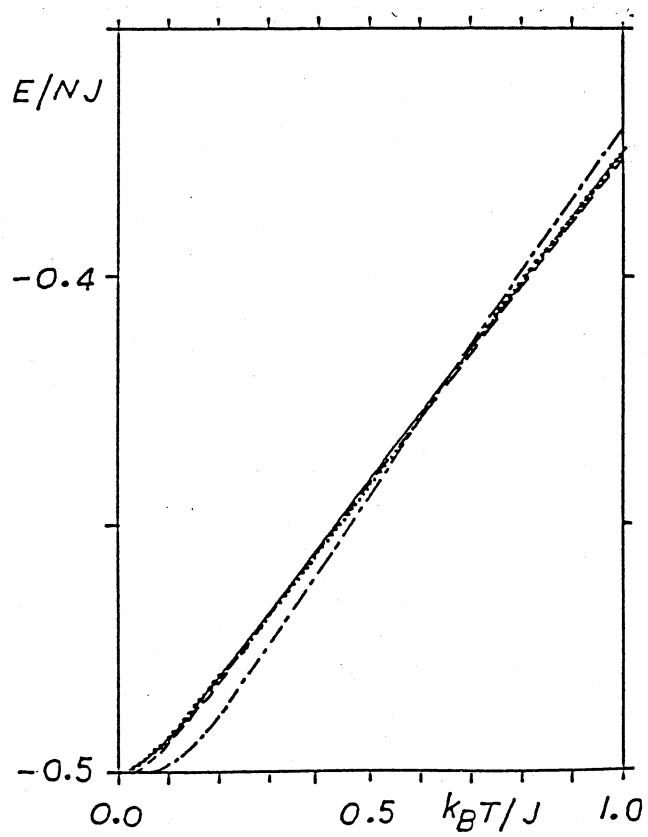


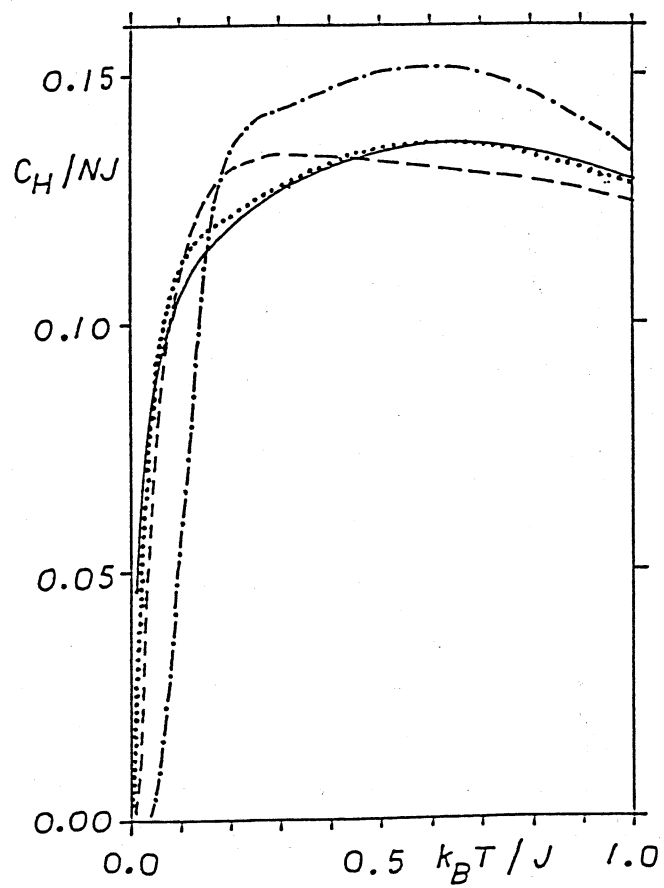
图 3

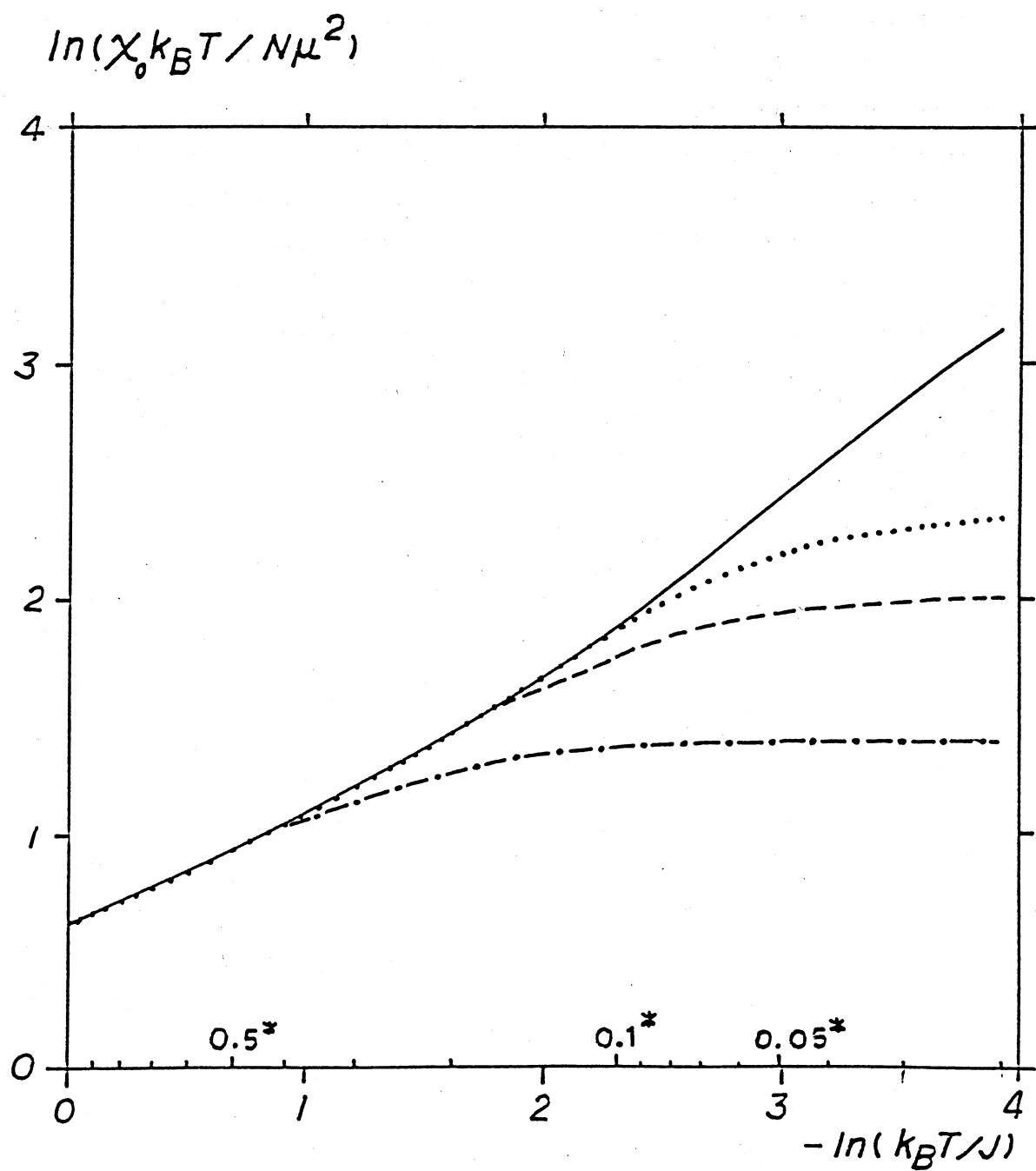


☒ 4



☒ 5





参 考 文 献

- 1) S.Kadowaki and A. Ueda, Prog. Theor. Phys. 75 (1986), 451
- 2) P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, 4th ed.
(Clarendon, Oxford, 1958), p. 222.
- 3) M. Hamermesh, Group Theory and Its Application to Physical P
(Addison-Wesley, 1964).
- 4) G. A. Baker, G. S. Rushrooke and H. E. Gilbert, Phys. Rev. A135 (1964), 1272.
- 5) S. Chakvaraty and D. B. Stein, Phys. Rev. Lett. 49 (1982), 582.
- 6) J. C. Bonner and M. E. Fisher, Phys. Rev. A135 (1964), 640.
- 7) J. W. Lyklema, Phys. Rev. B27 (1983), 3108.
- 8) M. Takahashi and M. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985), 2808.
P. Schlottmann, Phys. Rev. Lett. 54 (1985), 2131.

結晶におけるスパッタリングの計算機シミュレーション

教養部 竹 内 渉

1. はじめに

結晶におけるスパッタリングをシミュレートできるプログラムを開発した。このプログラム・コードをACOCT (Atomic Collisions in a Crystalline Target) コードと呼ぶことにする。以下で、簡単にACOCTコードを説明する。

2. ACOCTコードのモデル

(a) 結晶構造モデル

結晶は空間格子と basis とからできているという性質を利用している。シミュレートできる結晶構造は

- (i) simple cubic
- (ii) FCC (faced - centered cubic)
- (iii) BCC (body - centered cubic)
- (iv) diamond
- (v) HCP (hexagonal close - packed)

の結晶である。

(b) 2 体間衝突近似

弾性衝突は 2 体間衝突近似により取り扱われる。斥力により相互作用している 2 体粒子の軌道は Fig.1 で示されている。

重心系での散乱角 Θ は

$$\Theta = \pi - 2p \int_{r_0}^{\infty} dr \left[r^2 g(r) \right]^{-1}, \quad (1)$$

time integral τ は

$$\tau = (r_0^2 - p^2)^{1/2} - \int_{r_0}^{\infty} dr \left[\{g(r)\}^{-1} - (1 - p^2/r^2)^{-1/2} \right] \quad (2)$$

により与えられる。ただし,

$$g(r) = \left[1 - p^2/r^2 - V(r)/E_r \right]^{1/2} \quad (3)$$

であり、 p は衝突係数、 E_r は相対運動エネルギー、 r は原子間距離、 $V(r)$ は原子間ポテンシャル、 r_0 は $g(r_0)=0$ で定義される最近接距離である。 Θ と τ は 4 点 Gauss-Legendre 公式により計算される。また、相対運動エネルギー E_r は

$$E_r = \frac{A}{A+1} E_0 \quad (4)$$

により求められる。ただし、 E_0 は入射粒子の入射エネルギー、 $A=M_2/M_1$ 、 M_1, M_2 はそれぞれ入射粒子、標的原子の質量である。

Fig.1 で示されているように、入射粒子と標的原子の軌道は実験室系での 2 体間衝突の漸近線に沿って運動すると仮定する。入射粒子の軌道を求める際、deflection point は衝突前の標的原子の位置から x_1 だけ後方にずれる。一方、標的原子の軌道では出発点は標的原子の位置から x_2 だけ前方へずれる。 x_1, x_2 は

$$x_1 = \left[2\tau + (A-1)p \cdot \tan(\Theta/2) \right] / (A+1), \quad (5)$$

$$x_2 = p \cdot \tan(\Theta/2) - x_1 \quad (6)$$

で与えられる。

重心系での入射粒子の散乱角 Θ と実験室系での入射粒子の散乱角 θ 、標的原子の散乱角 ϕ との関係は

$$\theta = \tan^{-1} \left(\frac{A \sin \Theta}{1 + A \cos \Theta} \right), \quad (7)$$

$$\phi = \frac{\pi}{2} - \frac{\Theta}{2} \quad (8)$$

で表わされる。

衝突による標的原子へのエネルギー変換 T は

$$T = \gamma E_0 \cdot \sin^2 \frac{\Theta}{2} \quad (9)$$

により求められる。ただし、

$$\gamma = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (10)$$

である。散乱後における入射粒子のエネルギー E_1 は

$$E_1 = E_0 - T \quad (11)$$

により与えられる。

(c) 原子間ポテンシャル

ACOCTコードでは, 遮蔽Coulomb ポテンシャル

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi(r/a_s) \quad (12)$$

が用いられている。ただし, $\phi(x)$ は遮蔽関数, a_s は遮蔽半径, Z_1, Z_2 はそれぞれ入射粒子, 標的原子の原子番号である。原子間ポテンシャル $V(r)$ の遮蔽関数として

