

非晶質炭素のスパッタリング破壊

- 物理的解釈と宇宙ダストへの応用に向けて -

野沢 貴也

国立天文台 CfCA (天文シミュレーションプロジェクト)

自然科学機構連携 ネットワーク型研究加速事業

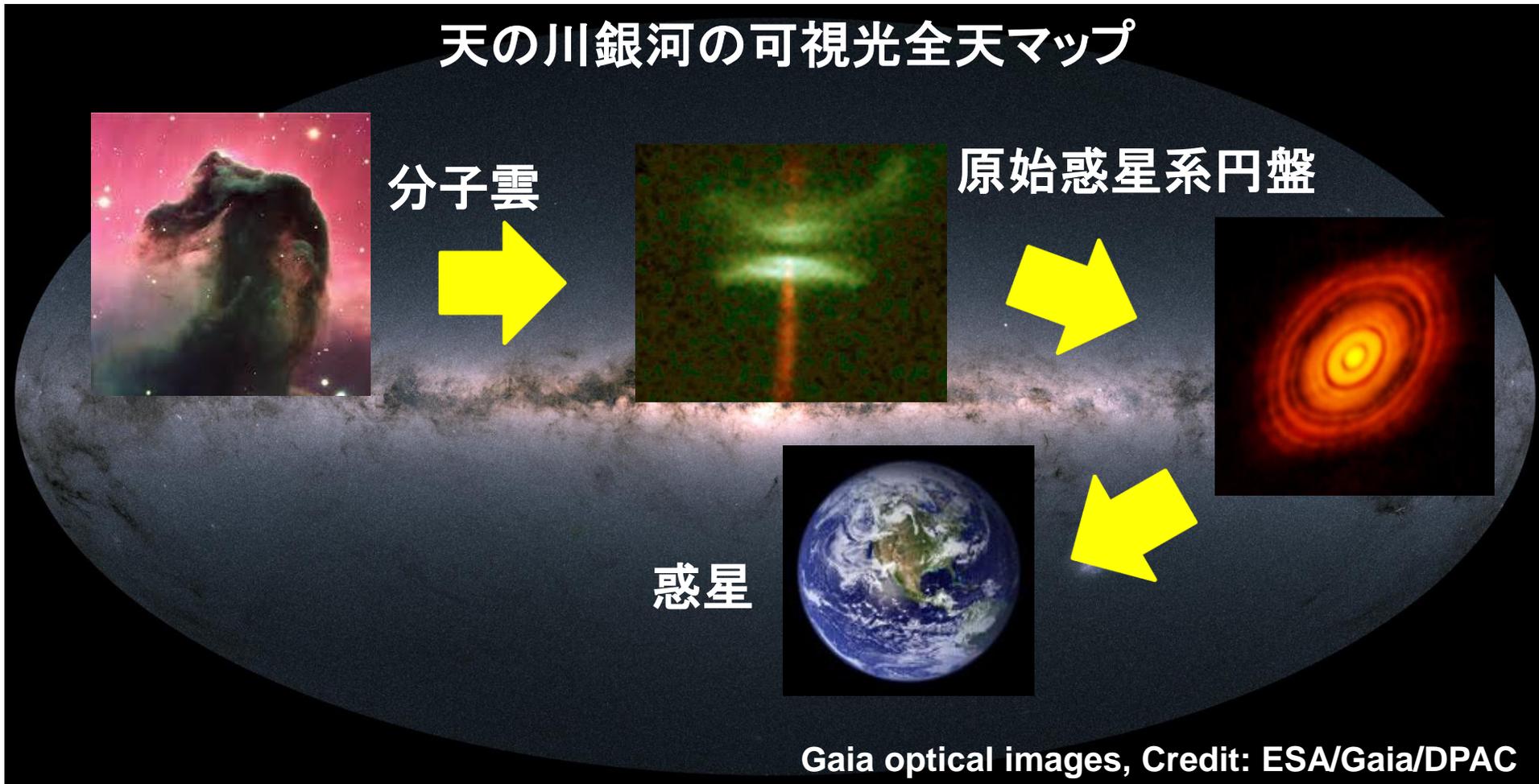
「シミュレーションによる自然科学における階層と全体」

共同研究者

伊藤 篤史、高山 有道、石黒 静児 (核融合研)

富阪 幸治、小久保英一郎 (国立天文台)

1-1. 星間ダスト(星間塵)

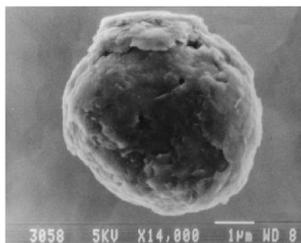


- ダストは星からの紫外可視光線を吸収し、赤外線を放射する
- 惑星の原材料 → ダストは宇宙固体物質進化の基本物質

1-2. 星間ダストの組成とサイズ

○ 炭素質ダスト

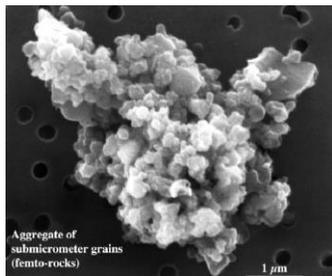
- グラファイト
- 非晶質炭素



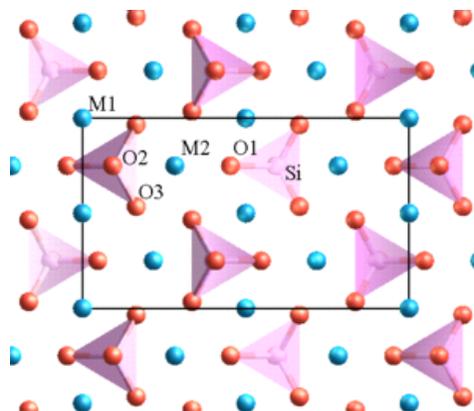
© Amari, S.

○ ケイ酸塩(シリケート)ダスト

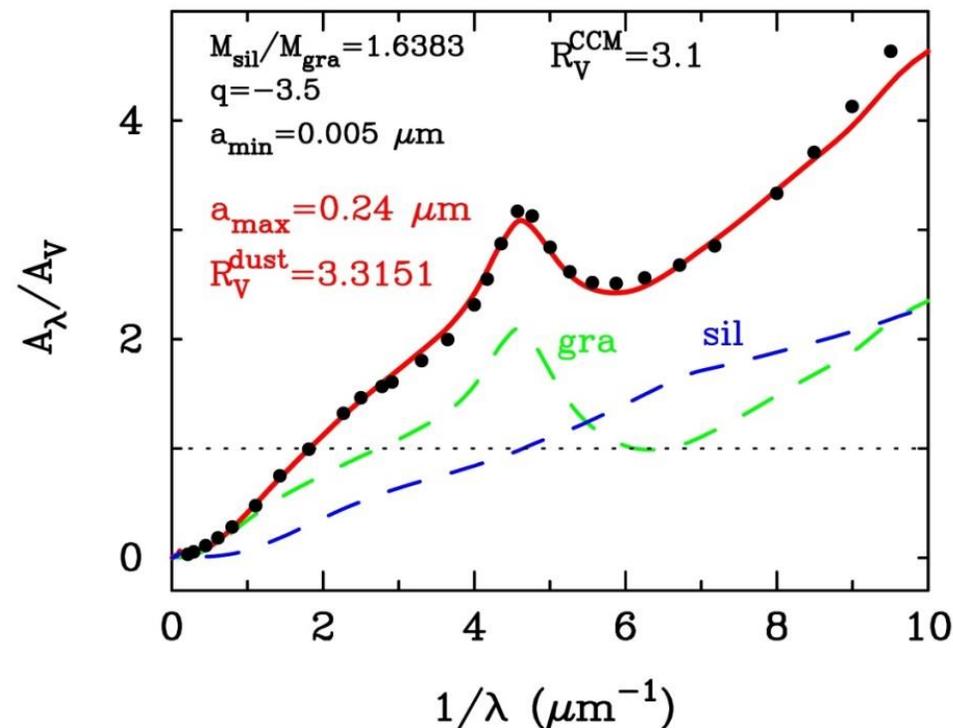
- $Mg_xFe_{(1-x)}SiO_3$ (輝石)
 $MgSiO_3$ 、 $FeSiO_3$
- $Mg_2xFe_{2(1-x)}SiO_4$ (かんらん石)
 Mg_2SiO_4 、 Fe_2SiO_4 、 $MgFeSiO_4$
- SiO_2 (石英)



© Messenger, S.



天の川銀河の平均の減光曲線



○ 典型的なサイズ(分布)

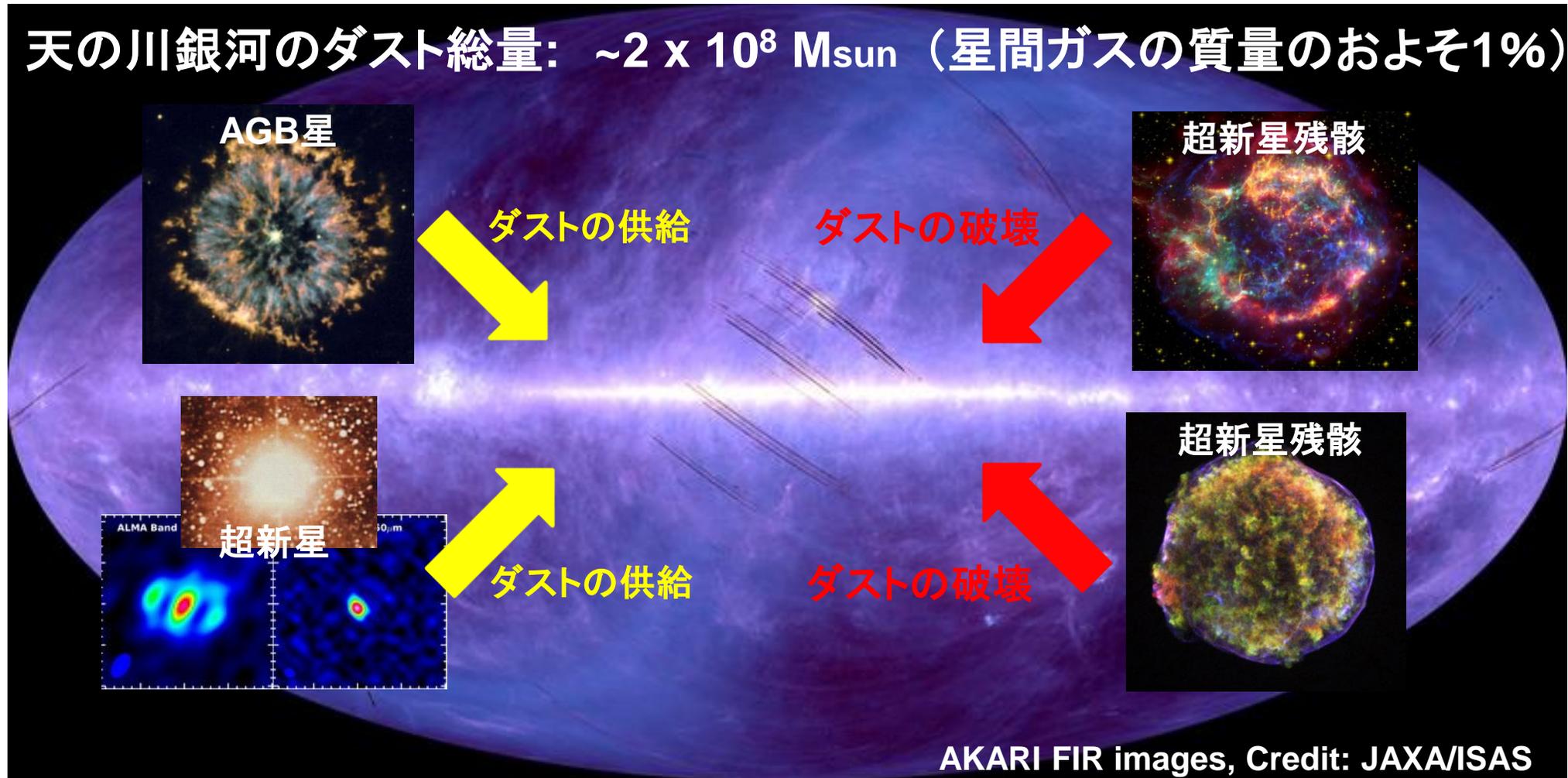
$$dN_{\text{dust}}/da \propto a^{-3.5}$$

$$a = 0.001\text{--}0.25 \mu\text{m}$$

aは半径(球形を仮定)

