

## Q &amp; A

## IMFPの定性的な理解について

田沼繁夫

(株) ジャパンエナジー分析センター

〒 335 戸田市新曽南 3-17-35

Q: 先日一村氏(電総研)から、IMFPの大小は一般的には価電子密度の大小で説明されるが、金と銅では逆転するなど例外も多い。定性的にはIMFPの大小はどう理解すべきなのか? という質問を受けました。完全ではありませんが、私たちが提案しているTPP-2M式を使って、IMFPの定性的な考え方をのべたいと思います。

ある。

$$\lambda = 1/n_a \sigma_{tot} \quad (4)$$

また、全非弾性散乱断面積を与えるBetheの式は次式で表される。

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi a_0^2}{(E/R)} M_{tot}^2 \ln\left(\frac{4c_{tot}E}{R}\right) \quad (5)$$

$$M_{tot}^2 = \int_0^{\Delta E_{max}} \frac{2R \operatorname{Im}[-1/\epsilon(\Delta E)] d(\Delta E)}{\pi \hbar^2 \Omega_p^2} \\ = R b N_v / \Delta E_a \approx R N_v / \Delta E_a \quad (6)$$

A: IMFPの一般式TPP-2Mは次式で表される。

$$\lambda = \frac{E}{E_p^2 \left[ \beta \ln(\gamma E) - C/E + D/E^2 \right]} \quad (\text{\AA}) \quad (1)$$

$$\beta = -0.0216 + \frac{0.944}{(E_p^2 + E_g^2)} + 7.39 \times 10^{-4} \rho \quad (2)$$

ここで、 $E_p$ は自由電子プラズモンエネルギー、 $E_g$ バンドギャップエネルギーである。また、 $\gamma$ ,  $C$ ,  $D$ の式は省略した。

ここでエネルギーの高い場合を考えれば ( $E > 500$  eV), 上の式は簡略化でき

$$\lambda = \frac{E}{E_p^2 \beta \ln(\gamma E)} \quad (\text{\AA}) \quad (3)$$

となる。ここで  $\gamma \ll E$  であるから、IMFPの値の物質による大小は  $1/E_p^2 \beta$  で決まることになる。

ここでBetheの式とTPP-2M式の間を比べて見る。

IMFP  $\lambda$  は全非弾性散乱断面積  $\sigma_{tot}$  とは次式の関係に

ここで、 $N_v$ は価電子の数、 $\Delta E_a$ は平均励起エネルギー、 $M_{tot}^2$ はdipole matrix elementの2乗である。

(4), (5)式を定数項を入れて整理すれば

$$\lambda = \frac{A E}{28.8 \rho M_{tot}^2 \ln(\gamma E)} \quad (\text{\AA}) \quad (7)$$

となる。

(7), (3)式を比較すれば  $M_{tot}^2$  は次式で表される。

$$M_{tot}^2 = 28.8 \beta N_v \equiv \frac{R N_v}{\Delta E_a} \quad (8)$$

したがって、 $\beta$  および問題になっている  $1/E_p^2 \beta$  は次のように表される。

$$\beta \equiv \frac{k}{\Delta E_a} \quad (9)$$

$$1/E_p^2\beta = k \frac{\Delta E_a}{n_v} \quad (10)$$

ここで、 $k$ は定数である。したがって、IMFPの物質による相違は平均励起エネルギーを価電子密度でわった値に依存することになる。すなわち、価電子あたりの励起エネルギーが高いほどIMFPは大きな値となる。

この考え方が、成り立つか否かをAl, Cu, Auで考えてみる。これらのIMFPは右図に示すように、300eV以上では $Au < Cu < Al$ の順に大きくなっている。そこで、価電子密度の逆数や、 $1/E_p^2\beta$ を計算したものを表1に示す。これから明らかな様にこれらの金属におけるIMFPの大小は $1/E_p^2\beta$ の値、即ち $\Delta E_a/n_v$ により決定されている。また、平均励起エネルギーを自由電子プラズモンエネルギーで代表させる( $\Delta E_p/n_v$ )ことは、表からわかるようにCuやAuのような非自由電子的な金属ではうまく行かない。また、単純な価電子の密度( $1/n_v$ )だけでIMFPの値が決まらないこともこの表からわかる。

表1. IMFP値と係数の計算値

	$1/n_v$	$\Delta E_a/n_v$	$E_p/n_v$	IMFP(1000eV)
Al	1.00	1.00	1.00	21.3 Å
Cu	0.19	0.67	0.43	17.5 Å
Au	0.28	0.52	0.53	13.9 Å

IMFPを除く値はすべてAlで規格化した。また、

$$\frac{\Delta E_a}{n_v} = 1/E_p^2\beta$$

である。