- (i) Molière 近似
- (ii) Kr - C 近似
- (iii) Ziegler 近似
- (iv) Lenz - Jensen (LJ) 近似
- (v) aLJ 近似
- (vi) aMLJ 近似
- (vii) Sommerfeld 近似

を選べるようにACOCTコードに組み込まれている。

(d) electronic energy loss

electronic energy loss ΔE_e として, 3つのモデルを選べる。

- (i) trajectory - dependent energy loss model(non - local model)

このモデルは衝突係数に依存しなくて

$$\Delta E_e = L_m N S_e(E) \quad (13)$$

で与えられる。ただし, L_m は衝突後, 次の衝突まで粒子が進む距離, N は標的原子の個数密度, $S_e(E)$ は electronic stopping cross section である。

- (ii) Oen - Robinson energy loss model(local model)

最近接距離を通して衝突係数に依存し

$$\Delta E_e = \frac{0.045}{\pi a_s^2 (1 - \alpha)} S_e(E) \exp \left[-0.3 r_0(p, E) / a_s \right] \quad (14)$$

で表わされる。ただし, $1 - \alpha$ は correction term である。

- (iii) mixed model

$\lambda(E) < 5 R_0$ に対して local model

$\lambda(E) > 5R_0$ に対して non-local model

を用いる。ただし、 R_0 は結晶の格子定数、 $\lambda(E)$ は平均自由行程であって、 $\lambda(E)=1/(Nb^2)$ で与えられる。なお、 $b=r_0(0, E)$ は collision diameter である。

(e) 熱振動

原子が互いに自由に振動しているとみなす Einstein model を用いている。また、熱振動の確率分布関数 $f(u)$ として Gauss 分布を使用する。即ち

$$f(u) = (2\pi u_1^2)^{-1/2} \exp \left[-u^2 / (2u_1^2) \right] \quad (15)$$

である。ただし、 u は変位、 u_1 は 1 次元の rms 値である。 u_1 は Debye model を用いて

$$u_1 = 12.1 \left[\{ \Phi(x) / x + 1/4 \} / (M_2 T_D) \right]^{1/2} (\text{\AA}) \quad (16)$$

で与えられる。ただし、 T_D は Debye 温度、 $\Phi(x)$ は Debye 関数、 $x = T_D / T$ 、 T は結晶の温度である。

3. シミュレーション結果

結晶スパッタリングの特徴の 1 つは、結晶表面の対称性を反映する ejection pattern である。Fig. 2 から Fig. 5 において、FCC, BCC, diamond, HCP 構造の結晶でスパッターされた原子の ejection pattern とそれらの結晶の主な面の side view を示した。ただし、入射イオンは 1 keV Ar^+ イオンで $T=0\text{ K}$ の場合であり、矢印は side view の方向を意味し、○印は同一平面内にある原子を示す。結晶の対称性を反映して或る方向によくスパッターされていることを表わしている。

さらに、ACOCT コードの正当性を検討するために、実験結果とよく知られている MARLOWE コードの結果と比較してみた。Fig. 6 は 5 keV Ar^+ イオンを入射角の関数として Cu(100) 面に照射した結果であり、入射角は Cu を (100) 面内の $[011]$ 軸のまわりに回転させることによって変化する。Fig. 6 より、ACOCT コードと MARLOWE コードの一致はよい。

4. む す び

今回開発した ACOCT コードを用いて、結晶におけるスパッタリング収量を求めた。それを MARLOWE コードや実験結果と比較して満足な結果を得た。今後、二成分系結晶にも応用出来るようにする計画である。

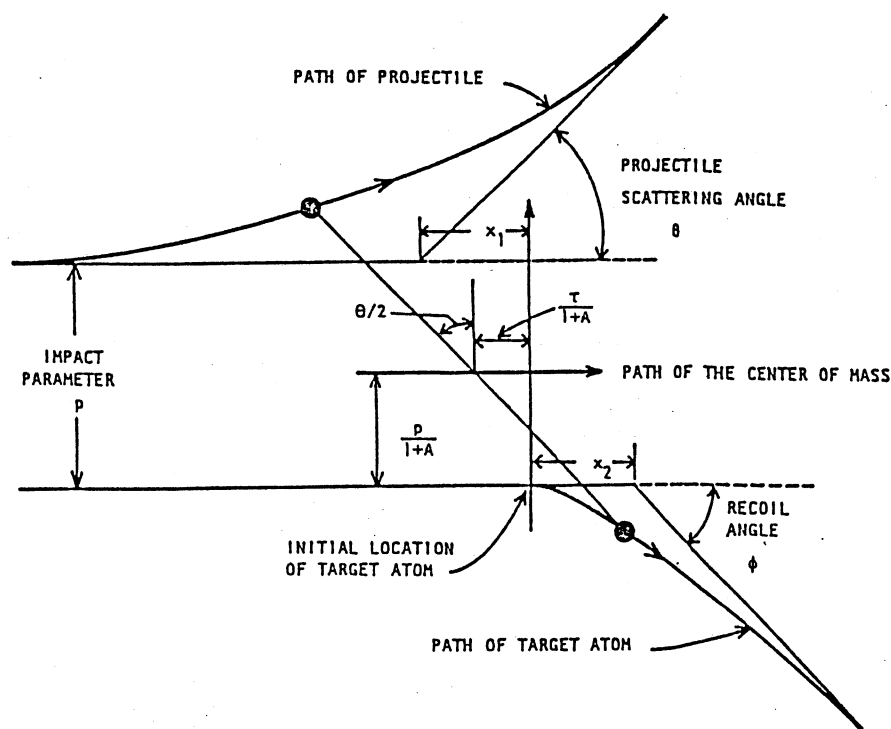


Fig.1 Trajectories in the laboratory system of two particles interacting according to the central repulsive force.

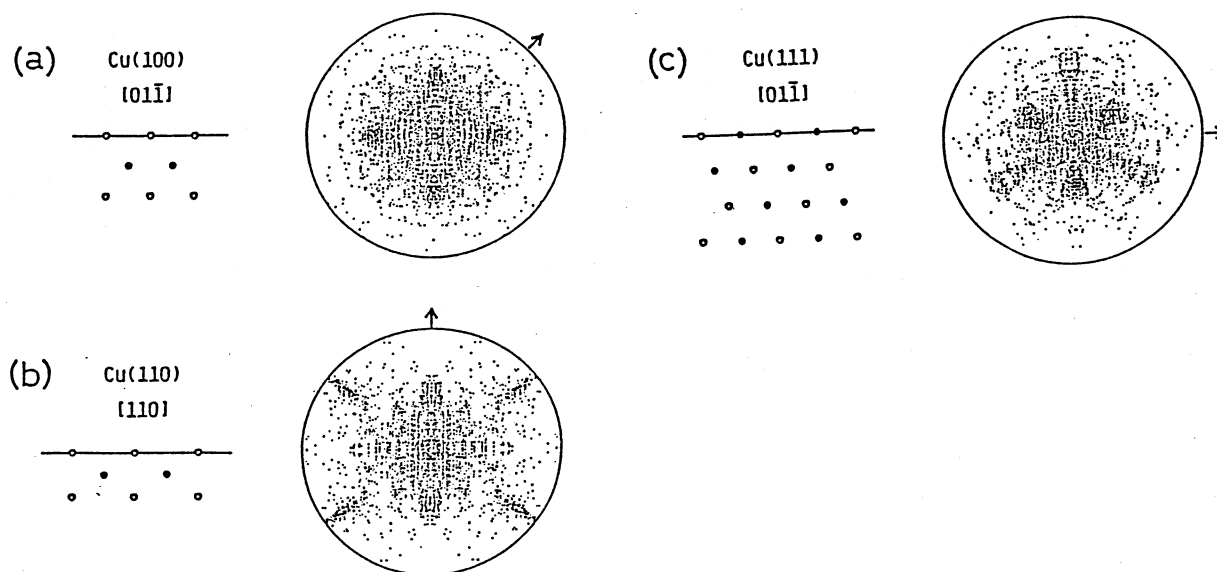


Fig.2 Ejection patterns for 1 keV Ar^+ ions incident on a copper crystal and $T = 0 \text{ K}$, where T is the crystal temperature.

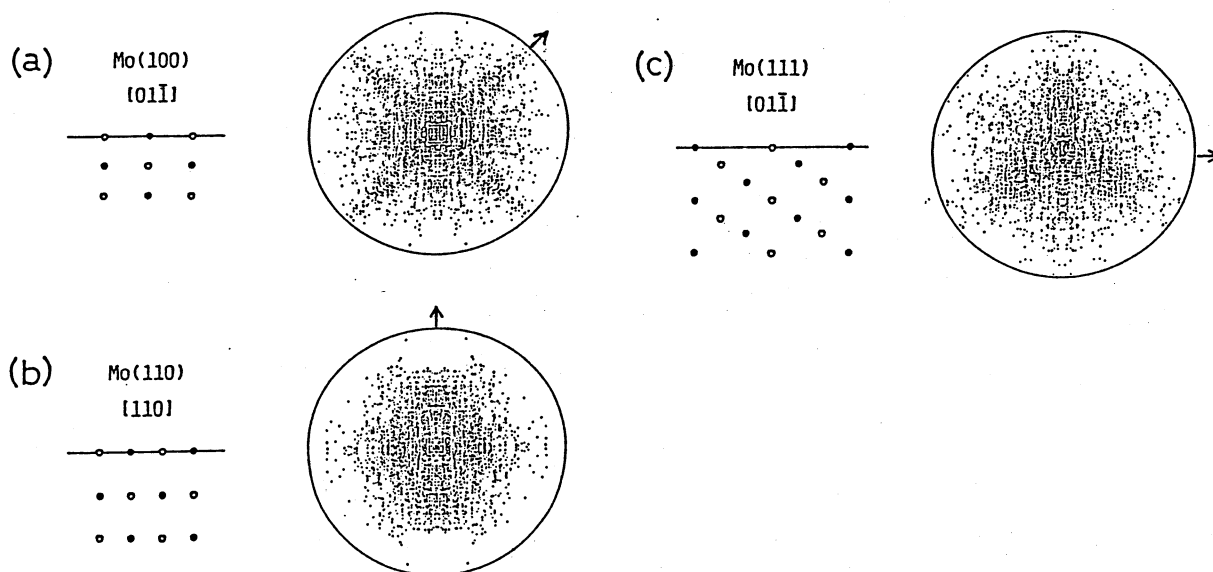


Fig.3 The same as Fig.2, but for a molybdenum crystal.

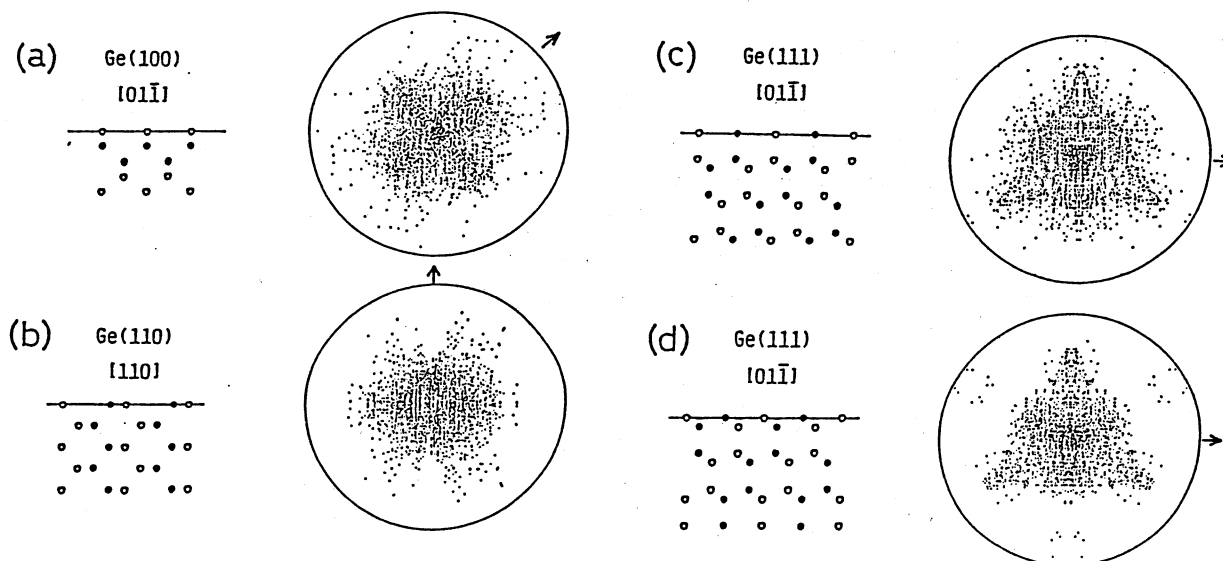


Fig.4 The same as Fig.2, but for a germanium crystal.