1-3. 星間ダストの進化

天の川銀河のダスト総量: $\sim 2 \times 10^8 M_{\text{sun}}$ (星間ガスの質量のおよそ1%)



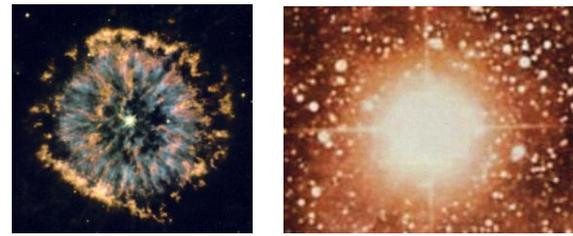
星間ダストの進化は、AGB星や超新星などでの形成と
星間衝撃波による破壊とのバランスで決定される

1-4. 星間ダストの供給と破壊

○ 星 (AGB星・超新星)からの星間ダストの供給率

$$\frac{dM_{\text{dust}}}{dt} \simeq 0.01 \left(\frac{\phi_{\text{sf}}}{4 M_{\odot} \text{ yr}^{-1}} \right) \left(\frac{f_{\text{AGB-SN}}}{0.3} \right) \left(\frac{f_{\text{gas,ejected}}}{0.75} \right) \left(\frac{f_{\text{dust,form}}}{0.01} \right) M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$$

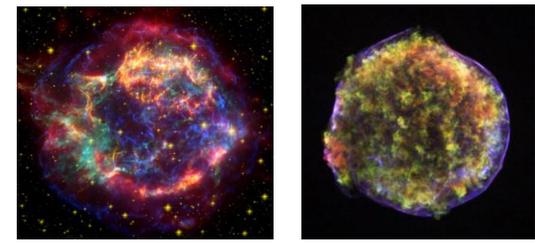
星形成率=星の消失率
星がAGB星・超新星となる割合
AGB星・超新星から放出されるガスの割合
ダストが凝縮する割合



○ 超新星の衝撃波による星間ダストの破壊効率

$$\frac{dM_{\text{dust}}}{dt} \simeq -0.06 \left(\frac{R_{\text{SN}}}{0.01 \text{ yr}^{-1}} \right) \left(\frac{M_{\text{gas,swept}}}{2000 M_{\odot}} \right) \left(\frac{D_{\text{ISM}}}{0.01} \right) \left(\frac{f_{\text{dust,dest}}}{0.3} \right) M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$$

超新星が起こる頻度
衝撃波が掃くガスの質量
ダストとガスの質量比
ダストが破壊される割合



星間ダストの破壊効率は供給率を上回る
 → 星間ダストの量は時間とともに減少するはず

2-1. ダストの破壊過程

○ 蒸発 (昇華, evaporation)

→ (大質量) 星のごく近傍のみ

※ 高温プラズマ中でもダストは蒸発しない

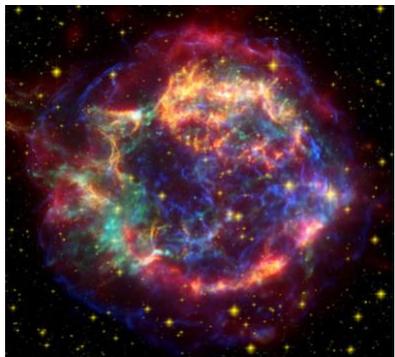
- ガス密度が非常に低いため
- ダストの温度は高々100K程度

○ 破砕 (衝突破壊, shattering)

→ ダストの総量を変えない

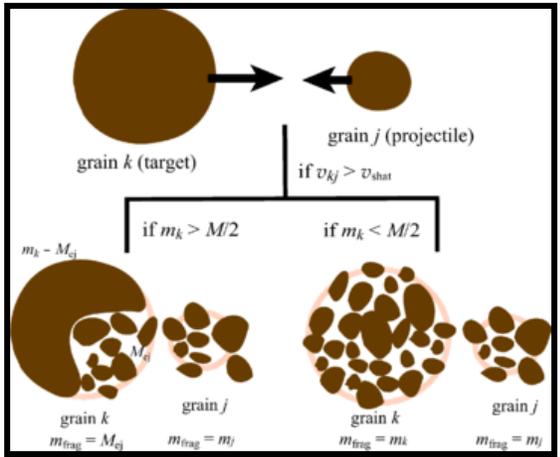
○ スパッタリング (sputtering)

高エネルギーのイオンの衝突により、
固体表面の原子がはじきだされる

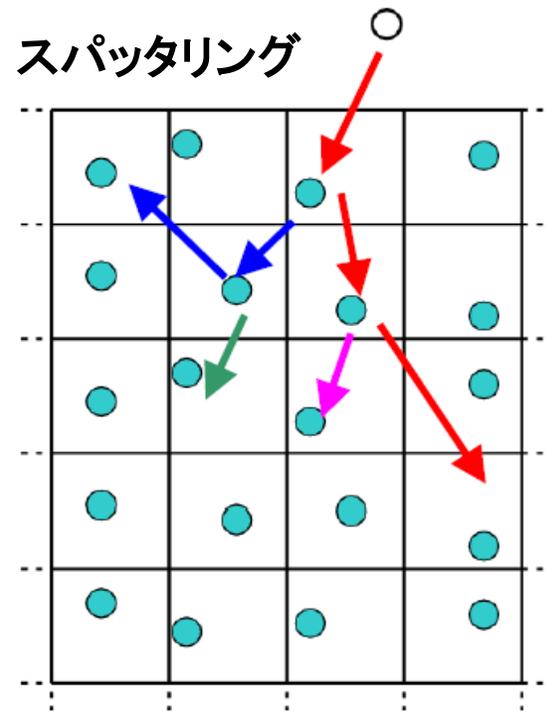


赤は衝撃波中で加熱されたダストからの赤外線

破砕 (shattering)



Hirashita & Yan (2009)



スパッタリングは
主に固体原子の
多重散乱 (衝突
カスケード) により
引き起こされる

2-2. スパッタリングによるダスト半径の減少率

○ スパッタリングイールド $Y(E)$:

入射1粒子の衝突あたりに固体から放出される原子の数

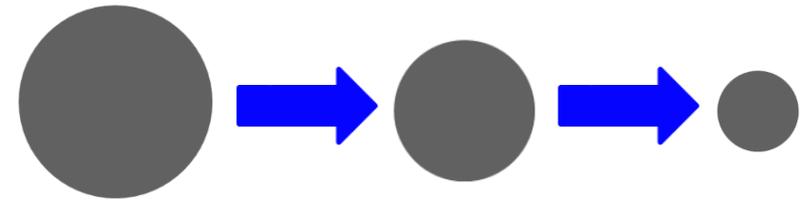
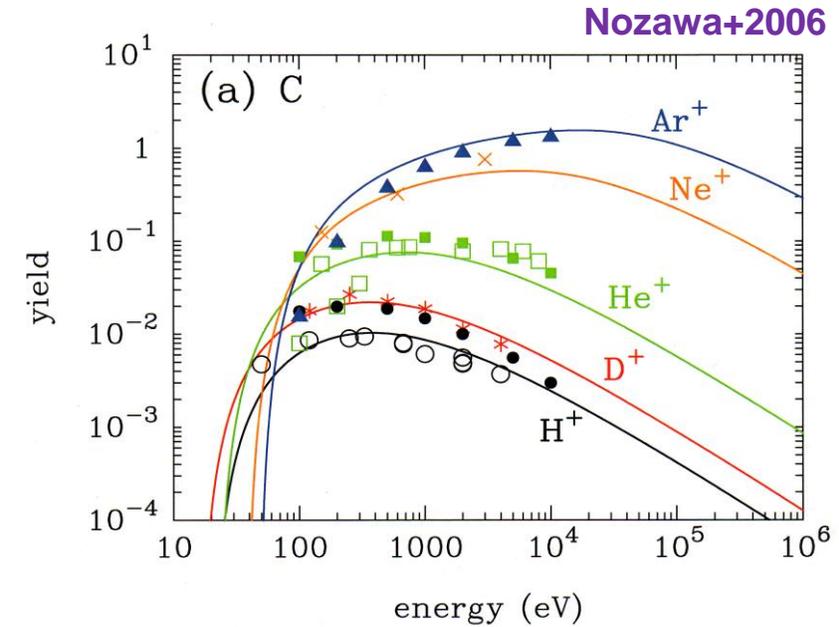
→ 以前は、主に室内実験から導出されていた

○ (準経験的)理論公式 (Bohdansky 1984)

$$Y_i^0(E) = 4.2 \times 10^{14} \frac{S_i(E)}{U_0} \frac{\alpha_i(\mu_i)}{K\mu_i + 1} \left[1 - \left(\frac{E_{\text{th}}}{E} \right)^{2/3} \right] \left(1 - \frac{E_{\text{th}}}{E} \right)^2,$$

