

## 三重同時計測による配向水素分子の(e,2e)散乱ダイナミクス(III)

(東北大多元研) 渋谷昌弘、浅野佑策、渡辺昇、高橋正彦

**【序】** binary (e,2e)分光は、電子線コンプトン散乱条件下での電子・分子衝突ダイナミクスを研究する実験手法である。しかし、従来手法では、標的のランダムな空間配向により測定結果は空間平均されたものになってしまい、電子・分子衝突の微視的な立体ダイナミクスの情報の多くが失われてしまうという実験的困難があった。そこで我々は、生成分子イオンの axial recoil 解離を利用した配向分子の binary (e,2e)分光を開発し、(e,2e)散乱断面積の分子座標系での測定を世界に先駆けて実現した[1]。(e,2e+M)分光と名付けた本手法による実験の一環として、最近、入射電子エネルギー $E_0=2.0$  keV という高い入射電子エネルギーで実験を行い、先の $E_0=1.2$  keV における実験[2]との比較から、電子・ $H_2$ 分子衝突立体ダイナミクスの入射電子エネルギー依存性について調べ、昨年分子構造討論会で報告した[3]。本研究では、衝突立体ダイナミクスのより詳細な理解のため、two-step メカニズムの寄与を取り込んだ二次の Born 近似 (SBA) 計算を行い、実験との比較を試みた。

**【(e,2e+M)分光の原理】** 図1は、(e,2e+M)分光の概念図である。大きなエネルギー損失と大きな運動量移行を伴う高速電子衝撃イオン化で生成する非弾性散乱電子、電離電子、解離イオンの3つの荷電粒子のベクトル(エネルギーと散乱方向)相関を測定する。

実験では、散乱角 $\theta_1 = \theta_2 = 45^\circ$ 方向に飛び出した非弾性散乱電子と電離電子を画像観測同時計測法により検出する。一方、解離イオンは入射電子ビーム軸と垂直方向で散乱点を含む面内に配置した7つの飛行時間型検出器を用いて検出する。以上により、既知である入射電子のエネルギー $E_0$ と運動量 $p_0$ および散乱前後のエネルギー保存則と運動量保存則を利用して、イオン化エネルギー $E_{\text{bind}}$ と生成イオンがもつ反跳運動量 $q$ の二つの物理量をパラメータとする三重微分断面積を分子軸からの角度 $\theta_{\text{DMD}}$ の関数として得る。実験および装置の詳細は、文献[1]を参照されたい。

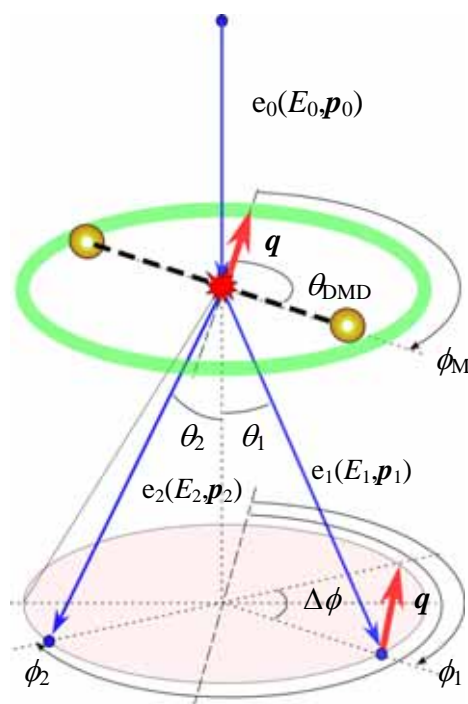


図1：実験配置

**【二次の Born 近似計算】** 二次の Born 近似では、電子衝撃イオン化過程の三重微分断面積の散乱振幅は Born 近似の一次項 $f_{B1}(p_0, p_1, p_2)$ と二次項 $f_{B2}(p_0, p_1, p_2)$ の和で与えられ、それぞれ下式(1)、(2)で表される。

$$f_{B1}(p_0, p_1, p_2) = \frac{2}{K^2} \langle \Phi_f^{(-)}(p_2) | -2 + \sum_{j=1}^2 \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) | \Phi_i \rangle \quad (1)$$

