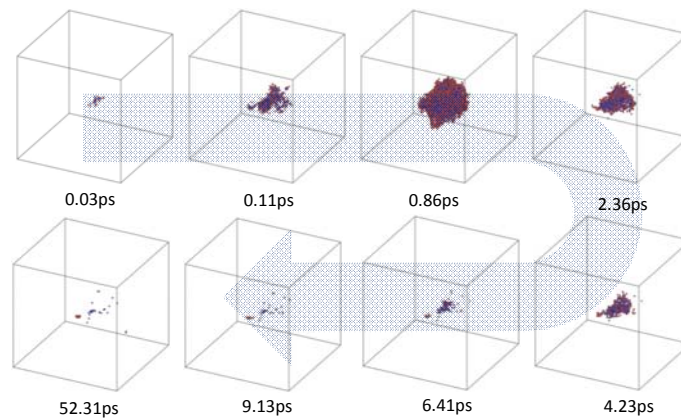


イオン加速器連結走査型トンネル顕微鏡を用いた はじき出し損傷の直接観察による 分子シミュレーションへの貢献



東京大学大学院 工学系研究科
原子力国際専攻 関村・沖田研究室
修士2年 菊池 大朗

はじき出し損傷の計算・実験的アプローチ



MDシミュレーションによるカスケード損傷の時間変化

計算的アプローチでは既に明確になっている物理モデルを導入し、その系統的な理解を得られる一方、物理モデルが明確になっていない場合や未発見の物理現象が存在する場合には実験的アプローチに基づく解析が必要となる

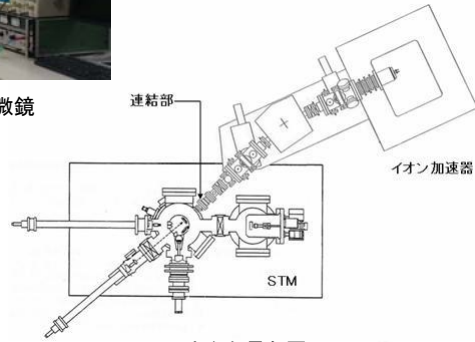
イオン加速器連結走査型トンネル顕微鏡



イオン加速器連結走査型トンネル顕微鏡

試料を真空チャンバ内で移動させることで、大気に晒すことなく照射と観察が可能である。

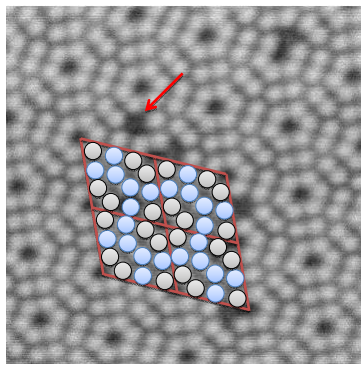
走査型トンネル顕微鏡 (STM) に、イオン加速器を連結した装置により、はじき出し損傷を原子レベルの空間分解能で観察する技術を確立した。



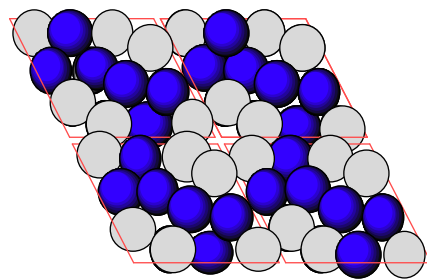
上から見た図

3

Si(111)観察像とモデルとの一致



Si(111)7×7再構成面観察像



Si(111)7×7モデル

4

本研究の目的

イオン加速器連結STMを用い、はじき出し損傷による微小なスケールでの局所的な欠陥形成過程を高空間分解能で定量的に測定し、はじき出し損傷過程の実験的解明に寄与することを目的とする。