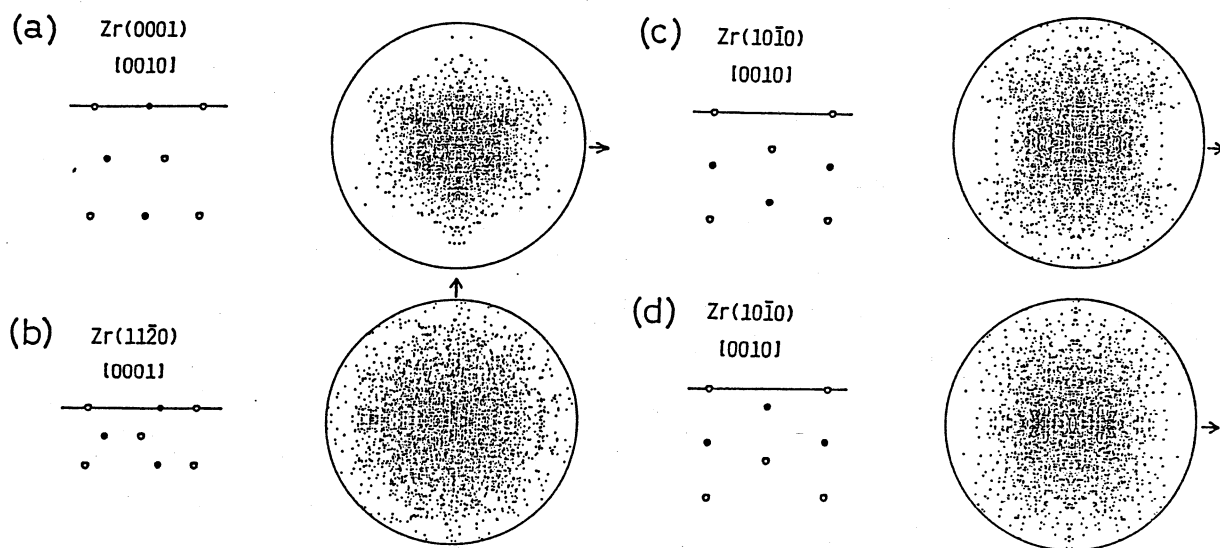


Fig.5 The same as Fig.2, but for a zirconium crystal.

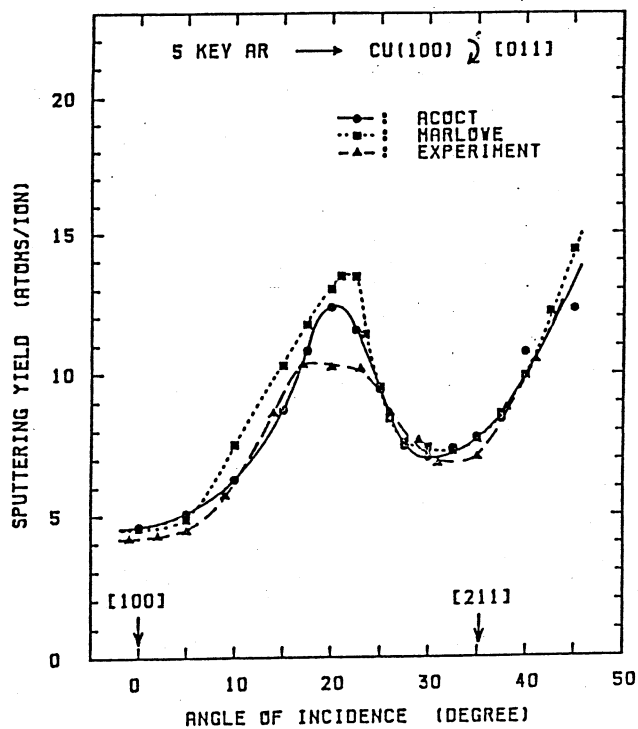


Fig.6 Comparison of ACOCT results with MARLOWE and experimental ones for the incident-angle dependence of the sputtering yield.

ACAT

Yasunori Yamamura, Professor

Department of Applied Physics,
Okayama University of Science,
Ridai-cho 1-1, Okayama 700 Japan

Abstract This document is intended to acquaint the reader with the computer code ACAT. ACAT may be used to calculate the various phenomena such as sputtering, reflection, range distribution and damage distribution associated with atomic collisions in amorphous targets. This document includes a description of the physical model, code input and output format, and three typical sample problems and their output.

1. INTRODUCTION

This document is intended to acquaint the reader with the computer code ACAT¹ which is based on the binary collision approximation in simulating the atomic collisions in solids. ACAT may be used to calculate the various physical phenomena associated with the atomic collisions in amorphous targets.

Up to now we have several Monte Carlo simulation codes, i. e., MARLOWE², TRIM.SP³ and ACAT¹. MARLOWE code was originally developed to simulate atomic collisions in a single crystal. In order to apply this code to the amorphous target, the crystal axis should be rotated randomly in three dimensions before each collision.

On the other hand, TRIM⁴ code has been designed to simulate atomic collisions in the random target assuming the fixed mean free path with the value $N^{-1/3}$ (N is the number density of target atoms) and the impact parameter is randomly selected at each collision. Recently Biersack and Eckstein³ modified the previous existing TRIM⁴ code in order to follow the recoil atoms as well as ions. This modified TRIM code is named as TRIM.SP. In the TRIM.SP program the simultaneous scattering events are effectively taken into account.

In the ACAT program an amorphous target is simulated employing the so-called cell model, in which a target atom is randomly selected at a simple

cubic cell of a lattice constant $R_0 = N^{-1/3}$. In the MARLOWE and ACAT codes, the position of an atom is uniquely determined, and the impact parameter is calculated through the relation between the direction of the moving particle and the position of the target atom. Because of the simplicity of TRIM and ACAT codes, these two codes are much faster than the MARLOWE code. As a matter of course, both TRIM, SP and ACAT codes cannot be applied to a single crystal target.

ACAT is written with FORTRAN 77 and does not need any special library. This code is available for distribution from the author. The author does not take any responsibility for the accuracy of any results of the code or any errors that may be present. I would like to be informed of any "bugs" found in the code, but there is no guarantee that may be fixed.

Chapter II presents the employed physical model while Chapter III presents the code input and output format. Chapter IV contains three typical problems.

2. PHYSICAL MODEL

The ACAT program was developed to simulate the Atomic Collisions in an Amorphous Target within the binary collision approximation, and in the ACAT program the target atom is randomly distributed in each unit cubic cell of which the lattice constant is $R_0 = N^{-1/3}$. In the ACAT program we can treat three layer medium composed of five elements, and the ACAT program includes the necessary physical constants such as sublimation energy, atomic mass and density.

2.1 The Binary Collision Approximation

In the ACAT program the atomic collisions are considered to be composed of the elastic part and the electron excitation part, and the elastic collision is

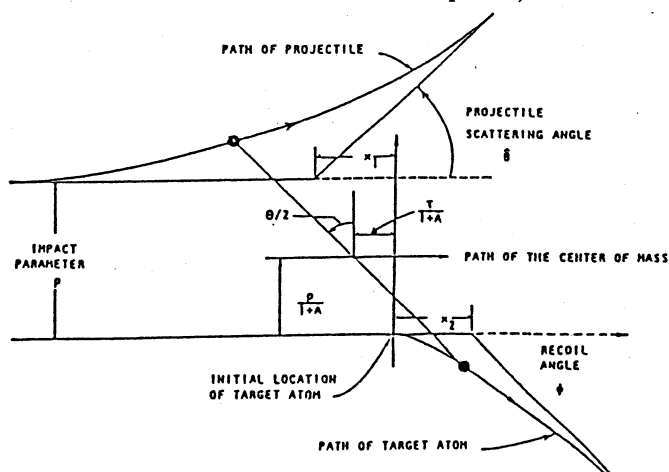


Fig. 1 The trajectories in the L system of two particles interacting according to the central repulsive force. The position of the projectile and the target atom corresponds to the apsis of the collision².

treated by the binary collision approximation. The trajectories of two particles interacting according to a conservative central repulsive force are shown in Fig. 1. The equation of motion which describes these trajectories can be manipulated in the usual manner to yield the scattering angle in the center-of-mass (CM) System²

$$\theta = \pi - 2p \int_{r_0}^{\infty} dr [r^2 g(r)]^{-1} \quad (1)$$

and time integral ()

$$\tau = (r_0^2 - p^2)^{-1/2} \int_{r_0}^{\infty} dr [g(r)^{-1} - (1 - p^2/r^2)^{-1/2}], \quad (2)$$

where

$$g(r) = [1 - p^2/r^2 - V(r)/E_r]^{1/2}, \quad (3)$$

p is the impact parameter, E_r is relative kinetic energy, r is the interatomic separation, $V(r)$ is the interatomic potential, and r_0 is the apsidal distance defined by $g(r_0) = 0$. The relative kinetic energy is given as

$$E_r = AE_0 / (A + 1), \quad (4)$$

where E_0 is the incident energy of the projectile and $A = M_2 / M_1$ is the ratio of the mass of the target atom M_2 and that of the projectile M_1 . In the ACAT code, the CM scattering angle and the time integral are initially calculated by four-point Gauss-Legendre quadrature according to Everhart's method⁵ and are stored in the two-dimensional matrix. The scattering angle and the time integral at each collision are evaluated with the help of the two dimensional extrapolation formula.

In the ACAT program the particle is assumed to move along the straight line segments, these being the asymptotes of the binary encounter in the laboratory (L) system. In constructing the trajectory of the projectile, one has to note that the deflection point is shifted backward in the L system by an amount x_1 , which is shown in Fig. 1. For the trajectory of the recoil atom, the starting point is shifted forward by an amount x_2 from the initial position of the target atom. The explicit expressions of x_1 and x_2 are as follows²:

$$x_1 = [2\tau + (A - 1)p \tan(\theta/2)] / (A + 1) \quad (5)$$

$$x_2 = p \tan(\theta/2) - x_1. \quad (6)$$

2.2 The Interatomic potential

In the ACAT program we employed the screened Coulomb potential

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi(r/a_s) \quad (7)$$

where $\phi(x)$ is the screening function, and a_s is the screening length.

The screening function of the interatomic potential $V(r)$ can be chosen in the ACAT program from seven options, i. e., the Molière⁶, the Kr-C⁷, the Ziegler⁸, Lenz-Jensen (LJ)⁹, aLJ¹⁰, aMLJ¹¹ and the Sommerfeld approximations¹². In the ACAT program the option of the interatomic potential is controlled by the input variable NAKA in the following manner :

- NAKA = 1: the Molière approximation,
- NAKA = 2: the Kr-C approximation,
- NAKA = 3: the Ziegler approximation,
- NAKA = 4: the LJ approximation,
- NAKA = 5: the aLJ approximation,
- NAKA = 6: the aMLJ approximation,
- NAKA = 7: the Sommerfeld approximation,

where the screening length of the Molière and the Kr-C approximations are the Firsov one, and that of the LJ, the aLJ, the aMLJ and the Sommerfeld approximations are the Lindhard screening length. The screening length of the Ziegler approximation is the Ziegler screening length⁸.

2.3 The Electronic Energy Loss

For the estimations of the electronic energy loss ΔE_e the reader has three options, i. e., the trajectory-dependent energy loss model (the non-local model), the Oen-Robinson energy loss model¹³ (the local model) and the mixed model. In the ACAT program, the option of these three models are controlled by the input variable LOCAL, i. e.,

- LOCAL=1: the trajectory-dependent energy loss model,
- LOCAL=2: the Oen-Robinson energy loss model,
- LOCAL=3: the mixed model.