○ スパッタリングによる球形ダストの半径(a)の減少率

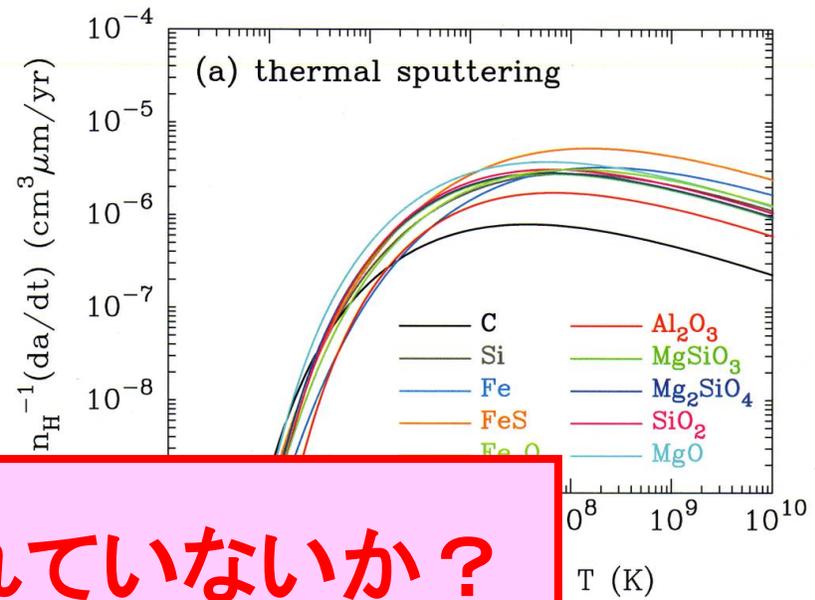
$$\frac{dV_d}{dt} = 4\pi a^2 \frac{da}{dt} = -\pi a^2 \frac{4\pi a_0^3}{3} \sum n_i \langle v_i Y_i \rangle$$
$$\frac{da}{dt} = -\frac{1}{4} \Omega n_H \sum A_i \langle v_i Y_i \rangle = 10^{-6} \left(\frac{n_H}{1 \text{ cm}^{-3}} \right) \mu\text{m yr}^{-1}$$



2-3. スパッタリングによるダスト半径の減少率

○ 宇宙空間でのスパッタリングによるダスト半径の減少率

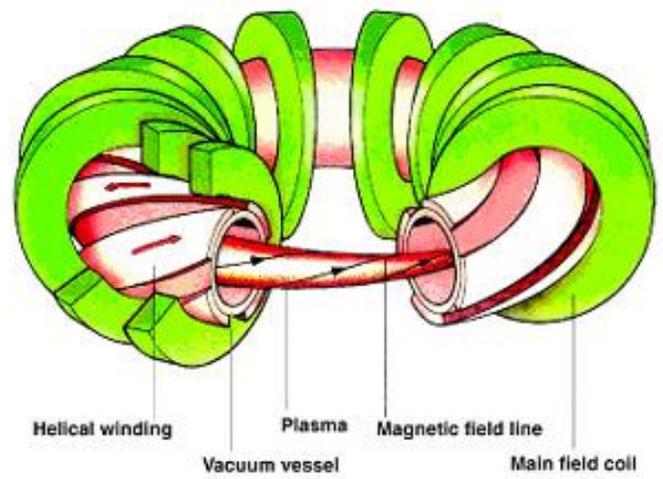
$$\left| \frac{da}{dt} \right| = 10^{-6} \left(\frac{n_H}{1 \text{ cm}^{-3}} \right) \mu\text{m yr}^{-1}$$



○ 地

スパッタリングイールドは過大評価されていないか？

$$\begin{aligned} \left| \frac{da}{dt} \right| &= 10^{-6} \left(\frac{10^{14} \text{ cm}^{-3}}{1 \text{ cm}^{-3}} \right) \mu\text{m yr}^{-1} \\ &= 10^4 \left(\frac{n_H}{10^{14} \text{ cm}^{-3}} \right) \text{cm yr}^{-1} \\ &\approx 30 \left(\frac{n_H}{10^{14} \text{ cm}^{-3}} \right) \text{cm day}^{-1} \end{aligned}$$



※ 実際の核融合炉の壁面素材はタンゲステンを使用するので、浸食率は上記の値より一桁程度減少する

2-4. 現実的なスパッタリングイールドに向けて

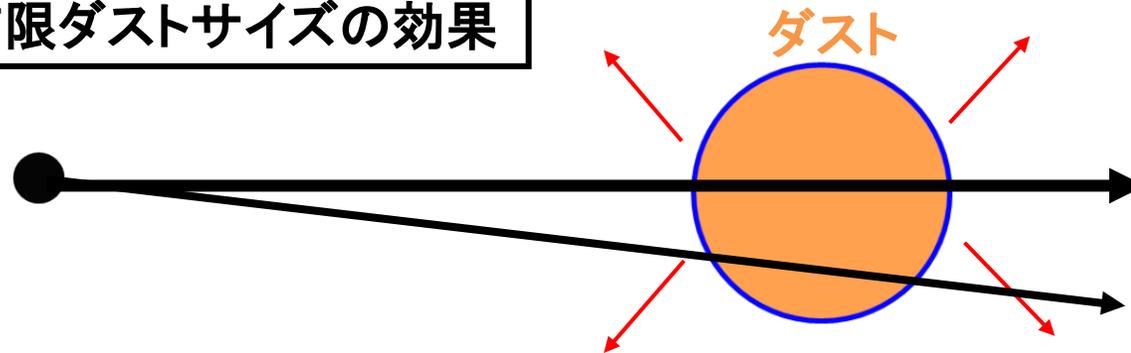
実験のターゲット物質

- バルク物質 (数cm以上)
- 主に結晶質の物質
- 滑らかな表面構造
- 物質内に空隙なし

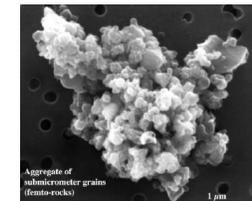
実際の宇宙ダスト

- 有限サイズ (数 μm 以下)
- 主に非結晶質の物質
- 荒い表面構造
- 物質内に空隙あり

有限ダストサイズの効果



© Amari, S.

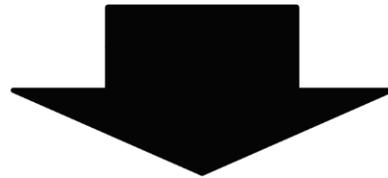


© Messenger, S.

2-5. 本研究の目的

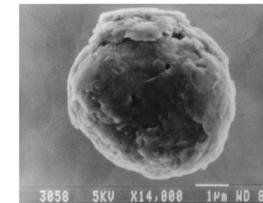
研究目的

- ・ 3次元シミュレーションによって、スパッタリングによる星間ダストの破壊効率の再評価を行う
 - ダストの形成・破壊を伴う星間ダストの進化(国立天文台)
 - スパッタリングの物理と最先端の計算手法(核融合研)

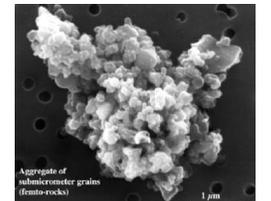


○ 非晶質炭素(バルク物質)のスパッタリング計算

- ① 入射粒子・入射エネルギーの依存性
(と従来の実験・計算結果との比較)
- ② 非晶質炭素の物質密度の依存性



© Amari, S.

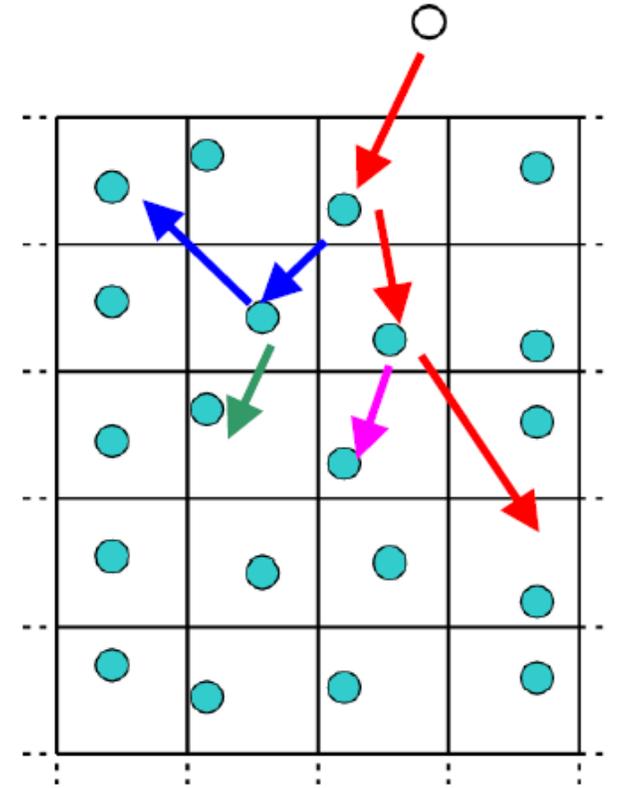
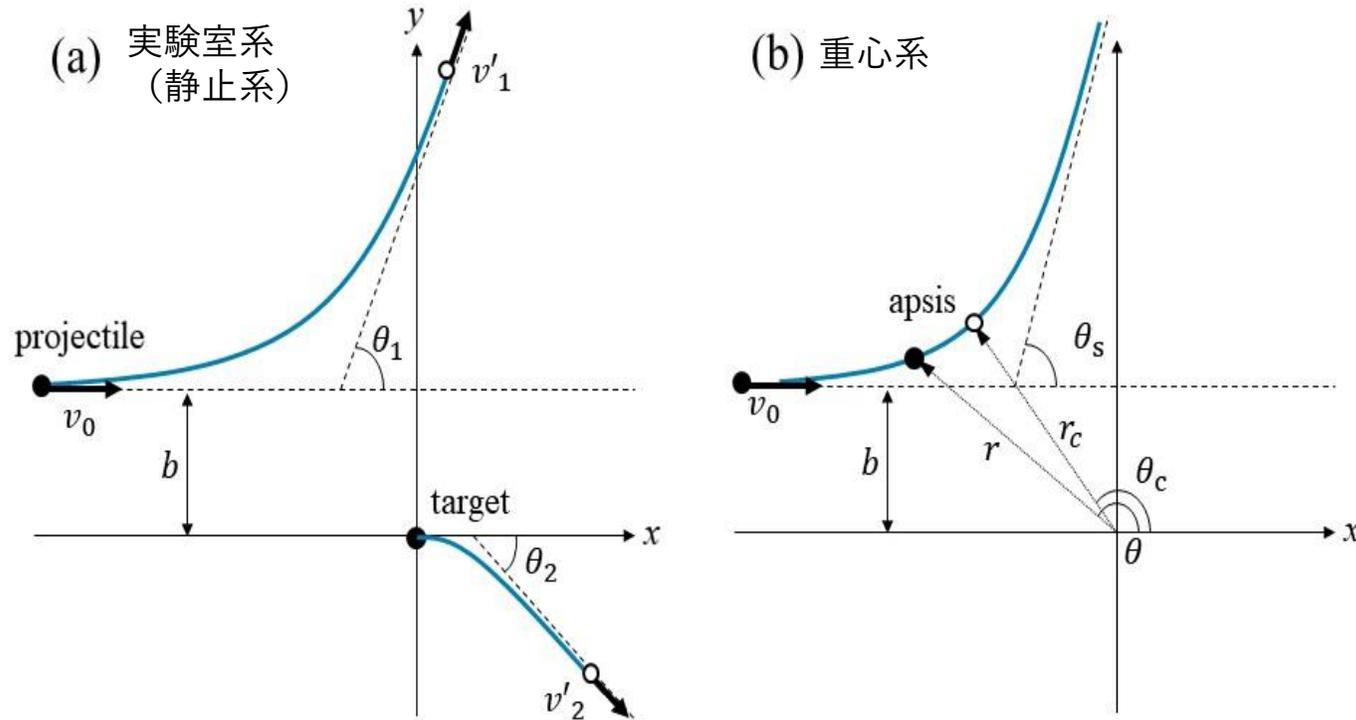


© Messenger, S.

