

## 「イオン散乱シミュレーションによる固体表面構造解析」

総合情報学部 コンピュータシミュレーション学科 竹内研究室

Keywords: 表面構造解析、超 LSI、素材開発、ナノテクノロジー、イオン散乱、シミュレーション

### 「研究目的」

IC チップや超 LSI の製作において、これらの素材（固体）は非常に小さいため、固体表面の物性が大きく関与する。固体表面では、原子配列が途切れているため、固体内部とは異なる原子配列をしており、また異種原子が吸着するという表面特有の物性を示す。このような固体表面構造や組成の解明の 1 つの手法に、希ガスやアルカリ金属の正イオンを固体表面に衝突させ、入射イオンが固体内の原子から、どれだけの運動エネルギーを持って、どの方向に散乱されたかを観測する手法がある。この手法をイオン散乱という。当研究室では、この手法を ACOCT コードを用いたコンピュータシミュレーションにより行い、実験結果からだけでは解明できない固体表面の様々な情報（例えば入射イオンが固体内のどの原子から散乱されたかの情報）を得て、IC チップや超 LSI 製作等のための素材開発や核融合炉周辺の壁材料開発などに関連した基礎研究を行っている。

### 「ACOCT シミュレーション」

我々は、2 体衝突近似に基づいて、原子衝突を 3 次元的に取り扱った ACOCT (Atomic Collisions in a Crystalline Target) シミュレーションコードを開発している。ACOCT コードによる入射イオンの軌道（図 1 参照）から、ある特定の入射角で入射したイオンは、高い確率で特定の原子と衝突することが判明できる。このことより、実験結果の入射角に対する散乱イオン強度（個数）あるいは散乱粒子強度のピーク位置と ACOCT 結果のそれらとを比較して、最終的に表面近傍の原子の位置を定量的に評価している。

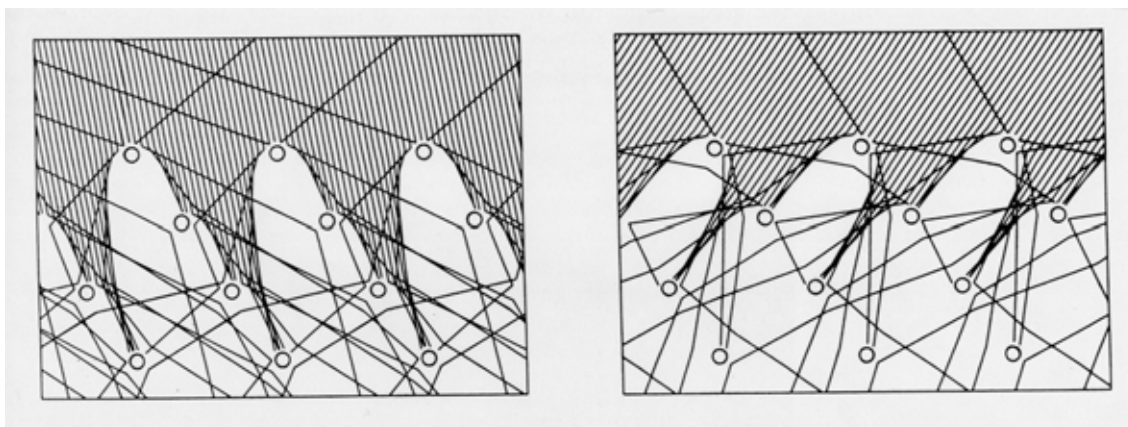


図 1 ACOCT コードによる入射イオンの軌道。白丸は原子を表す。