1) The trajectory-dependent energy loss model (the non-local model)

This model is independent of the impact parameter, i. e.,

$$\Delta E_e = L_m N S_e(E), \quad (9)$$

where L_m is the distance between collisions, and $S_e(E)$ is the electronic stopping cross section.

For hydrogen we used the following fitting formula of the electronic stopping cross section which was originally proposed by Varelas and Biersack^{14, 15}

$$S_e(E) = A_1 E^{0.5} \quad (10)$$

$$S_e(E)^{-1} = (S_{LOW}^H)^{-1} + (S_{HIGH}^H)^{-1} \quad (11)$$

where

$$S_{LOW}^H = A_2 E^{0.45}, \quad (12)$$

$$S_{HIGH}^H = (A_3/E) \ln [1 + (A_3/E) + A_4 E], \quad (13)$$

and parameters A_1 , A_2 , A_3 , A_4 and A_5 are stored in the ACAT code¹⁵.

For helium isotopes we used the five-parameter fitting formula of Ziegler table^{14, 15},

$$S_e(E)^{-1} = (S_{LOW}^{He})^{-1} + (S_{HIGH}^{He})^{-1}, \quad (14)$$

where

$$S_{LOW}^{He} = B_1 E^{B_2} \quad (15)$$

$$S_{HIGH}^{He} = (B_3/E) \ln (1 + (B_4/E) + B_5 E) \quad (16)$$

E is He energy in kev, and these five parameters are stored in the ACAT code.

For other heavy ions, the Lindhard-Scharff energy loss model is employed¹⁶, i. e. ,

$$S_e(E) = K_L E^{1/2}, \quad (17)$$

where the Lindhard electronic stopping coefficient K_L is given as

$$K_L = \frac{1.212 Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}) M_1^{1/2}} \zeta (eV)^{1/2} A^2 \quad (18)$$

2) The Oen-Robinson energy loss model (the local model)¹³

This model depends on the impact-parameter p through the apsidal distance in the binary collision, i. e. ,

$$\Delta E_e = \frac{0.045}{\pi a_s^2 (1-\alpha)} \exp[-0.3 r_0(p, E)/p], \quad (19)$$

where the factor $(1-\alpha)$ is a correction term due to the finiteness of the impact parameter in the solid, and $S_e(E)$ is the electronic stopping cross section which is given in the previous discussions. The explicit expression of α is as follows:

$$\alpha = (1 + 0.18611 R_0/a_s) \exp[-0.18661 R_0/a_s] \quad (20)$$

3) The mixed model

The third model is a combination of the non-local model and the local model. In the case of sputtering phenomena recoil atoms with very low energies are moving in the solid, and their free paths are too short to apply the non-local model for the electronic energy loss, because the non-local model is the macroscopic representation of the electronic energy loss process. In the mixed model of the ACAT code, for $\lambda(E) < 5R_0$, the electronic energy loss is calculated by the local model, and for $\lambda(E) > 5R_0$, the energy loss is calculated by the non-local model. Here $\lambda(E)$ is the effective mean free path which is given as $\lambda(E) = 1/\pi N b^2$, where b is the collision diameter defined by $b = r_0(0, E)$.

2.4 The Searching Procedure of a Collision Partner

The procedure of searching the collision partner of the ACAT program is very simple. Let the projectile move in the direction e_p . The notation "projectile" is used here for the ion or any recoil atom moving in the solid. In the ACAT program, the projectile flies from the position R step by step by an amount Δx along the direction e_p (see Fig. 2). The position of the projectile R_n after n steps is $R + n\Delta x e_p$, and the unit cell belonging to R_n is easily determined dividing each component of R_n by the average lattice constant R_0 . If the unit cell of R_n is different from that of the original position R , a target atom is produced randomly in a new unit cell using three random variables, and this target atom is a collision partner. Let the position of the target atom be R_A which is shown in Fig. 2. Then, the impact parameter p is given as

$$p = (R_A - R) \times e_p. \quad (21)$$

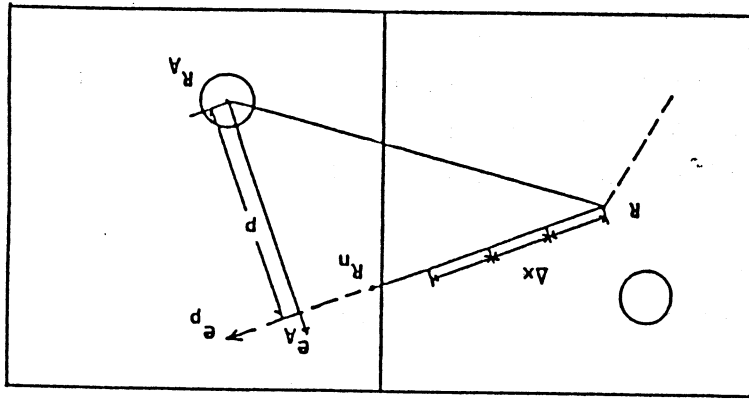


Fig. 2 Schematic representation of the procedure searching a new collision partner inside the solid. e_p is a unit vector of the direction of a moving projectile, and R is the position of the initial location of the projectile. The interval Δx is usually equal to $R_0/5$.

CM scattering angle and the time integral for this collision are easily obtained from the pre-calculated two-dimensional matrix.

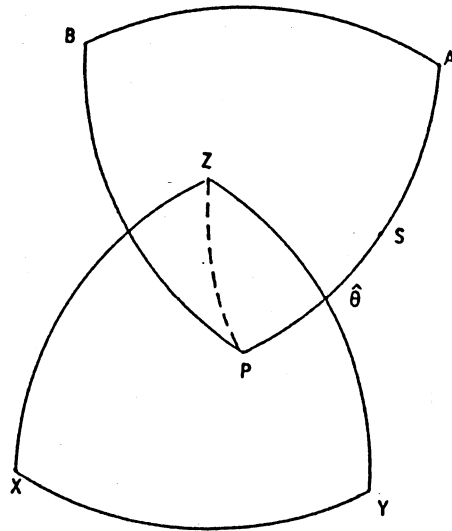


Fig. 3 Typical two coordinates in the spherical trigonometry, where X , Y and Z are three axes of the absolute coordinate, and A , B and P are those of the moving coordinate fixed to the projectile.

In the ACAT program we introduced two different coordinates. The one is the absolute coordinate fixed to the target, where the x - y plane is on the solid surface, and the direction of the z axis is opposite to the surface normal. The other is the moving coordinate which is fixed to the moving pro-

jectile, where the direction of the z axis of the moving coordinate is equal to e_p . In Fig. 3 these two coordinate are schematically shown in the spherical trigonometry. The X, Y and Z in Fig. 3 correspond to the x, y and z axes of the absolute coordinate, while the A, B and P to the x, y and z axes of the moving coordinates. The direction e_A of the A axis is chosen to be

$$e_A = \frac{e_p \times [e_p \times (R_A - R)]}{p} \quad (22)$$

and the direction e_B of the B axis is $[e_A \times e_p]$. The direction S in the P-A plane is that of the scattered projectile after collision, and $\hat{\theta}$ is the scattering angle in the L system which is given as

$$\hat{\theta} = \tan^{-1} \frac{A \sin \theta}{1 + A \sin \theta} \quad (23)$$

The direction $e_{S'}$ of the projectile after collision is represented by

$$e_{S'} = \begin{bmatrix} \sin \hat{\theta} \\ 0 \\ \cos \hat{\theta} \end{bmatrix} \quad (24)$$

in the moving coordinate. Transforming the bases of the moving coordinate into those of the absolute coordinate yields the direction S in the absolute system which is obtained as follows :

$$e_S = T e_{S'}, \quad (25)$$

where $T = (e_A' \ e_B' \ e_p)$ is the inverse matrix of the transformation matrix between two bases.

2.5 Surface Conditions and Surface Scattering

In order to investigate the influence of the ion-bombardment induced surface roughness on the sputtering yield, various kinds of the surface are employed in the ACAT code. In Fig. 4 the side view of the model surface are schematically drawn. Figure 4A indicates the complete flat surface, but the surface atoms in the topmost layer are randomly distributed in two dimensions. The surface of Fig. 4B is the original ACAT surface.

The rough surface of Fig. 4C has the randomly distributed vacancies at the topmost layer of which the ratio is denoted by (a/b) . The rough surface of Fig. 4D has the rectangular-step topography of which the shape is characterized by $(a/b, c)$, where a is the width of the step in the unit of the lattice constant R_0 , b is the distance between two steps, and c is the height of the step in the unit of R_0 . The rough surface of Fig. 4E has the oblique step

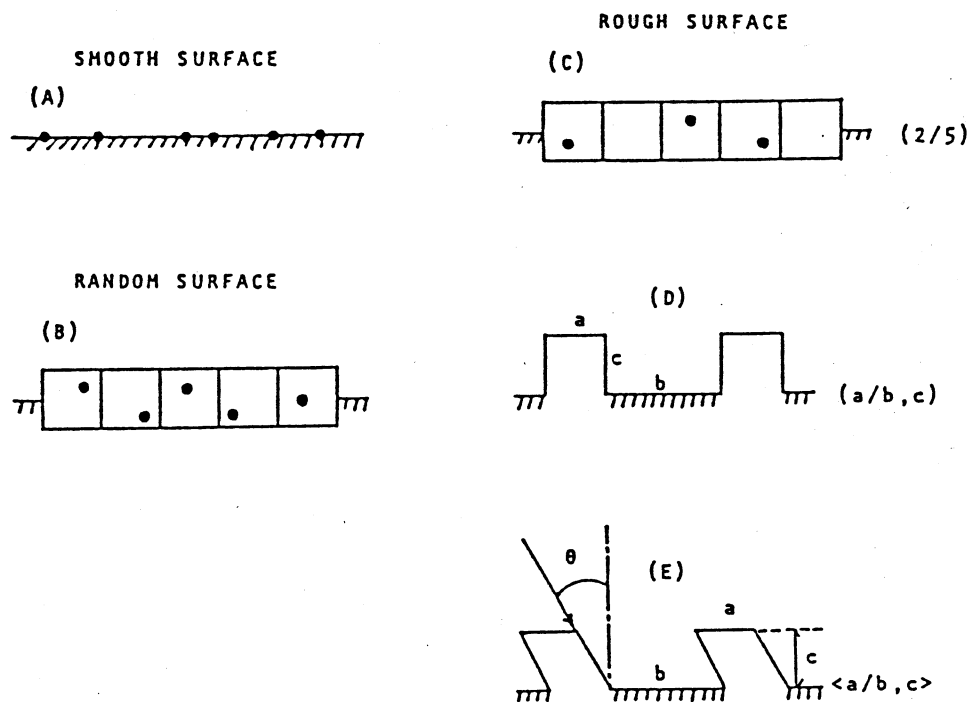


Fig. 4 The schematic representations of side views of various model surface employed in the present calculations.

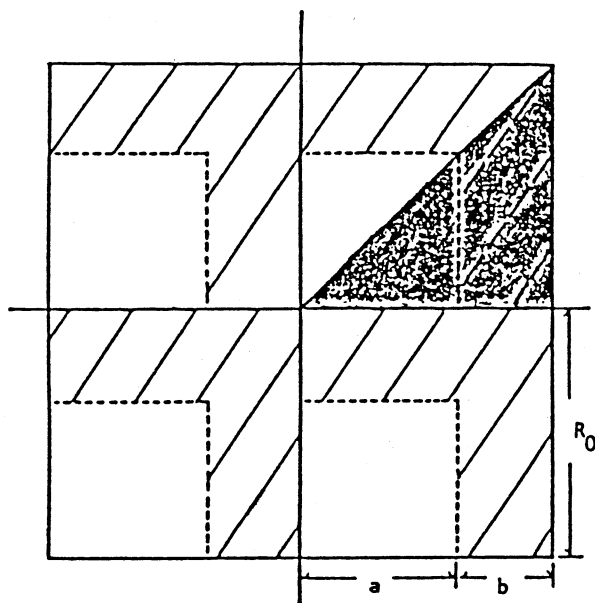


Fig. 5 The top views of the step surfaces of the rectangular-step and the oblique-step surfaces in Fig. 4D and Fig. 4E. The hatched region is the gutter, and the primary ions are bombarded randomly on the dark shaded zone.

topography of which the shape is specified by $\langle a/b, c \rangle$. Three parameters a , b and c have the same meanings as those of Fig. 4D, and the inclined angle is equal to the angle of incidence which is measured from the surface normal. In Fig. 5 the top view of the surface topography employed in the present simulation for the roughness $(a/b, c)$ and $\langle a/b, c \rangle$ is shown schematically.