3-1. スパッタリングの計算コード

○ 計算コード: BDoG (核融合研 伊藤篤史さん)

二対衝突近似 (BCA)、3Dシミュレーション



1

※ b : インパクトパラメータ(衝突係数)、 θ_1 : 入射粒子の散乱角

※ 核子間の相互作用は、universal (ZBL) ポテンシャルで決定

3-2. 計算のモデル

○ 計算のモデル

- ターゲット: C (非晶質炭素)、バルク物質

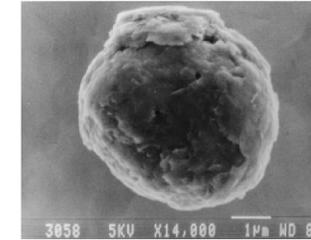
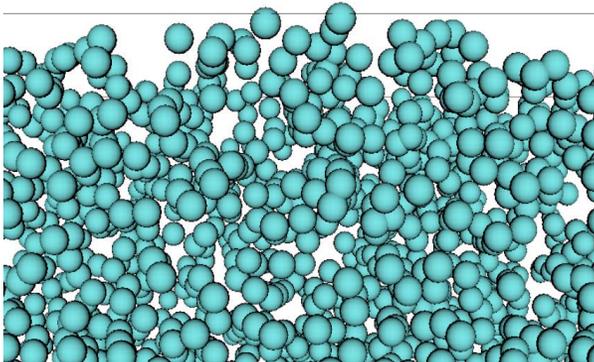
物質密度: 2.2, 2.0, 1.85, 1.7, 1.5, 1.3, 1.15, 1.0, 0.8 g/cm³

標準 隕石中で発見 空隙の多いダストに対応

- 入射粒子: H、He、C

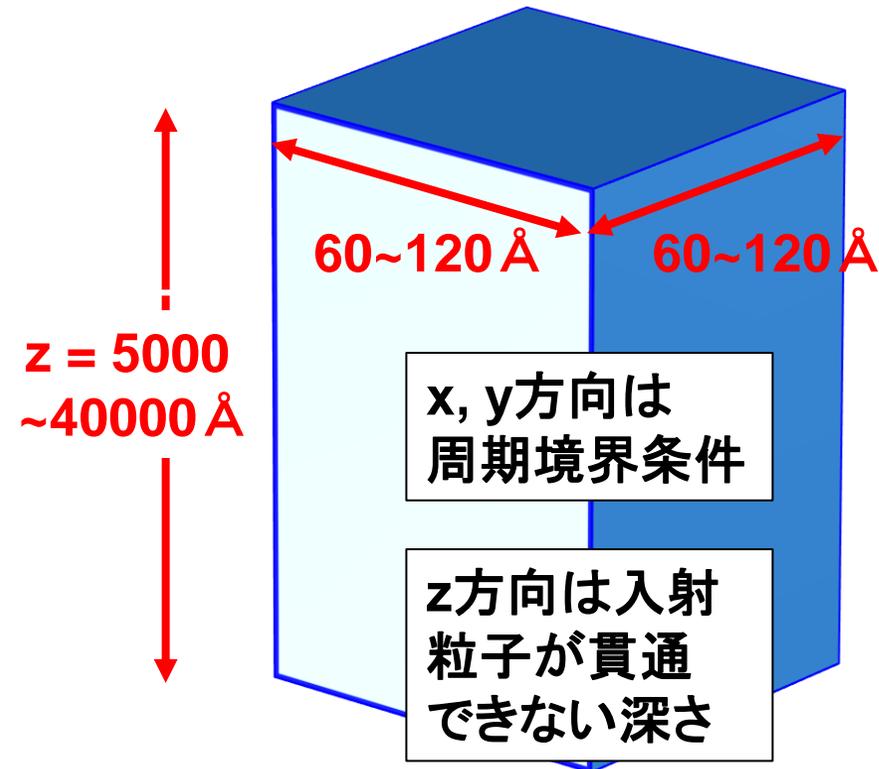
各物質密度、各入射粒子、
各エネルギーに対して10⁶発入射

非晶質炭素の原子配置の例



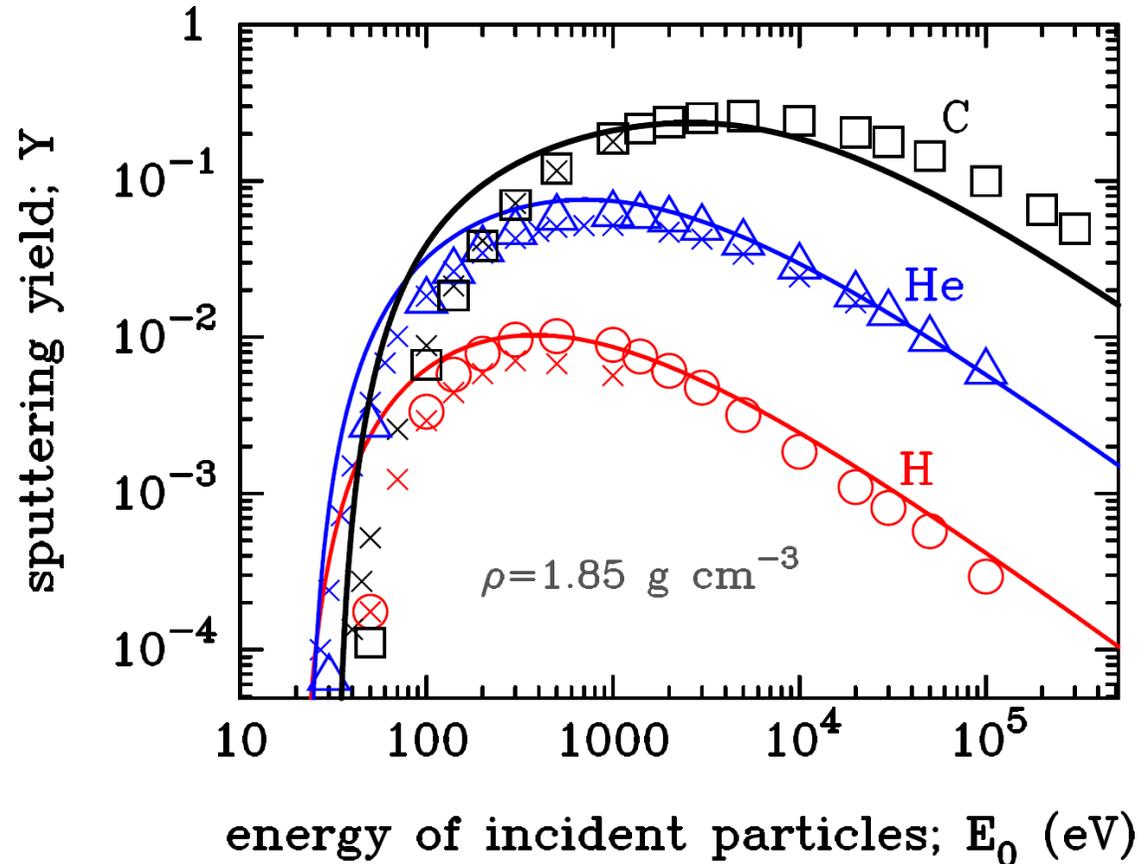
Low density
graphite:
1.7-1.85 g/cm³

© Amari, S.