将来的には、Auを始めとする金属材料へと対象試料を拡張し、照射欠陥形成過程に関してMD法等分子シミュレーションとの直接的な比較を行う

はじき出し損傷をシミュレートする際に重要となる、高エネルギー付与時における計算科学の妥当性検証に資する

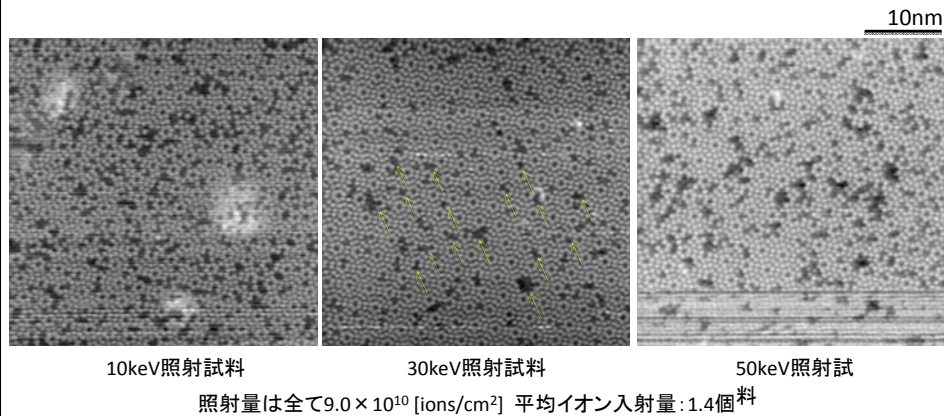
5

実験条件一覧

		単位
対象試料	Si(111)7×7再構成面N型半導体	
照射イオン	Ar ⁺	
イオン加速エネルギー	10 ~ 50	keV
メインチャンバ真空度	~2.0×10 ⁻⁸	Pa
トリートメントチャンバ真空度	~2.0×10 ⁻⁷	Pa
照射量	2.7×10 ¹⁰ ~ 1.8×10 ¹¹	ions/cm ²
照射・観察温度	室温・液体窒素温度	

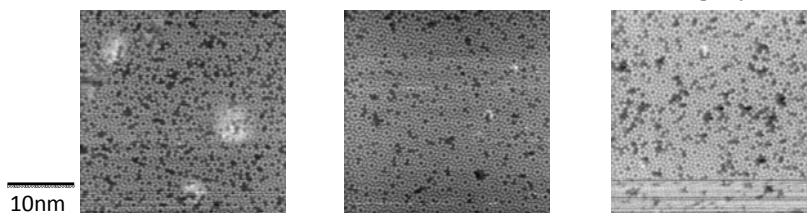
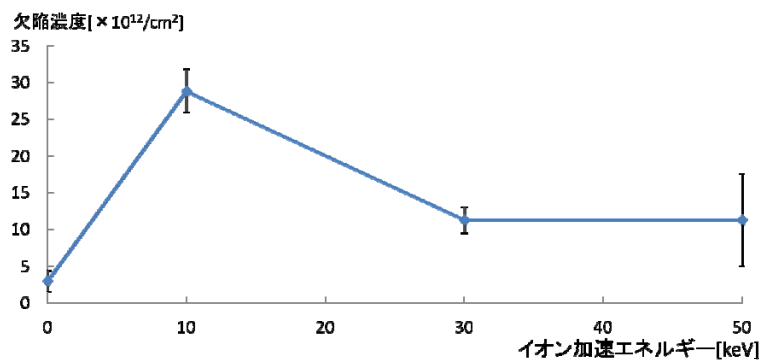
6