The hatched zone of Fig. 5 is a gutter, and the primary ions are randomly impinged on the darkly shaded zone. In the case of the rough surface of Fig. 4D the azimuthal angles of incidence are also selected randomly.

2.6 The Searching Procedure of a Collision Partner near the Surface

The surface scattering with the target atom at the topmost layer, which is suffered by an incoming or outgoing particle, is very important for the angular distributions of reflected particles and sputtered recoil atoms, especially for oblique incidence. In the ACAT program the procedure of searching the collision partner of the particle moving in the vacuum is two-dimensional. In other words, the projected position of a leaving particle moves on the solid surface as the projectile does in the vacuum as if a shadow of an airplane moves on the earth surface.

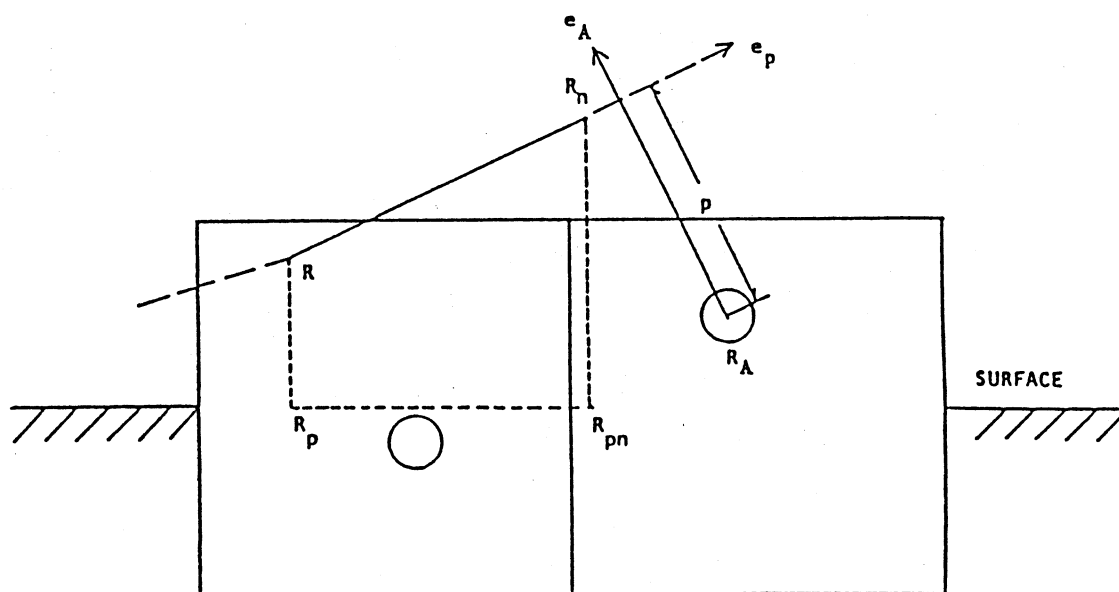


Fig. 6 Schematic representation of the procedure of searching a new collision partner of a leaving particle. The vectors R_p and R_{pn} mean the projected positions of R and R_n' respectively, onto the solid surface.

Figure 6 Shows how to search the collision partner of an outgoing particle, where the positions R_p and R_{pn} are the projected ones of R and R_n' respectively.

vely. Similarly to the searching procedure in the bulk we can determine a new unit cell which the position R_{pn} belongs to and get the candidate for the collision partner. Inside the solid a target atom obtained like this is always a collision partner, and the roughness of the binary collision approximation will be smeared out statistically due to subsequent collisions.

In the case of the surface scattering of a outgoing particle with a surface atom, its deflection angle due to the subsequent surface scatterings is always additive, and the roughness in the binary collision approximation will be enhanced if any target atom in the new unit cell is allowed as a collision partner. In the ACAT program a target atom in the new unit cell is accepted as a collision partner if $(R - R_A) \cdot e_p - x_1 > 0$. This searching procedure of the leaving particle is repeated until the impact parameter between the leaving particle and the surface atom is larger than the R_0' and this leaving particle with the large impact parameter is regarded as escaping the repulsive region of the solid surface.

The surface binding energy U_s has a significant influence on the total sputtering yields, and also on the angular distribution and energy distributions of sputtered atoms. As the surface binding energy, we have usually used the sublimation energy E_s which is stored in the ACAT program. In the ACAT program the surface binding energy acts in the form of a planar attractive potential upon the atom which is leaving the surface, and results in a refraction or even a reflection back into the solid, depending on energy and angle of the leaving particle.

2.7 Cascade Development

For the cascade development we have used three parameters, i. e., the bulk binding energy E_B , the displacement energy E_d and the minimum energy until which the cascade continues to develop. These three parameters are the input data.

Let us consider a collision from which the original projectile emerges with kinetic energy E_1 after transferring kinetic energy T to the target atom. The target atom is displaced if its energy exceeds a sharp threshold energy E_d . At the same time it may be required to overcome a bulk binding energy. If $T > E_d$, the target atom is added to the cascade with the kinetic energy $E_2 = T - E_B$. The cascade develops continuously so long as their energies exceed a pre-assigned value E_c .

Once a new recoil atom is ejected from its original site a vacancy will be left even for the case of replacement collision which takes place when $T > E_d$ and E_1 is less than the lesser of E_c and E_d' because this trapped projectile still has kinetic energy which must be dissipated before it gets well-defined

position. The time required for this energy dissipation will exceed the time needed to generate the cascade. Roughly speaking, the bulk binding energy will be of the order of the vacancy formation energy, i. e., about 1 eV for fcc metals and about 3 eV for bcc metals.

There are several models for the bulk binding energy in the simulation of sputtering process. However, bulk binding energies are of little influence on the sputtering results, because E_B is usually small compared with the transferred energy at high energy bombardment. Moreover most sputtered atoms originated in the surface layer where the binding energy E_B is not equal to or will be smaller than the vacancy formation energy in the bulk. On the other hand, from the viewpoint of radiation damage, sputtering phenomenon is in a sense a transient phenomenon which is different from other radiation phenomena such as radiation damage where the displacement energy E_d is of the order of 25 eV. The displacement energy is the minimum energy required to produce the stable Frenkel pair. Since almost all sputtered atoms originate in the surface layer, we need not use the criterion whether the recoil atom get the kinetic energy enough for the stable Frenkel pair or not. Then, in the case of simulating sputtering process the following simple model is used in the ACAT program :

$$E_B = 0, E_C = E_S, E_d = E_S, U_S = E_S. \quad (20)$$

In order to calculate the stable Frenkel pair or the spatial distribution of vacancies after every particles are thermalized, the vacancy and the interstitial atom will be recombined if the distance between a vacancy and an interstitial is smaller than the recombination radius.

3. CODE USE

3.1 Code Input

In the ACAT program we have the following READ statements :

```

150 READ (5, 50, END=155) NRUN, MKND, IOUT
151 READ (5, 51, END=155) DDO, DFA, DAZM
152 READ (5, 51, END=155) ECRFF, ECRF
153 READ (5, 51, END=155) (Z (I), I=1, MKND)
    READ (5, 51, END=155) STTINA, BORT
    READ (5, 51, END=155) DPORRN
    READ (5, 50, END=155) LOCAL, NAKA
    READ (5, 54) ((ATF (IR, IK), IR=1, 3), IK=2, MKND)

```

```

      READ (5, 54) (RBNDY (IR), IR=1, 3)
      READ (5, 54) ( (EDD (IR, IK), IR=1, 3), IK=2, MKND)
      READ (5, 54) ( (EBB (IR, IK), IR=1, 3), IK=2, MKND)
      READ (5, 54) (ECC (IR), IR=1, 3)
      READ (5, 54) (RUU (IK), IK=1, 3)
      READ (5, 51) (AQQ (IK), IK=1, MKND)
      READ (5, 51) (AKK (IK), IK=1, MKND)
      READ (5, 51) (SBEG (IK), IK=1, MKND)
      READ (5, 52) FTOP, RFOBL
      READ (5, 50) KWID0, KWID1
154  READ (5, 51, END=155) E0, BONDY, ANGL, DNZ, HISTRY, REGN
159  READ (5, 50, END=155) NTURN

```

The corresponding FORMAT statements are as follows :

```

50  FORMAT (10I5)
51  FORMAT (7E10.3)
52  FORMAT (4E10.3)
54  FORMAT (3E10.3)

```

Next, let us explain the meanings of each INPUT variable.

NRUN = control of initial value of the random variable (NRUN > 0).

MKND = number of elements including the projectile and the adsorbate atom (MKND < 7).

IOUT = control of the output data

IOUT < 3 : two-dimensional matrix of the CM scattering angle and the time integral

IOUT < 31 : rango distribution of each element

IOUT < 35 : spatial distribution of atomic fraction

D D O = mesh interval of the polar angle (> 5.0 degree)

D F A = mesh interval of the azimuthal angle which is used in calculating the angular distribution of backscattered particles and sputtered atoms (degree)

DAZT = mesh interval of the azimuthal angle which is used in calculating the azimuthal-angle distribution of backscattered and sputtered atoms (degree)

ECRF = E_c of the projectile

ECRFF If ECRF = 0, E_c of the projectile is calculated.

If SPUTTERING, ECRFF = 1, otherwise

ECRFF = 1000.

Z (K) = atomic number of the K-th element .

K = 1 : incident particle

K > 1 : target atom

Z = 1.0 : hydrogen

Z = 1.2 : deuterium

Z = 1.3 : tritium

Z = 2.0 : ^4He

Z = 2.1 : ^3He

STTINA = the position of reference surface which is used in calculating
atomic collisions in the infinite medium (angstrom)

BORT = transmission sputtering or backward sputtering

BORT = 1 : backward sputtering

BORT = 4 : transmission sputtering

DPORRN = control of the calculation of the spatial and energy distribu-
tion of free paths

DPORRN > 1 : no calculation

DPORRN = 1 : free-path projected to the z axis

DPORRN = 0 : free-path

LOCAL = option of electronic energy loss model (Chap. 2)

LOCAL = 1 : the non-local model

LOCAL = 2 : the local model

LOCAL = 3 : the mixed model

NAKA = option of screening function (Chap. 2).

NAKA = 1 : the Molière approximation

NAKA = 2 : the Kr-C approximation

NAKA = 3 : the Ziegler approximation

NAKA = 4 : the LJ approximation

NAKA = 5 : the aLJ approximation

NAKA = 6 : the aMLJ approximation

NAKA = 7 : the Sommerfeld approximation

ATF (I, K) = atomic fraction of the K-th element in the I-th layer

RBNDY (I) = thickness of the I-th layer (cm).

The adsorbate layer is excluded and thickness of adsorbate
layer is given by the input variable FTOP which will appear
later.

If FTOP <> 0, I = 1 becomes the second layer.

EDD (I, K) = displacement energy of the K-th atom in the I-th layer.

If EDD = 0, EDD = ECC of the I-th layer.

EBB (I, K) = bulk binding energy of the K-th atom in the I-th layer.

If EBB = 0, EBB = 0 in the I-th layer.

ECC (I) = E_c in the I-th layer

If ECC = 0, ECC is calculated and is equal to the lowest sublimation energy among all elements in the medium.

ROU (I) = density in the I-th layer (g/cm^3)

If ROU = 0, ROU is calculated and is equal to the average density in the i-th layer.

AQQ (K) = correction factor of the Firsov screening length between the projectile and the K-th atom.

The Firsov screening length is modified as

$$a_s = a_s (1 + AQQ).$$

If AQQ = 0, a_s is chosen depending on NAKA (chap. 2).

AKK (K) = correction factor of the Lindhard inelastic coefficient K_L between the projectile and the K-th atom in the solid. K_L is modified as

$$K_L = K_L (1 + AKK).$$

SBEG (K) = surface binding energy of the K-th element. (eV)

If SBEG = 0, SBEG is equal to the sublimation energy of the K-th element.