4-1. スパッタリングイールドの計算結果

スパッタリングイールドの入射エネルギー依存性

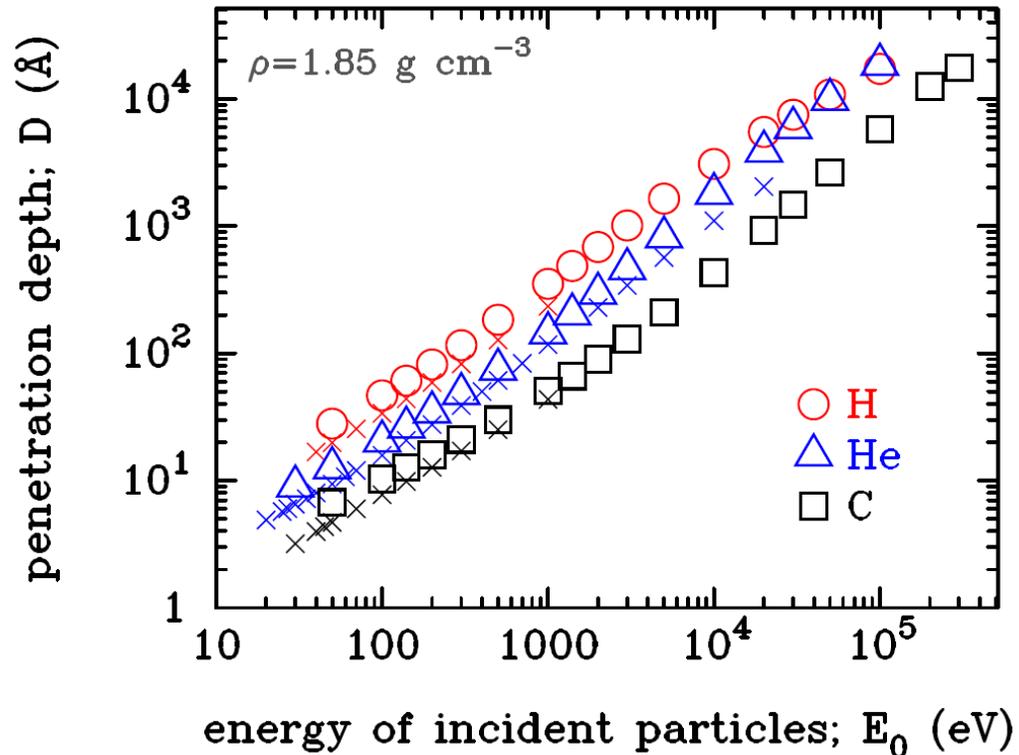


- BDoGによる計算
→ オープンシンボル
(○、△、□)
- TRIM.SPによる計算
→ バツ印(×)
- (準経験的)理論式
→ 実線

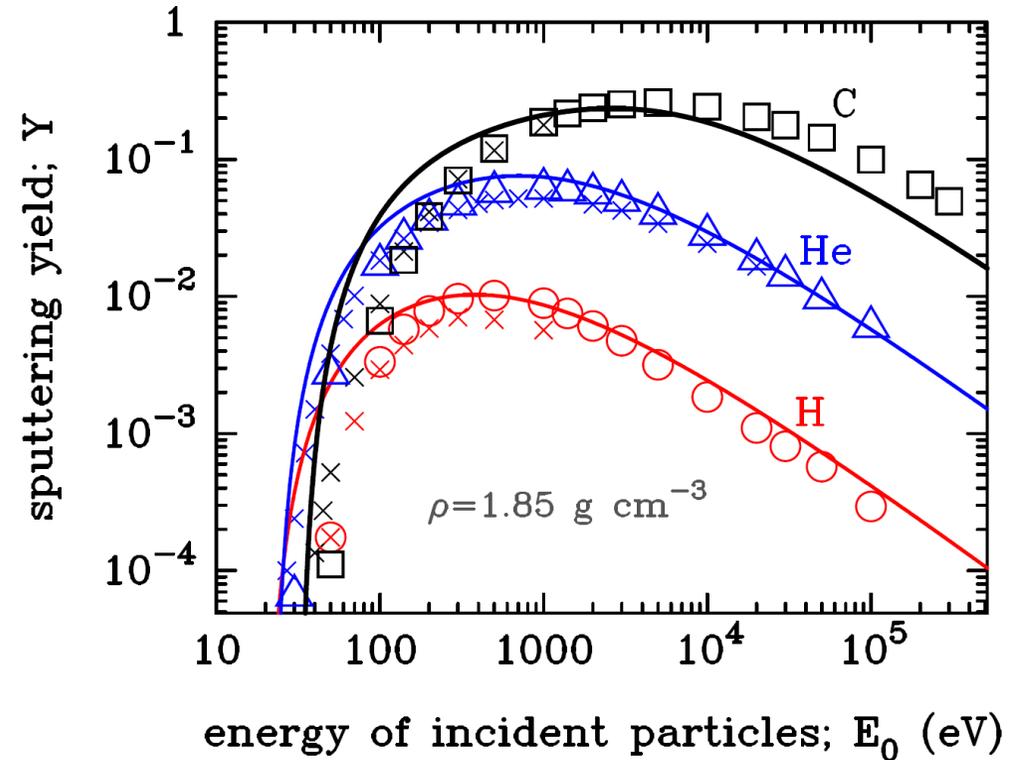
- なぜ入射粒子が重いほどイールドは高くなるのか？
- なぜイールドはあるエネルギーでピークをもつのか？

4-2. 入射粒子の到達深さとスパッタリングイールド

入射粒子の到達深さ



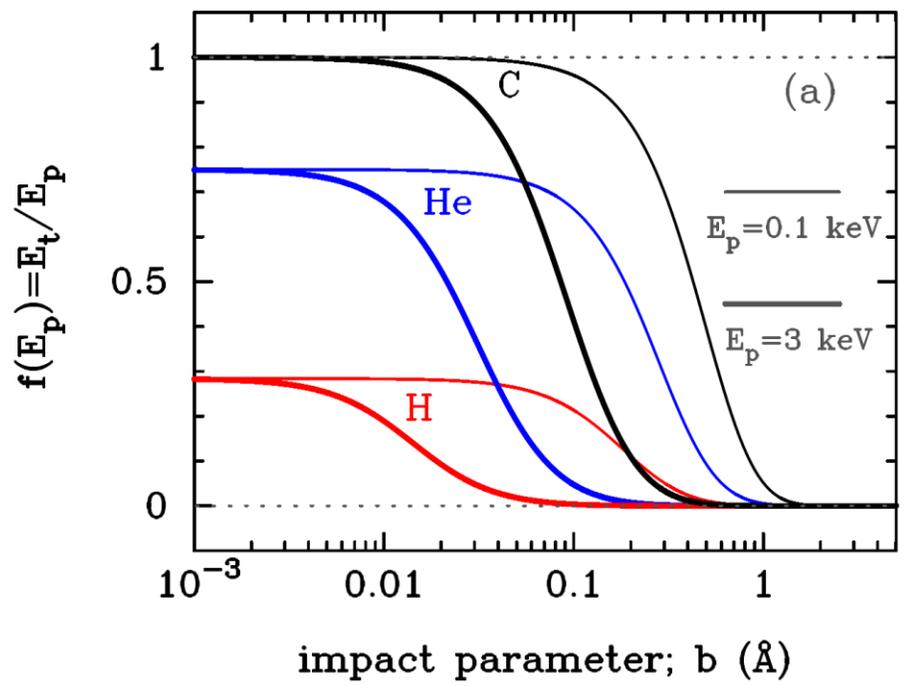
スパッタリングイールド



- 入射粒子が軽いほど、また入射エネルギーが大きいほど到達深さは深くなる
→ 到達深さだけで、入射粒子・入射エネルギー依存性を説明できるか？

4-3. 衝突時のエネルギー輸送と散乱角

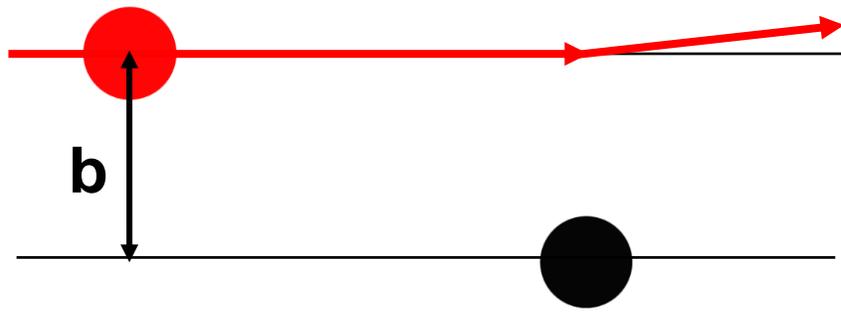
projectileがエネルギーを与える割合



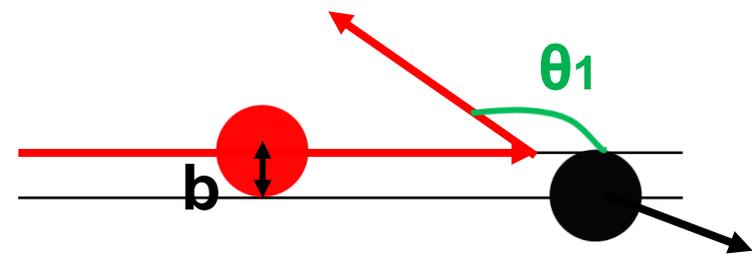
projectileの散乱角



○ b が大きいとき(ほぼ素通り)



○ b が小さいとき(相互作用)



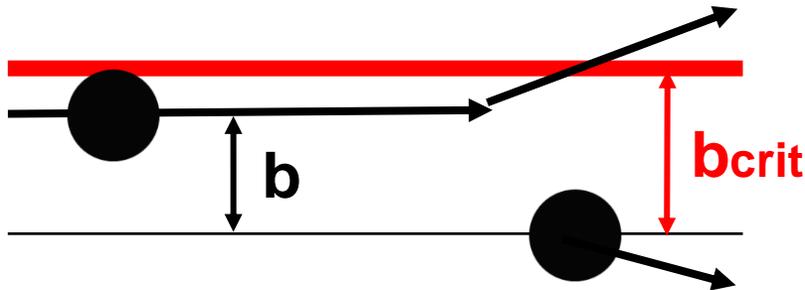
4-4. 結合エネルギーと臨界インパクトパラメータ

- 結合エネルギー (E_{bind}): 固体内で原子同士を結びつけているエネルギー
ターゲット炭素原子を動かすためには、結合エネルギーよりも大きいエネルギーを与える必要がある (炭素: $E_{\text{bind}} = 7.37 \text{ eV}$)

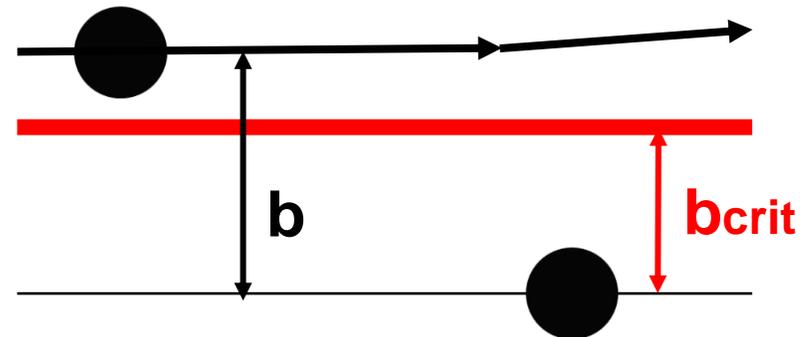
○ 臨界インパクトパラメータ (b_{crit})

- ターゲット原子に与えるエネルギーが結合エネルギーと等しくなるときの b

b が b_{crit} より小さいとき
→ 相手原子を動かすことができる



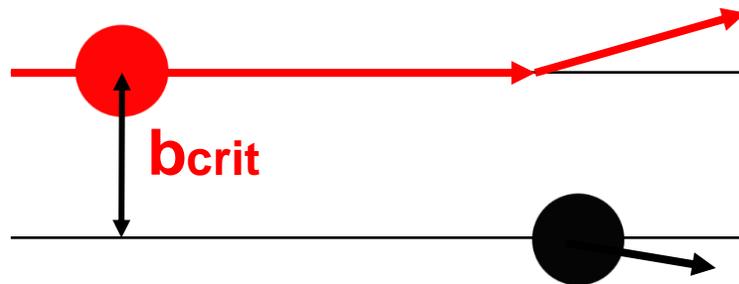
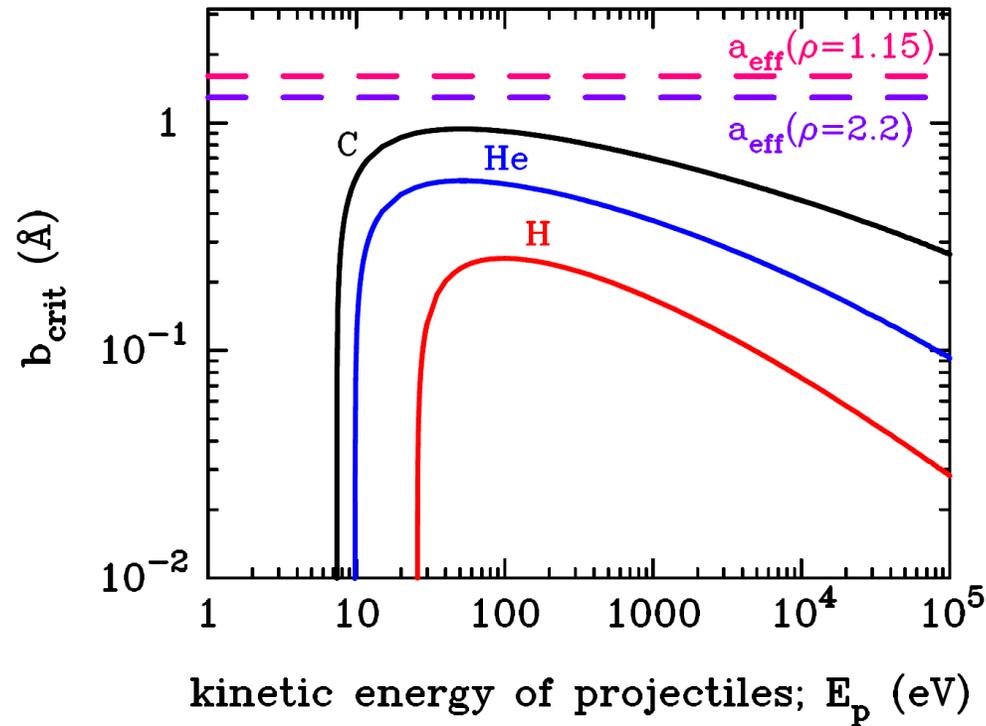
b が b_{crit} より大きいとき
→ 相手原子を動かすことができない