イオン加速エネルギー別照射試料観察像

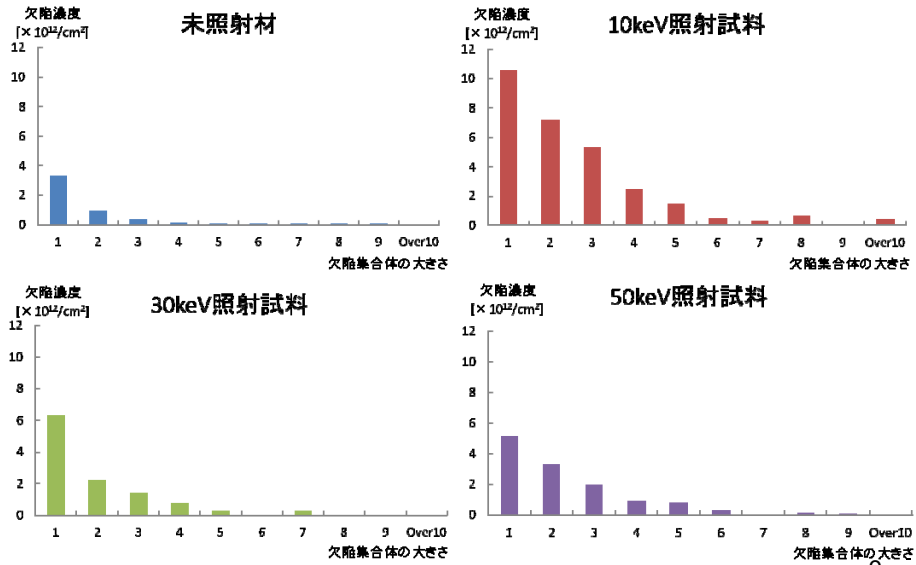


どの照射試料も非常に高密度の照射欠陥は形成するが、格子原子と照射欠陥を明確に区分することができる。
 10keV照射試料は特に高密度に照射欠陥が形成され、30keV照射試料では点欠陥が、10keV・50keV照射試料では数個の欠陥集合体がよく観察された。 7