FTOP = coverage of the adsorbate layer in the unit of R_0 or the height of the step of the rough surface in the case of KWID0 \langle 0 and KWID1 \langle 0.

If FTOP \langle 0, the first layer is the adsorbate layer.

KWID0 = width a of the step of the rough surface (see Fig. 4) in the unit of R_0 .

KWID1 = width b of the step of the rough surface (see Fig. 4) in the unit of R_0 .

If KWID0 + KWID1 \langle 0, the surface is the smooth surface in Fig. 4.

FROBL = option of the surface topography

FROBL = 0 : rectangular step surface

FROBL = 1 : oblique step surface

EO = incident energy of the projectile (eV)

BONDY = thickness of the medium (cm)

ANGL = angle of incidence measured from the surface normal (degree)

D N Z = mesh interval for the spatial distribution of various quantities such as range, damage and vacancy distributions. (cm)

HISTORY = number of the primary ions.

REGN = recombination radius in the unit of R_0 .

NTURN = option of the further calculations.

NTURN = 1 : GOTO 150

```

NTURN = 2 : GOTO 151
NTURN = 3 : GOTO 152
NTURN = 4 : GOTO 153
NTURN = 5 : GOTO 154
NTURN = 6 : STOP

```

4. SAMPLE PROBLEMS

Three sample problems are included : the first is the two-component sputtering ; the second, ion-induced desorption ; the third, roughness sputtering. Appendixes contain a copy of the output from these sample problems.

4.1 Two-Component Sputtering

Consider three-layer NiMo alloy medium, where the thickness of the first layer is 20 Å, that of the second layer 50 Å, and that of the third layer is enough large. The atomic fractions of Ni in these three layer are 0.2, 0.5 and 0.7, respectively, and 3 keV Ar ions are normally bombarded the above-mentioned target. As the interatomic potential the Kr-C potential (NAKA = 2) is used, the electronic energy loss model is the mixed model (LOCAL = 3), and the recombination radius is 1.5 R_0 . The input needed to run ACAT follows :

```

      12      3      30
1.000E 01 1.000E 01 1.000E 01
1.000E 00 0.000E 00
1.800E 01 2.800E 01 4.200E 01
0.000E 00 1.000E 00
2.000E 00
      3      2
0.800E 00 0.500E 00 0.300E 00
0.200E 00 0.500E 00 0.700E 00
2.000E -07 5.000E -07 1.000E -02
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 000
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
-0.000E 00 -0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.400E 00 0.000E 00
      0      0
3.000E 03 1.500E -02 0.000E 01 5.000E -08 2.000E 03 1.500E 00
      6

```

Note : Output of this problem is given in Appendix A.

4.2 Ion-Induced Desorption

Consider N/W system, where the coverage of the nitrogen is 0.4 monolayer . and 300 eV He ions are bombarded normally . As the interatomic potential we used the Molière potential (NAKA = 1) with the correction factor AQQ = -0.3 for the elastic scattering between He and Ni, where the original Firsov screening length between He and N is used, and the electronic energy loss model is the mixed model (LOCAL = 3) . As the surface binding energy of Ni we used the 6.7 eV planar potential . The input needed to run ACAT is follows :

```

62      3      25
1.000E 01 1.000E 01 1.000E 01
1.000E 00 0.000E 00
2.000E 00 7.400E 01 7.000E 00
0.000E 00 1.000E 00
2.000E 00
      3      1
0.000E 00 1.000E 00 1.000E 00
1.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
1.000E -02 1.500E -01 2.000E -00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 -0.300E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00
0.000E 00 0.000E 00 6.700E 00
0.400E 00 0.000E 00
      0      0
3.000E 02 1.500E -02 0.000E 01 5.000E -08 5.000E 03 1.500E 00
      6

```

Note : Output of this problem is given in Appendix B.

4.3 Roughness Sputtering

Consider the Cu surface with the periodic oblique-step topography $\langle 2/3, 3 \rangle$ which is induced by the bombardment of 1 keV Ar ions, where the angle of incidence is 80° . As the interatomic potential the Molière potential is employed, and the electronic energy loss model is the mixed model. The input needed to run ACAT is follows :

```

1.12      2      30
1.000E  01  1.000E  01  1.000E  01
1.000E  00  0.000E  00
1.800E  01  2.900E  01
0.000E  00  1.000E  00
2.000E  00
      3      1
1.000E  00  1.000E  00  1.000E  00
1.000E -02  1.500E -01  2.000E  00
0.000E  00  0.000E  00  0.000E  00
0.000E  00  0.000E  00  0.000E  00
0.000E  00  0.000E  00  0.000E  00
0.000E  00  0.000E  00  0.000E  00
-0.000E  00 -0.000E  00  0.000E  00
0.000E  00  0.000E  00
0.000E  00  0.000E  00  0.000E  00
3.000E  00  1.000E  00
      2      3
1.000E  03  1.500E -02  8.000E  01  2.500E -08  6.000E  03  1.500E  00
      6

```

Note : Output of this problem is given in Appendix C.

3.2 Code Output

The ACAT program has a lot of output, and calculated data are followed after OUTPUT in the output list. For all output data there are detailed instructions, therefore the author think that the extra explanation is not necessary any more.

For the normal incidence, the angular distributions of backscattered ions and sputtered atoms are fitted by the empirical formula $\cos^n \theta^{17}$.

Note : The exit angle of the angular distributions of backscattered ions and sputtered atoms are measured from the surface.

Note : If the number of sputtered atoms or backscattered ions are too small number of primary ions, the ACAT program does not print calculated results of differential yields such as the angular distribution and the energy distribution. For the energy distribution and the angular distribution, the yields of the backscattered or sputtered particles should be larger than 500 particles, and for the energy distribution of a fixed exit angle the yield should be larger than 3000 particles.

REFERENCES

- 1) Y. Yamamura and Y. Mizuno, IPPJ-AM-40, Institute of plasma physics, Nagoya University, 1985.
- 2) M. T. Robinson and I. M. Torrens, phys. Rev. B 9 (1974) 5008.
- 3) J. P. Biersack and W. Eckstein, Appl. Phys. A34 (1984) 73.
- 4) J. P. Biersack and L. G. Haggmark, Nucl. Instr. Meth. 174 (1980) 257.
- 5) E. Everhart, G. Stone and R. J. Carbone, Phys. Rev. 99 (1955) 1287.
- 6) G. Molière, Z. Naturforsch. 2 A (1947) 133.
- 7) W. D. Wilson and C. L. Bisson, phys. Rev. B 3 (1971) 3984.
- 8) J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, proc. IPAT'83, (1983) p 1861.
- 9) P. Gombas, Encyclopedia of Physics, vol. XXXVI, 109 Berlin, Springer (1956).
- 10) P. Logtager, F. Besenbacher, O. S. Jensen and V. S. Sorensen, Phys. Rev. A20 (1979) 1443.
- 11) N. Nakagawa, E. Enoki and Y. Yamamura, to be published.
- 12) K. Umeda, J. Phys. Soc. Japan 9 (1950) 356.
- 13) O. S. Oen and M. T. Robinson, Nucl. Instr. Meth. 132 (1976) 647.
- 14) C. Varelas and J. P. Biersack, Nucl. Instr. Meth. 79 (1970) 213.

- 15) H. H. Andersen and J. F. Ziegler, "The Stopping and Ranges of Ions in Matter" vol. 3, Pergamon Press (1977) and J. F. Ziegler, *ibid*, vol. 4 (1977).
- 16) J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiøtt, K. dan. Vindensk. Selsk. Mat.-pys. Medd. 33, no. 14 (1963).
- 17) H. H. Andersen, B. Stenum, T. Sørensen and H. J. Whitlow, Nucl. Instr. Meth. B 6 (1985) 459.

固体内低速原子衝突

応用物理 中 川 幸 子

1. はじめに

原子衝突における入射エネルギーの損失を評価する問題は、原子炉における炉壁の問題とか、イオン・インプランテーションの問題に関連して重要である。

通常で入射する重イオンの場合、そのエネルギー、及び入射イオンと標的原子の組み合わせが決まれば、散乱の断面積や標的物質への侵入深さ（飛程）等を、一般的なスケーリング則に従って評価することが出来る。ところが低速で入射する重イオンの場合、入射原子と標的原子の組み合わせに強く依存した散乱の様相（ Z_1 振動）を呈する。これは二つの原子の2体衝突に際して、それらが個々に持っている原子としての殻構造を反映したものと考えられている。

こうした殻構造依存性を定量的に説明し、個々のケースに対してという以上に更に一般的な見通しを与えるものにするには、2体衝突の際の厳密な相互作用ポテンシャル（原子間ポテンシャル）を第一原理的に求める必要がある。2つの多電子原子間の相互作用ポテンシャルはトーマス・フェルミの統計モデルに従って、更にディラック・ハートリー・フォック・スレーターの電荷密度を用いて数値計算により求めた。以下その概要と結果を報告する。

2. ガス状原子の原子間ポテンシャル

原子AとBの核間距離をRとすると2原子系の相互作用ポテンシャルは、

$$V(R) = V_{A-B}(R) - V_A - V_B \quad (1)$$

と書ける。ここで V_A , V_B はそれぞれ孤立自由原子の全エネルギー、 $V_{A-B}(R)$ は2原子系の全エネルギーを表わし、それらは次のように書かれる。

$$V = V_{el} + V_k + V_{ex} + V_{cor} \quad (2)$$

第1項は、核をも含めた静電項、第2項以下は電子の、それぞれ運動エネルギー項、交換項、相関項である。今、2つの孤立自由原子の電荷密度をそれぞれ $\rho_A(r)$, $\rho_B(r)$, 2原子系におけるそれを $\rho(r) = \rho_A(r) + \rho_B(r)$ とすると、 $V_{A-B}(R)$ はこれら電荷密度の汎関数として書かれる。用いる電荷密度は相対論効果と、交換効果をも考慮したディラック・ハートリー・フォック・スレーターの静電ポテンシャルからポアソン方程式により求めたものである。得られたポテンシャルを用いて、半古典的手法により求めた、散乱の断面積は実験値をよく再現し、この手法が妥当であることを裏付けた。

更に、数値計算による numerical なポテンシャルを、応用上の必要から analytical に表わす関

数形を探した。見出したものは、従来のものより形も単純で、かつパラメーター数も少なく、収束性の良い、次のような関数形であった。

$$V(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} \exp(-AR + BR^{1.5} - CR^2) \quad (3)$$

一連の同種原子間のポテンシャル ($1 < Z < 93$) について A, B, C の表も与えた〔1〕。

3. 固体内原子の原子間ポテンシャル

低エネルギーでの原子衝突が固体内で起こる時、標的原子と入射原子の2体衝突モデルでは、2つの原子の電荷密度は自由原子のそれらとは異なったものとして扱う必要がある。厳密には例えばKKR法等によって、固体内での原子の電荷密度をself-consistentに求める。ここで用いたのは最も単純なモデルで、原子の電荷密度をAtomic-Wigner-Seitz球内で規格化したものである。こうした非常に単純化したモデルにもかかわらず、得られた原子間ポテンシャルは、他の計算とも近い値を与えた。更にこうした原子間ポテンシャルを敏感に反映する標的物質への入射飛程については、十分な精度で実験結果を説明することが出来た〔2〕。

こうして得たポテンシャルは個々の原子の組み合わせに対応したnumericalなものであるが、任意の異種原子の組み合わせに対するポテンシャルをそれぞれ必要に応じて第一原理的に求めるのはいたずらに計算労力と時間を消費するものなので、何らかのルールに従って一般的なものを与えることが望まれる。その方法として、一連の ($1 < Z < 93$) 同種原子間のポテンシャル V_{A-A} , V_{A-B} を任意の異種原子間のもの V_{A-B} に拡張することを試みた。そのためまず同種原子間のポテンシャルを統一的に記述するようスケーリングを行なった。即ち、式(3)において A, B, C に含まれる Z 依存性をすべて、原子間距離をスケールするスケーリングパラメーター a_{A-B} に繰り込んで、 $R \rightarrow R/a_{A-B}$ とするとき、スケーリング・パラメーターについての、次のような一般的な関係式を導いた。

$$a_{A-B}^{-m} = (a_{A-A}^{-m} + a_{B-B}^{-m}) / 2 \quad (4)$$

ここで右辺は同種原子間のスケーリング・パラメーター、左辺は異種原子間のそれである。式(4)を適用して、任意の異種原子間のポテンシャルを求めることが出来た。この合成したポテンシャルは、個々の原子の殻構造を反映しており、異種原子間のポテンシャルとして最初から計算したものとよく合った〔2, 3〕。