この場合、 $E < E_{\text{bind}}$ のエネルギーをロスする

4-5. 臨界インパクトパラメータ

プロジェクトイルのエネルギーに対する b_{crit}



○ b_{crit} (衝突断面積)は

- プロジェクトイルのエネルギーが大きいほど小さい
- プロジェクトイルの質量が小さいほど小さい

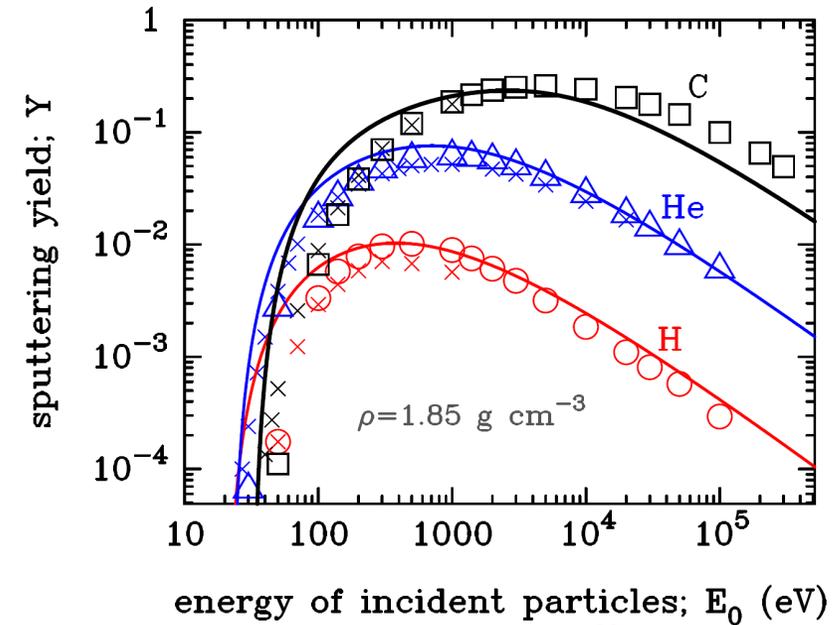
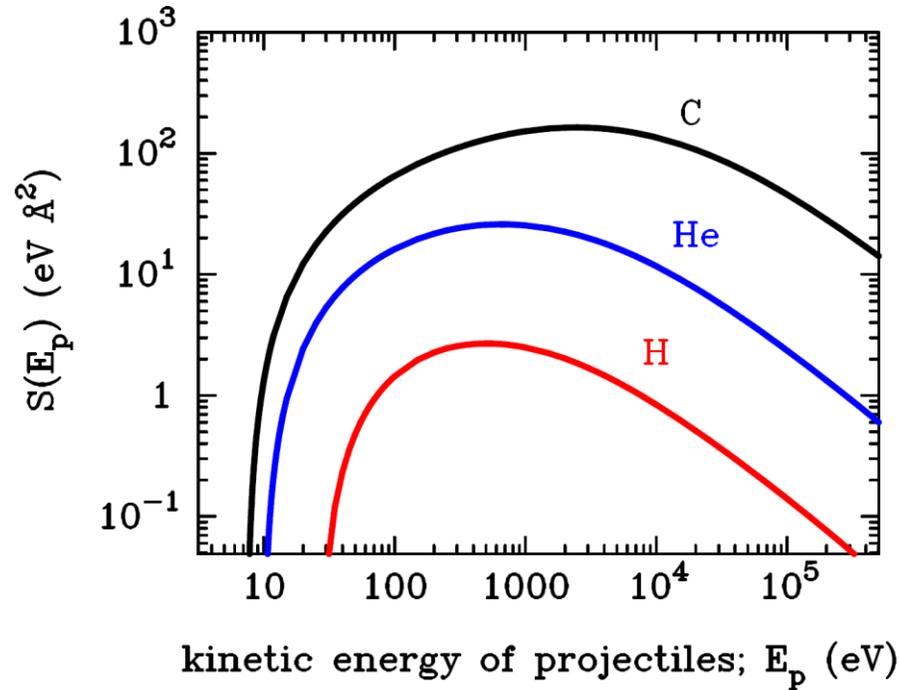
ここで、一回の衝突でターゲット原子を動かすのに必要なエネルギーを断面積で重みをかけたもの(期待値)を定義する

$$S(E_p) = \int_0^{b_{crit}} \epsilon(E_p) 2\pi db$$

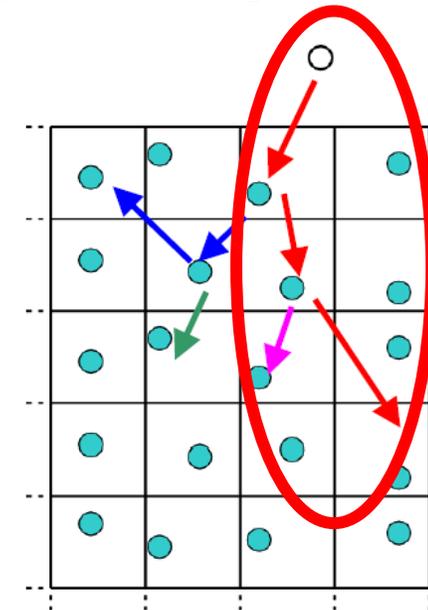
$$\epsilon(E_p) = \max[(E_t - E_{bind}), 0]$$

$$E_t = f_i E_p$$

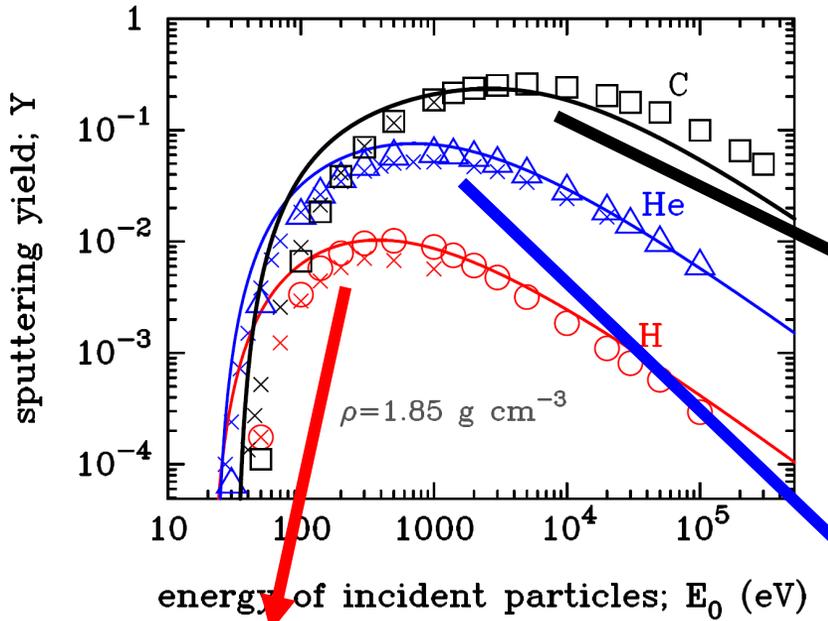
4-6. イールドの入射粒子・入射エネルギー依存性



スパッタリングイールドの入射粒子種
および入射粒子のエネルギー依存性は、
「衝突時に輸送するエネルギー」と「その
衝突断面積」の積の期待値(積分値)に
よって大まかに説明できる

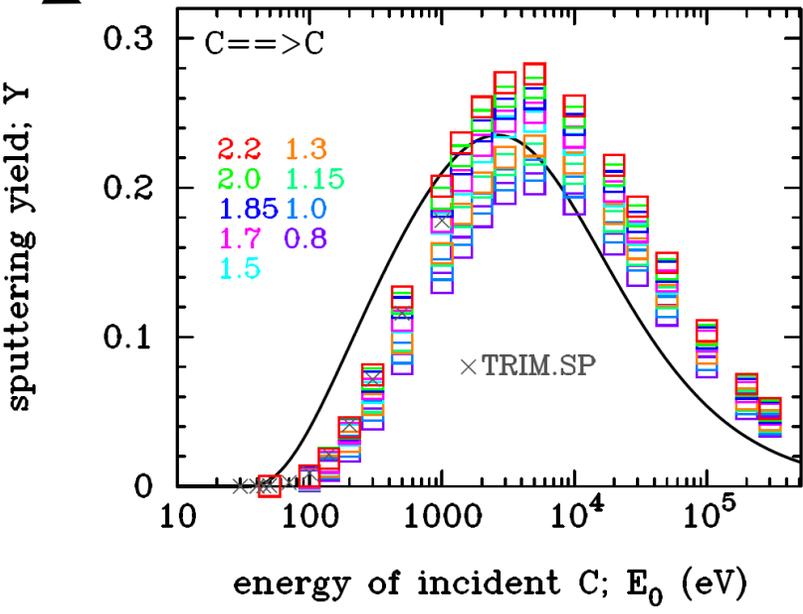
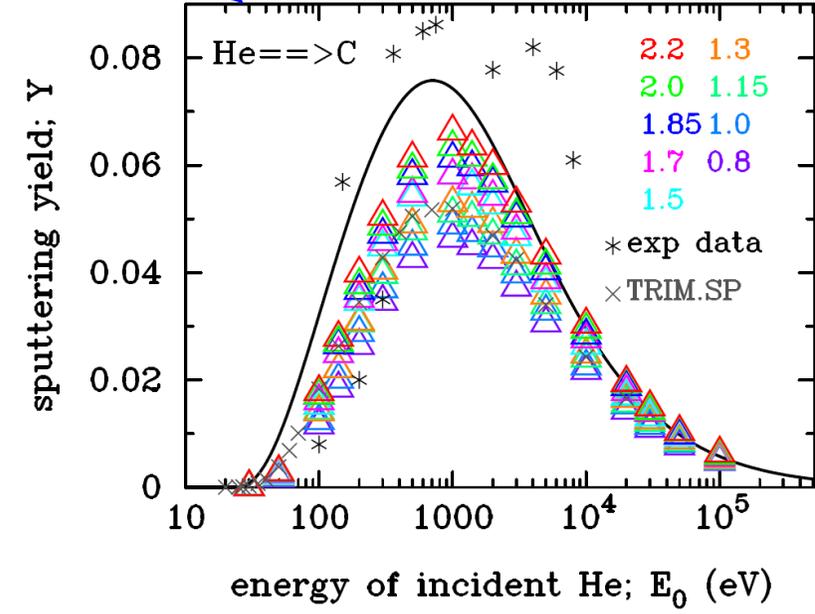
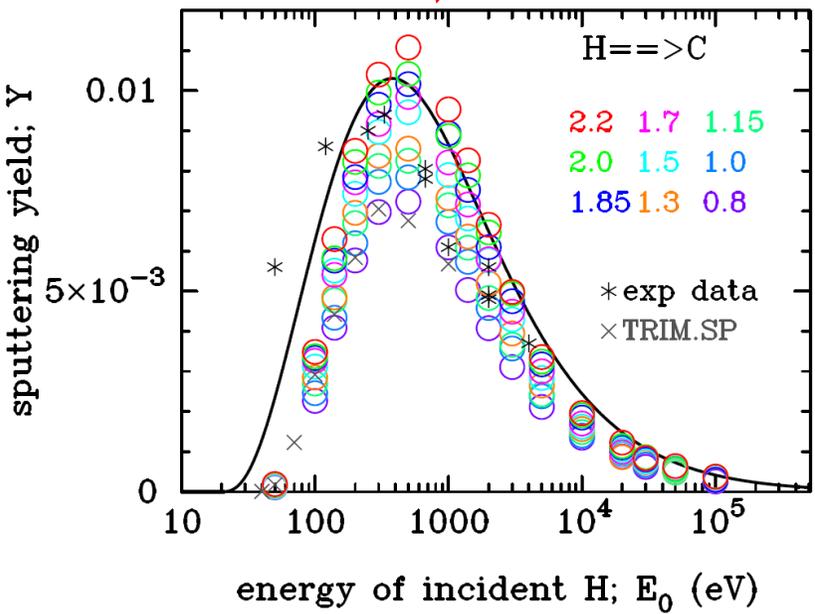