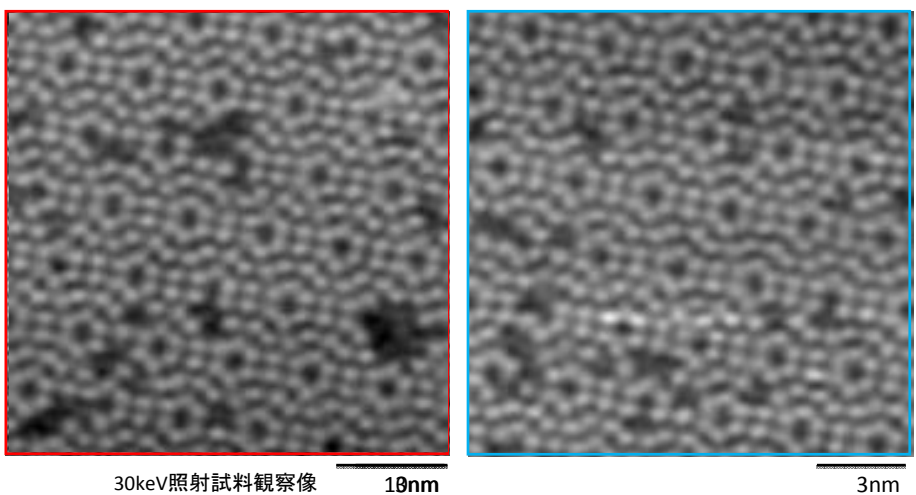
イオン加速エネルギー別照射材の欠陥濃度



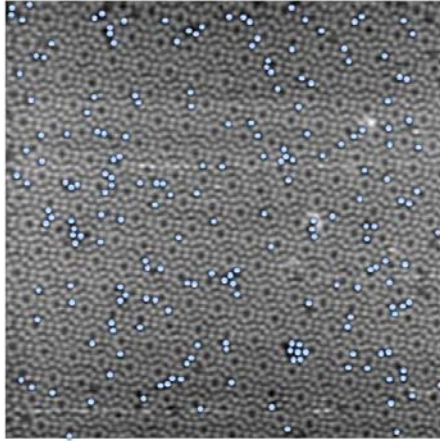
イオン加速エネルギー別照射材のサイズ分布



局所的照射欠陥の観察 -30keV照射試料



計算科学での照射欠陥評価に 取り入れるべき課題



30keV照射試料欠陥観察像 10nm
イオン照射量: 9.0×10^{10} ions/cm²

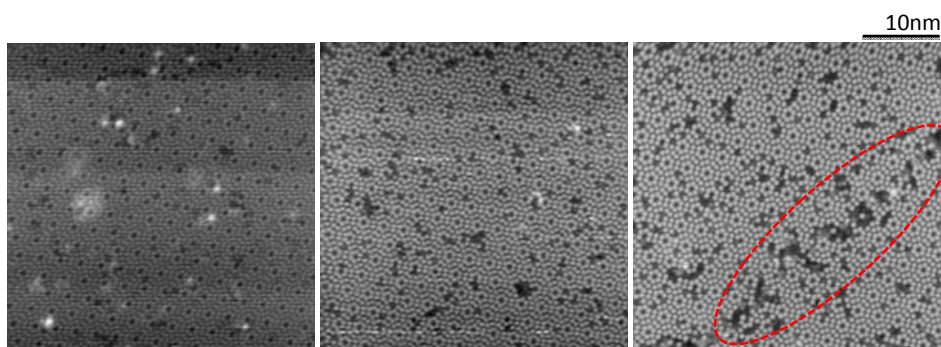
個々のイオンが作り出す照射欠陥数の比較

照射試料	入射イオン当たりの照射欠陥数
10keV	289
30keV	93
50keV	93

入射イオン当たりの欠陥生成率が極めて高く、入射イオンとの直接衝突以外の過程でも欠陥形成過程が存在することが示唆される。

この事実は今後照射欠陥を評価する上で取り入れるべき課題である。

照射量別照射試料観察像



照射量: 2.7×10^{10} [ions/cm²]
平均イオン入射量: 0.4個

照射量: 9.0×10^{10} [ions/cm²]
平均イオン入射量: 1.4個

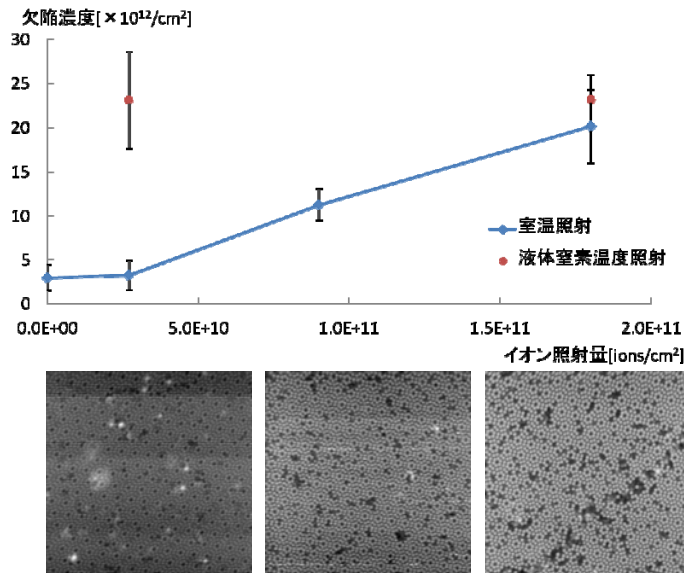
照射量: 1.8×10^{11} [ions/cm²]
平均イオン入射量: 2.8個

イオン加速エネルギーは全て30keV

照射時間(イオン照射量)が増加していくにつれて欠陥の導入量が多くなっているのが分かる。

特に20sec照射した試料は大きな欠陥集合体がよく観察され、赤丸で示した部分では大きな欠陥の連なりが観察された。

各照射材の欠陥濃度とイオン照射量の関係

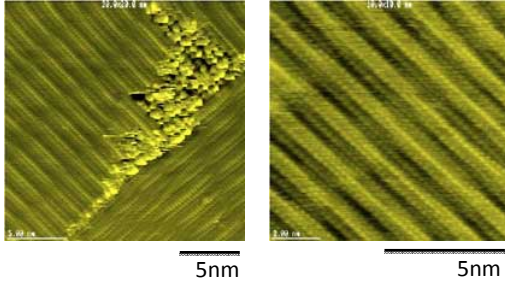


まとめ

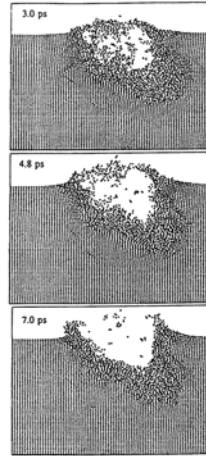
- ▶イオン加速器連結STMを用いて表面酸化・不純物吸着を極力低減させた照射欠陥の鮮明な像を得、はじき出し損傷素過程の極微小スケールでの観察に成功した。
- ▶照射欠陥は極めて高密度に形成され、入射イオンとの直接衝突以外の過程でも形成しうることが明らかになった。
- ▶イオン加速エネルギーや照射量依存性実験において特徴的な欠陥を観察し、欠陥濃度や原子レベルでのサイズ分布など計算科学と直接比較できるパラメータに関するデータを得た。

今後の展望 -Auへの対象試料の移行-

STMIによるAu観察像



分子動力学法を用いたAu表面欠陥形成に関するシミュレーション



20keV Au irradiation