この合成方法が一般的なものであるかどうかを調べるために、一連の同種原子ポテンシャルの殻構造に因る Z 振動を平均化した平均ポテンシャルを基に、任意の原子の組み合わせに応じた一般的なポテンシャルを導いた。得られた一般的なポテンシャルは、従来の、詳細かつ膨大な数値計算によって非経験的に得られたものよりも、広いエネルギー範囲にわたってより良く実験結果を説明し、またこれまで経験的に最も良いとされてきたものと非常に近い計算結果を与えることもわかった。

〔3〕。

4. 低速原子衝突における価電子の影響

2-3節では原子衝突を2原子間の静電ポテンシャルと運動エネルギーの間にのみ交換が起こり得るという弾性散乱として主に扱って儘た。ところが問題にするエネルギー領域では、散乱の断面積、標的物質中での飛程に、個々の原子の殻構造を反映する特徴的な Z_1 振動が観測され（これは平均値に対して、最大20-30%にも達する振動）、この強さはこれまでの計算の枠組の中では説明出来ない残された課題である。

現行のモデルにはいくつかの再検討の余地があるがその一つは、低速の入射原子により標的原子が散乱される際の価電子の散乱の影響である。この寄与の大きさについて目下量子論的計算と検討を行っている〔4〕。

結果の報告

- (1) S. Nakagawa and Y. Yamamura, *Bull. Okayama, Univ. Sci.* 22, 57 (1986).
- (2) S. Nakagawa and Y. Yamamura, submitted to *Radiation Effect*.
- (3) S. Nakagawa and Y. Yamamura, 2nd Soviet-Japanese Symposium on Atomic Collisions in Solid. (1986)
- (4) 中川幸子, 山村泰道, 日本物理学会 42 回年会 (予稿集 vol. 4. 9 (1987))。

低エネルギーイオンの反射

大学院材質理学専攻 金子 敏 明

概 要

1 eVの水素原子がNi(100)面に垂直に入射したときの反射率, エネルギースペクトルをEmbedded-Atom Methodを用いた分子動力学シミュレーションコードにより計算した。

1. 緒 言

エネルギー供給源の一つとして研究されているプラズマ核融合炉において, 真空第1壁と周辺プラズマとの相互作用の研究は, 近年とくに重要視されている。これは, プラズマ粒子のリサイクリング, スパッタリングによる第一壁の損傷などが基礎及び応用の両面から注視されている一方, 低エネルギー(～50 eV以下)イオンの反射の実験が最近ようやく行なわれるようになってきたためである。入射粒子の反射係数などを調べる場合, 従来, TRIMコードなどのように二体衝突モデルに基づいたシミュレーションがなされてきた。ところが, エネルギーが低くなると二体衝突では取り入れられない多体効果の重要性が指摘された。¹⁾ Embedded-Atom Method (EAM)はそのような要請に答えたものであり, 金属のもつ物理的諸量を用いてパラメーターフィッティングにより粒子間の相互作用を決めることが特徴である。

2. EAM

金属を構成しているものは, 自由電子とそれらを取り除いた正のイオン核であると考えてよい。このEAMでは, 金属中の一個の原子に注目し, それを不純物原子と考え, それ以外をホスト(host)と考える。これをあらゆる構成原子に適用していくことにより, 結晶あるいは金属の全エネルギーを求めようとするものである。この見方は, 対象が純粋金属か不純物を含んだ金属かによらずなりたつ。

さて, 注目した不純物原子をホストに埋め込むにはエネルギーが必要である。これはembedding energyと呼ばれ, 不純物原子*i*が埋め込まれる場所に存在するホストの電子密度 $\rho_{h,i}$ の汎関数 $F_i(\rho_{h,i})$ で与えられる。これは, 主に, ホストの自由電子や外殻電子との相互作用を考慮したことになる。一方, 金属内では正のイオン核がお互いにクーロン斥力で反発しあっている。これらは, 遮蔽された短距離のポテンシャルエネルギー $\frac{1}{2} \sum_{i(\neq)j} \phi_{ij}(R_{ij})$ をもつ。ここで, $R_{i,j}$ は*i*番目と*j*番目の正イオンの相対距離である。以上から, 金属のもつエネルギー*E*は,

$$E = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i(\neq)j} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (1)$$

と表わされる。斥力ポテンシャル $\phi_{ij}(R)$ は, *i*番目, *j*番目の原子の有効電荷 $Z_i(R)$, $Z_j(R)$ を用いて

$$\phi_{ij}(R) = \frac{Z_i(R) Z_j(R)}{R} \quad (2)$$

の形を仮定した。このようにすると、同種粒子間のポテンシャル $\phi_{ii}(R)$ 、 $\phi_{jj}(R)$ の情報から $\phi_{ij}(R)$ が幾何平均により求められる。この関係は多くの例で成り立つことが指摘されている。もし、完全で純粋な金属を考えるならば、原子の種別は区別しなくてもよいから、 $F_i = F$ 、 $\phi_{ij} = \phi$ 、 $\rho_{h,i} = \bar{\rho}$ など簡単化されてしまう。ただし、 $\bar{\rho} = \sum_m \rho(a^m)$ であり、 a^m は隣接原子 m との距離、和 Σ はあらゆる隣接原子にわたることを意味する。純粋完全な金属に対する $F(\rho)$ 及び $Z(r)$ の関数形は、格子定数、弾性定数、空孔生成エネルギー、昇華エネルギーなどのデータを参考にし、決められる。表1には、Niの $F(\rho)$ 、 $Z(r)$ を決定するときに用いたパラメータ値を、また表2には、それらから決定された $F(\rho)$ 、 $Z(r)$ を示した。

表1. Niの格子定数 a_0 (Å), 弾性定数 C_{11} , C_{12} , C_{44} (10^{12} dyn/cm²)
昇華エネルギー E_s (eV), 空孔生成エネルギー E_{IV}^F (eV)

	Experiment	Fit
a_0	3.52	3.52
C_{11}	2.465	2.438
C_{12}	1.473	1.506
C_{44}	1.247	1.278
E_s	4.45	4.45
E_{IV}^F	1.4	1.4

表2. Niの $F(\rho)$ 、 $Z(r)$ をきめるのに用いたパラメーター値。但し
 $\bar{\rho} = 0.02855$ (Å⁻³)であり、 $F(\rho)$ の単位はeV。

r (Å)	$Z(r)$	$Z'(r)$	ρ (Å ⁻³)	$F(\rho)$	$F''(\rho)$
0.0	28.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$0.43 a_0$	5.054		$0.5 \bar{\rho}$	-3.586	
$0.65 a_0$	0.294		$1.0 \bar{\rho}$	-5.148	
$0.71 a_0$	0.137		$2.0 \bar{\rho}$	-3.407	
$0.85 a_0$	0.0	0.0	$2.3 \bar{\rho}$	0.0	0.0

$Z(r)$ 、 $F(\rho)$ はスプライン関数で内そうされる。

一方、Hに対する $F_H(\rho)$ 、 $Z_H(r)$ は、理論計算やNi中でのHのmigration energyや

heat of solution のデータから

$$F_H(\rho) = b_1 \rho + b_2 + 1 / (b_3 \rho + b_4) \quad (3)$$

$$Z_H(r) = \begin{cases} (1 - r/2.0)^{3.83} & (r < 2\text{\AA}) \\ 0 & (r > 2\text{\AA}) \end{cases} \quad (4)$$

ときめられる。ただし、 $b_1 = 20.44510$, $b_2 = -2.89786$, $b_3 = 52.89785$, $b_4 = 0.412562$ である。

3. シミュレーションの結果

分子動力学を用いて金属を構成する各原子と入射粒子の時々刻々の位置及び速度を求める。それには各粒子に作用する力を求めればよい。(1)式によれば k 番目の原子に作用する力 \vec{f}_k は

$$\vec{f}_k = - \sum_{j (\neq k)} (F_{k'j'} + F_{j'k'} + \phi_{j'k'}) \vec{r}_{jk}, \quad (5)$$

で与えられる。ここで、 \vec{r}_{jk} は j 番目から k 番目の原子へむかう単位ベクトルである。

標的となる Ni 原子は、 $0 \leq x \leq 7.5 a_0$, $0 \leq y \leq 7.5 a_0$, $-3.0 a_0 \leq Z \leq 0$ (a_0 格子定数) なる直方体中に FCC 構造をもたせて配置する。このとき、 $Z = 0$ の面は (100) 面であり、配置された原子の数は 897 個である。入射 H 原子は $Z = 5 (\text{\AA})$ のところから Z の負の方向に 1 eV の運動エネルギーで Ni に照射される。 $Z = 0$ の面から出射した H 原子は出射角 θ (Z の正方向と出射方向とのなす角) とエネルギーで区分けされる。

図 1 は、反射された H 原子のエネルギースペクトルである。反射エネルギーが 0.8~0.9 eV のピークは表面層にある Ni 原子に散乱されたために現われた。図 2 の Baskes の結果と比較すると、反射エネルギーが 0.4~0.5 eV のピークを除いてスペクトル全体の形はよく一致している。図 3 には、反射された H 原子の θ 依存性を示した。これも、Baskes の結果 (図 4) とよく一致している。最後に、1 eV H 原子の反射率を計算した結果、約 0.75 となり、Baskes の与えた値 0.5 よりも少し大きな値を得た。

4. 結 論

EAM により 1 eV H 原子を Ni (100) 面、に照射したときの反射率、および反射された H 原子のエネルギースペクトル、出射角分布を調べた。二体衝突モデルによるシミュレーションでは、1 eV H の場合、反射率が 1 となるが、EAM では多体効果、および化学的引力の作用のため反射率は 1 よりも小さくなった。