5-1. スパッタリングの物質密度依存性(1)



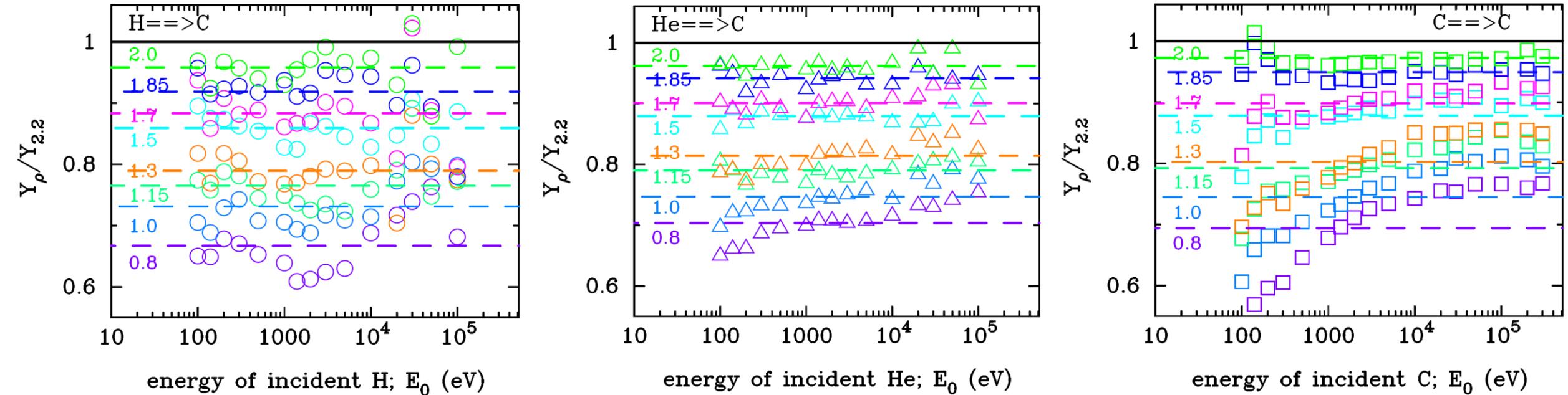
- 物質密度が低くなるほどスパッタリングイールドは減少する

- リニアスケールで表示すると、理論公式と計算値は結構ずれている



5-2. スパッタリングの物質密度依存性(2)

各物質密度で計算したスパッタリングイールドを $\rho=2.2 \text{ g/cm}^3$ のスパッタリングイールドで規格化したもの



- 物質密度が低くなるほどスパッタリングイールドは減少する
- どの入射粒子に対しても物質密度が半分くらいになると20-30%減少する

5-3. なぜ物質密度に依存するのか？(1)

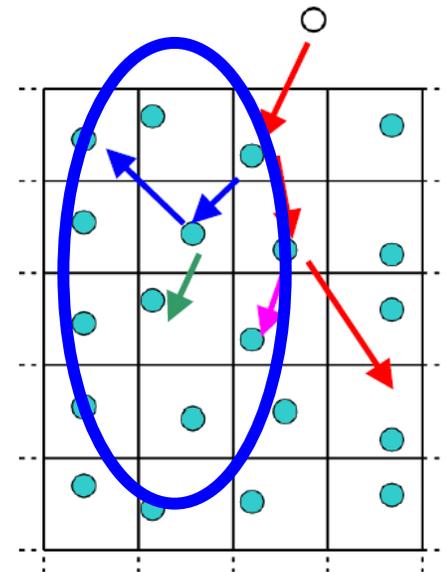
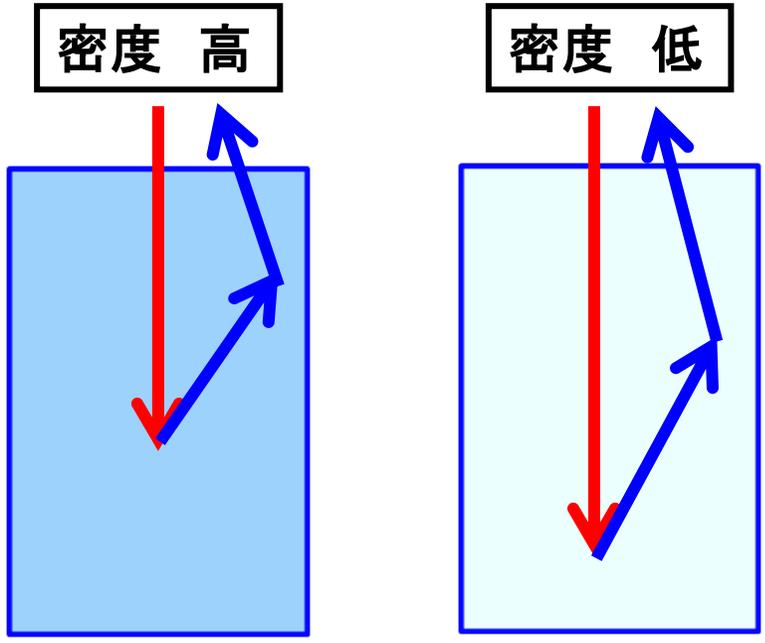
○ 物質密度が低いほど

- 入射イオンはより深い位置まで到達
- 固体内の原子も表面から放出しやすい



スパッタリングイールドは物質密度に依存しないのでは？

そもそも物質密度依存性は、入射粒子に依存しないので、固体内の炭素同士の衝突(カスケード)過程が重要だと思われる



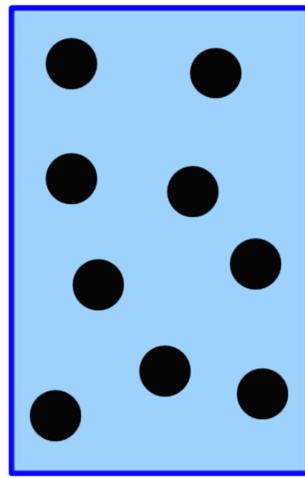
5-4. なぜ物質密度に依存するのか？(2)

物質密度の違い = 原子の個数の違い
→ 原子1つの実効的な断面積(半径)が異なる

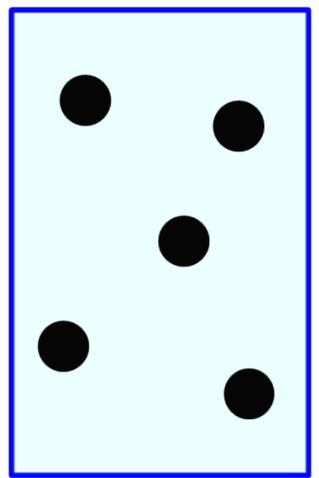
○ 原子の実効半径

$$a_{eff} = \left(\frac{3w_c m_u}{4\pi\rho} \right)^{\frac{1}{3}}$$

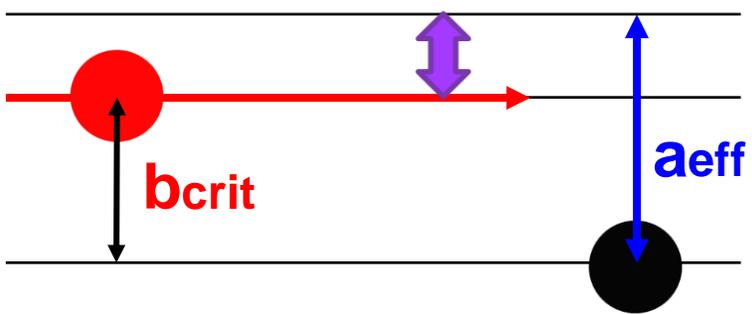
密度 高



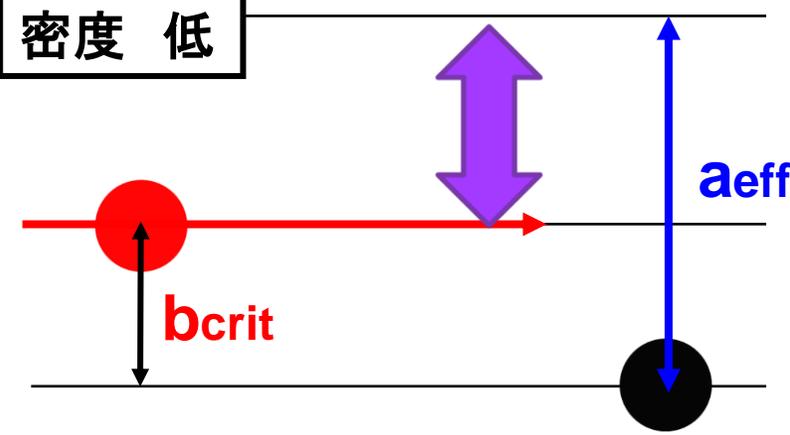
密度 低



密度 高



密度 低

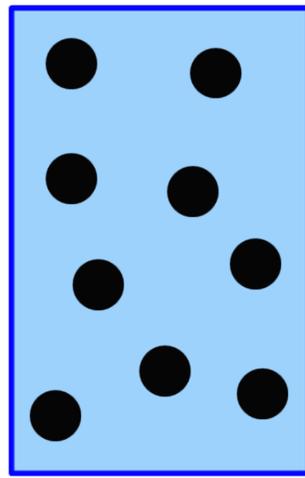


密度が低い方が、かすめ衝突が起こりやすいため、エネルギーをロスしやすい

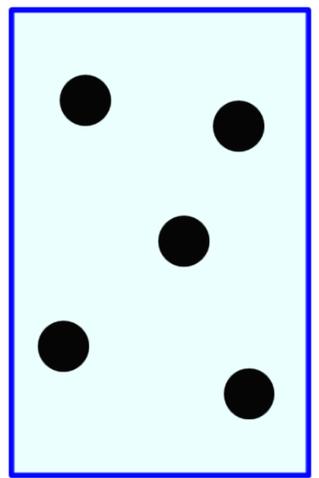
5-5. インパクトパラメータのcutoffを導入した計算(1)