$$f_{B2}(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = -\frac{2}{\pi^2} \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_v \int d\mathbf{p}_a \frac{\langle \Phi_f^{(-)}(\mathbf{p}_2) | -2 + \sum_{j=1}^2 \exp(i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{r}_j) \Phi_v \rangle \langle \Phi_v | -2 + \sum_{j=1}^2 \exp(i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_j) \Phi_i \rangle}{[p_a^2 - \{p_0^2 - 2(E_v - E_i)\} - i\eta] K_i^2 K_f^2} \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{r}_j$  ( $j=1,2$ )は標的電子の位置座標、 $\mathbf{K}$  ( $=\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1$ )、 $\mathbf{K}_i$  ( $=\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_a$ )、 $\mathbf{K}_f$  ( $=\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_1$ )は移行運動量である。 $\Phi_i$  と  $\Phi_v$  はエネルギー  $E_i$  と  $E_v$  をもつ標的中性始状態と中間状態、 $\Phi_f^{(-)}$  は標的イオン終状態を表す。

SBA 計算には実験条件に即した幾つかの近似を導入し、標的 CI 波動関数を用いて理論的な三重微分散乱断面積を得た。詳細は、文献[4]を参照されたい。

**【結果と考察】** 図2は、 $E_0=2.0$  keV の条件下で得られた、水素分子のイオン励起状態への遷移に対する (e,2e+M) 断面積の総和を  $\theta_{\text{DMD}}$  の関数として、分子軸を紙面上下方向とした極座標表示でプロットした結果である。図には、一次の Born 近似に基づく平面波撃力近似(PWIA)計算、および SBA 計算の結果も併せて示している。ここでは、一次の Born 近似に基づく平面波撃力近似(PWIA)ではその衝突ダイナミクスを定性的にすら理解できない励起イオン化過程があり、その理解には Born 近似の二次項の一つである two-step メカニズムが鍵を握ることを見出した、 $\text{H}_2$  分子に対する我々の実験的知見[1,2,5,6]に基づき、実験結果の断面積の和が SBA 計算のそれと等しくなるように規格化している。

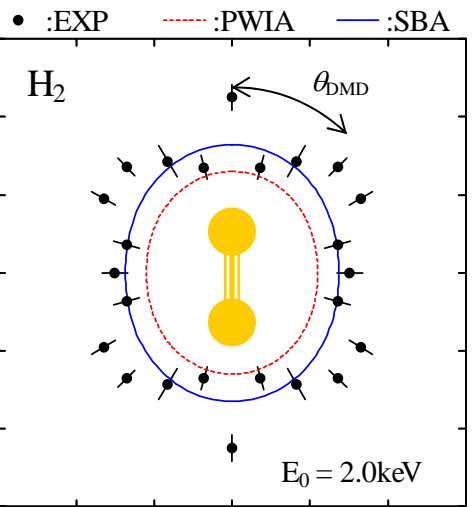


図2： $\text{H}_2$  の(e,2e+M)散乱断面積

図から、分子軸方向 ( $\theta_{\text{DMD}} = 0^\circ$ ) の実験的断面積は垂直方向 ( $\theta_{\text{DMD}} = 90^\circ$ ) のそれよりも大きいことが瞬時に分かる。こうした衝突ダイナミクスの立体的効果を明確に表す実験的角度分布の形を PWIA 計算および SBA 計算の双方は定性的に再現する。しかしながら、実験は、PWIA 計算や SBA 計算が予測しない微細構造を角度分布に見せる。すなわち、理論が分子軸方向にスムーズに伸びた楕円形の角度分布を示すのに対し、実験は  $\theta_{\text{DMD}} = 0^\circ$  と  $45^\circ \sim 60^\circ$  方向に比較的大きな強度を持つ形状をもつ。こうした実験と理論との差異の原因について、現在、検討を進めている。

講演では、イオン終状態毎に分離した(e,2e+M)断面積の実験と理論との比較を行い、電子・ $\text{H}_2$  分子の衝突立体ダイナミクスを議論する。

### 【参考文献】

- [1] M. Takahashi *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **141**, 83 (2004).
- [2] M. Takahashi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 213202 (2005).
- [3] 渋谷昌弘ら、分子構造総合討論会2006 (静岡) 2P127.
- [4] N. Watanabe *et al.*, Phys. Rev. A **75**, 052701 (2007).
- [5] M. Takahashi *et al.*, Phys. Rev. A **68**, 042710 (2003).
- [6] 浅野ら、分子科学討論会2007 (仙台) 4C01.