最後に、この EAM のコードを研究するように勧めて下さった名古屋大学プラズマ研究所企画情報センターの方々に感謝いたします。

図1 1 eV での垂直入射 H/Ni

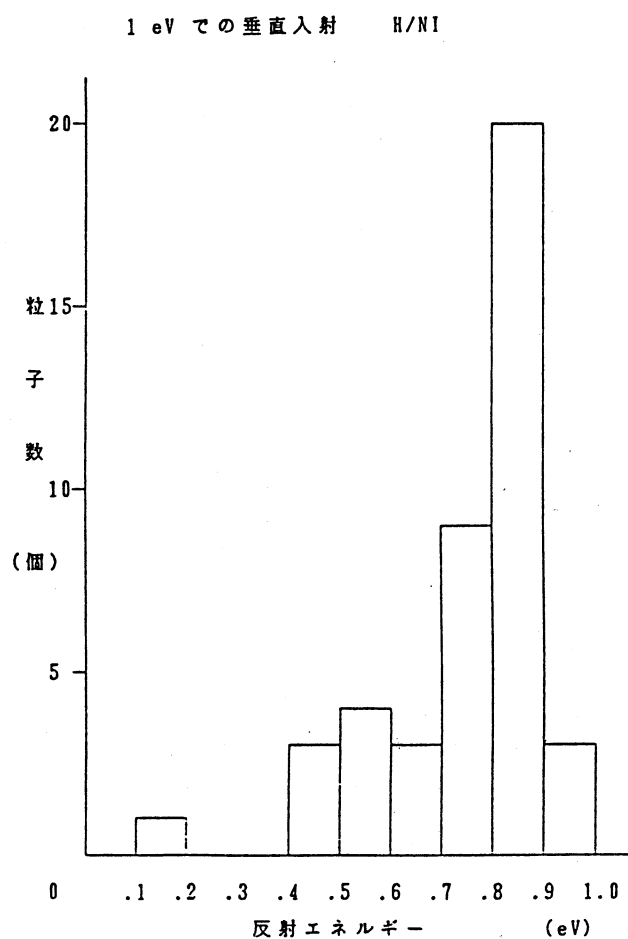


図2 1 eV での垂直反射 H/Ni

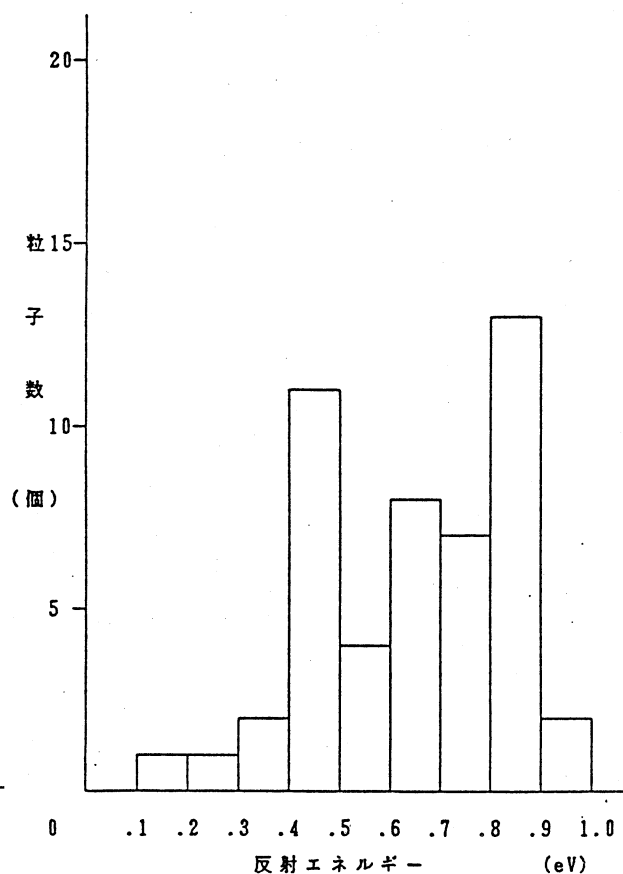


図3 1 eV での垂直入射 H/Ni

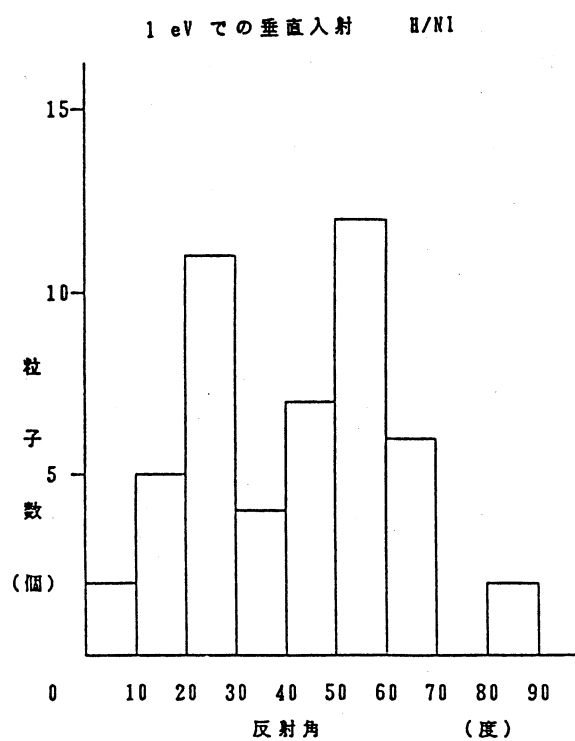
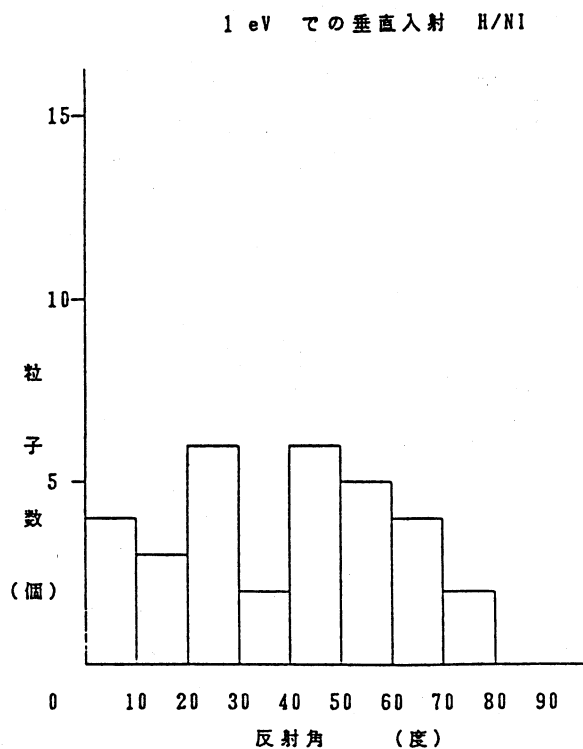


図4 1 eV での垂直入射 H/Ni



参 考 文 献

- 1) M. S. Daw and M. I. Baskes, Phys. Rev. B 29, 12 (1984).
- 2) M. I. Baskes, J. Nucl. Materials 128 & 129, 676 (1984).

金属錯体のX線結晶解析

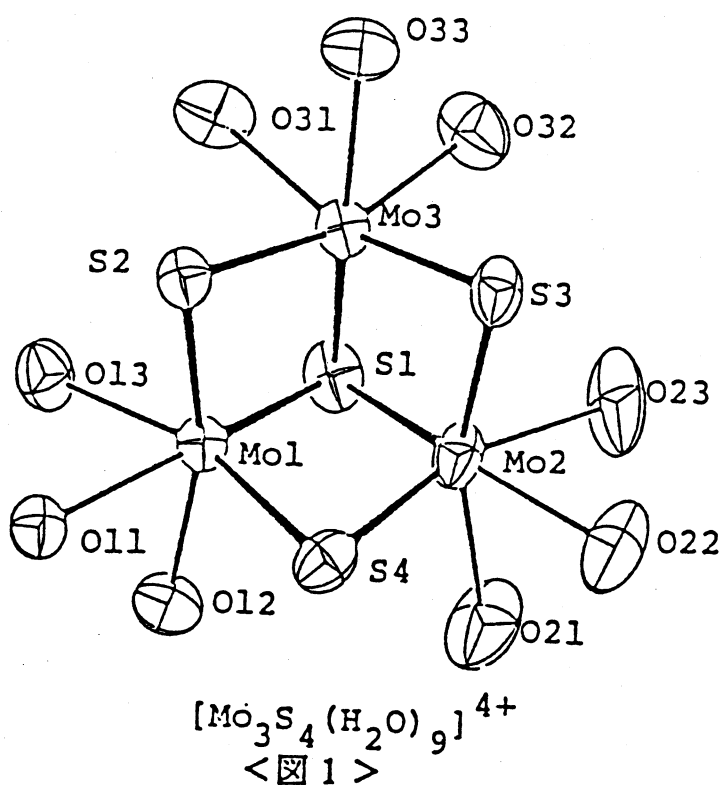
化学科 柴原隆志

1. はじめに

私達は一連のモリブデンおよびタングステンクラスター錯体を合成しその構造をX線構造解析により決定している。その研究の一端として、新規化合物、 $[\text{Mo}_3\text{S}_4(\text{H}_2\text{O})_9](\text{pts})_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (I) および $[\text{W}_3\text{S}_4(\text{H}_2\text{O})_9](\text{pts})_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (II), の構造を決定したので報告する。
(Hpts = p-touenesulfonic acid)

2. 結 果

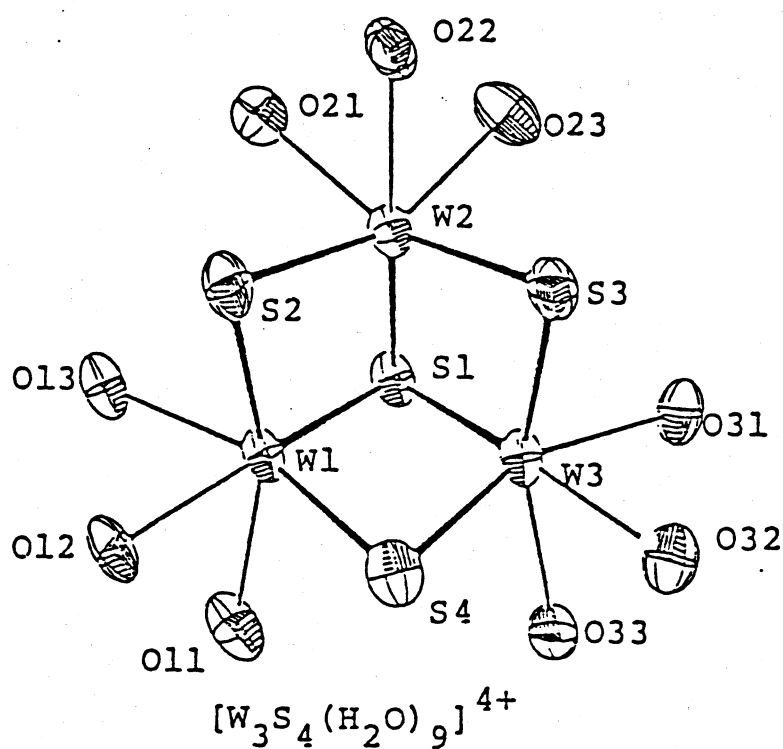
図1及び図2にX線構造を、表1及び表2に結晶学的データを、表3に結合距離の一部を示す。
IとIIの各種試薬に対する反応性に大きな差異のあることを私達は既に見い出しているが、構造上特筆すべき違いはみられない。



<表1>

CRYSTAL DATA

$[\text{Mo}_3\text{S}_4(\text{H}_2\text{O})_9](\text{pts})_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	
TRICLINIC	$F_w=1353.03$
SPACE GROUP	$P\bar{1}$
$a=15.342(2) \text{ \AA}$	
$b=16.709(2) \text{ \AA}$	
$c=12.086(2) \text{ \AA}$	
$\alpha=95.36(2)^\circ$	
$\beta=108.93(2)^\circ$	
$\gamma=102.60(2)^\circ$	
$V=2814.5(8) \text{ \AA}^3$	
$Z=2$	
$R=0.0696$	



< 图 2 >

< 表 2 >
CRYSTAL DATA

$[W_3S_4(H_2O)_9](pts)_4 \cdot 7H_2O$
 TRICLINIC $F_w=1652.80$
 SPACE GROUP $P\bar{1}$
 $a=15.494(5) \text{ \AA}$
 $b=15.755(6) \text{ \AA}$
 $c=11.833(5) \text{ \AA}$
 $\alpha=100.62(4)^\circ$
 $\beta=107.75(3)^\circ$
 $\gamma=76.08(3)^\circ$
 $V=2650.8(18) \text{ \AA}^3$
 $Z=2$
 $R=0.0569$

< 表 3 >
BOND DISTANCES/ \AA

	A	B
Mo--Mo	2.732	W--W 2.723
Mo- μ_3S	2.332	W- μ_3S 2.351
Mo- μ_2S	2.282	W- μ_2S 2.283
Mo--O	2.190	W--O 2.157

多重辞書類似度法による手書き漢字識別の研究

工学部電子工学科助教授 塩 野 充

文字認識の最も基本的な方法である重ね合わせ的手法はその簡便さと、雑音に対する強さから近年手書き文字認識にも応用が活発化している。しかしながら単純な重ね合わせだけでは認識性能においてある限度を越える事は困難であり、大分類段階で利用するにも不十分な能力である。重ね合わせ的手法の典型である単純類似度法においては辞書パターンは一般に1カテゴリ1個である。そこで本研究では1カテゴリの辞書パターンを複数化した類似度法（多重辞書類似度法と呼ぶ）において、辞書パターン数を次第に増加させていった場合、認識率はどのように変化してゆくかを調べる事により、類似度法の持つ基本的な識別能力を検討する実験を電総研手書き漢字データベース ETL 8-B 2 により行ってみた。実験では辞書パターン数の増加に伴い、認識率も単調増加してゆき、1カテゴリ当たり80個の辞書パターンを使用した場合、同じ80個の辞書パターンを加算して作成した単一の辞書パターンを使用した単純類似度法より約11.7%高い認識率91.45%が得られた。