○ カットオフインパクトパラメータ(b_{cutoff})の導入
→ b_{cutoff} より大きいインパクトパラメータでは
プロジェクトイルとターゲット原子は一切相互
作用しない

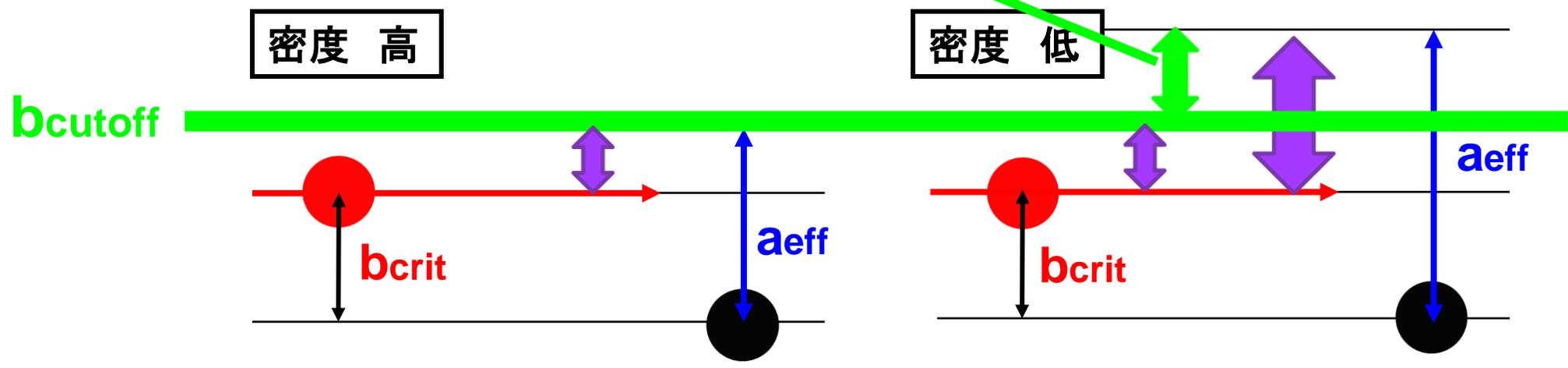
密度 高



密度 低

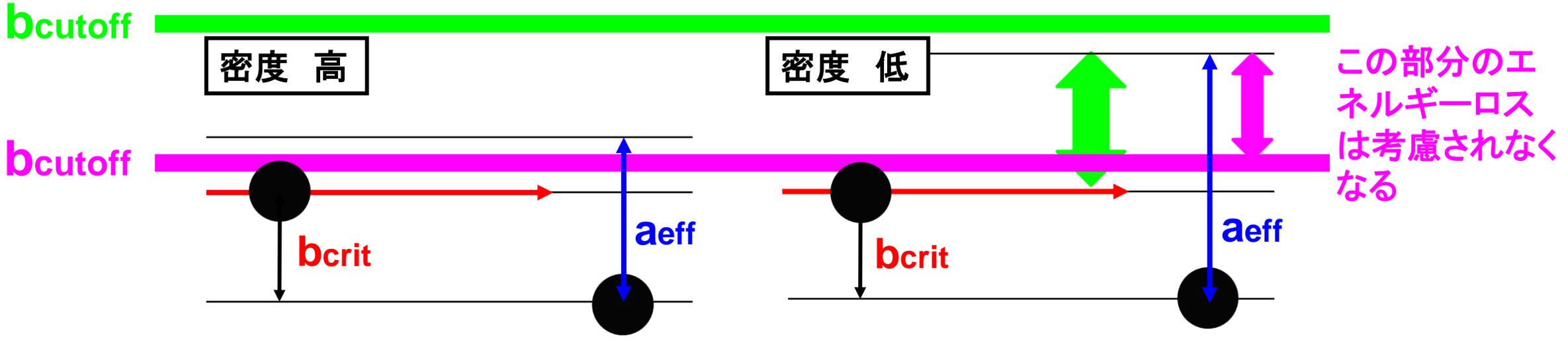
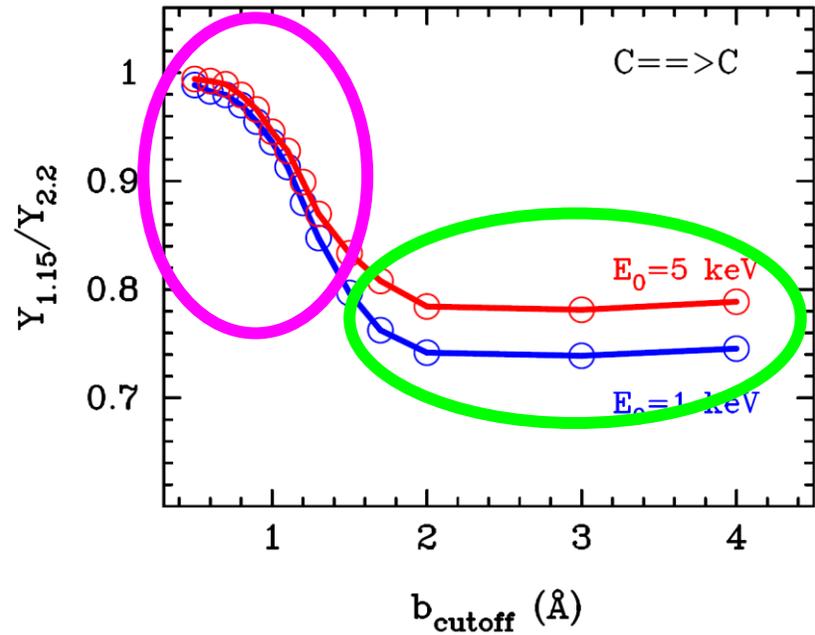
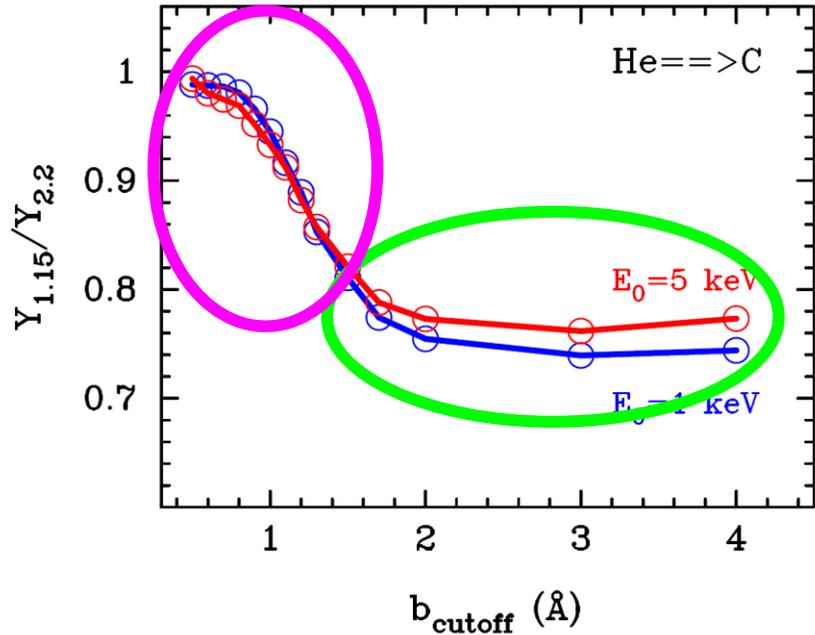
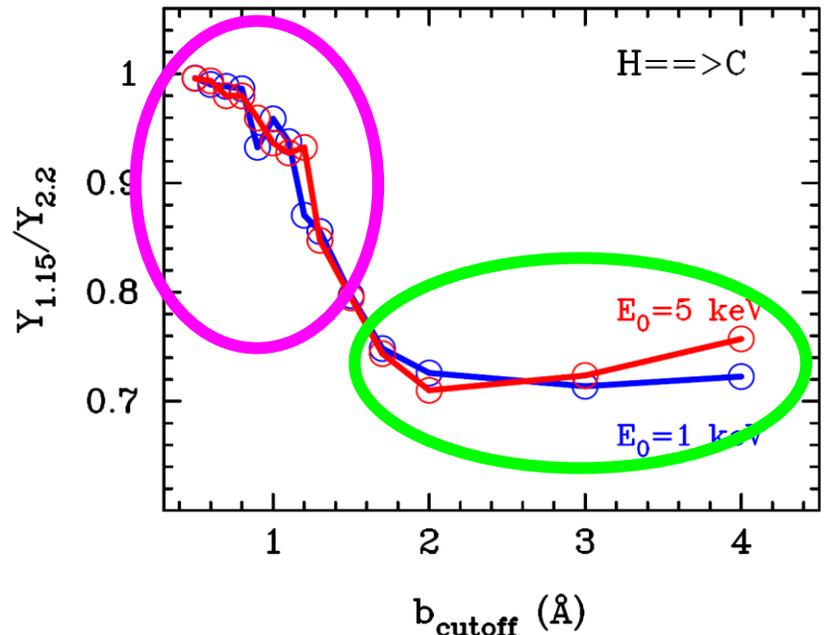


$b > b_{cutoff}$ ときは、相互作用(エネルギーロ
ス)をしないとして計算



密度が低い方が、かすめ衝突が起こりやすいため、エネルギーをロスしやすい

5-6. インパクトパラメータのcutoffを導入した計算(2)

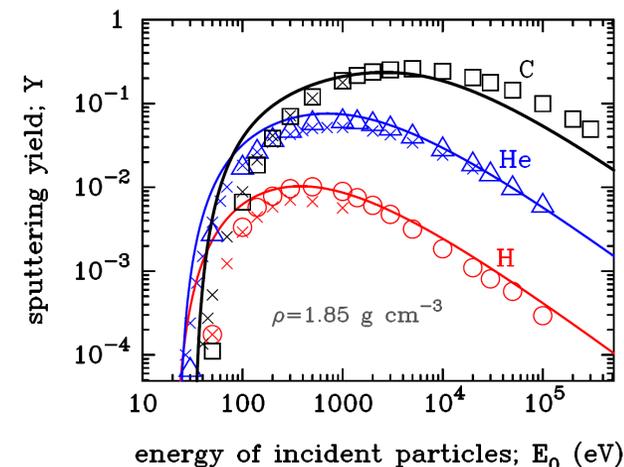


本発表のまとめ

3次元シミュレーションによって、非晶質炭素物質のスputタリングへの
①入射粒子・入射エネルギー、②ターゲット物質密度依存性を調べた

① スパッタリングの入射粒子種・エネルギー依存性

- 入射粒子が重いほどスパッタリングイールドは大きくなる
 - ある入射エネルギーでスパッタリングイールドは最大となる
- ターゲット原子を動かすのに必要なエネルギーを
断面積で重みをかけたものによって理解できる



② スパッタリングの物質密度依存性

- 物質密度が半分程度になるとイールドは20-30%ほど減少
- 密度が低いとかすめ衝突が起こりやすく、そのときの
わずかなエネルギーロス(の積算)が増える

