

プロジェクション法によるCO₂分子の内殻光電子角度分布の研究

(東北大・多元研¹, 産総研・計測標準², 姫工大・理³, CIRIL/CER/CNRS⁵,
フランクフルト大⁶, カリフォルニア工科大⁷, JASRI⁸)

寺西 孝説¹, 福澤 宏宣¹, Liu XiaoJing¹, 齋藤 則生², 森下 雄一郎²,
鈴木 功², 窪塚 憲一郎³, 町田 雅武³, 小谷野 猪之助³, 吉田 啓晃⁴,
Cassimi Amine⁵, Czasch Achim⁶, Schmidt Lothar⁶, Dörner Reinhard⁶,
Wang Kwanghsi⁷, Zimmermann Bjorn⁷, McKoy Vincent⁷,
De Fanis Alberto^{1,8}, Prümper Georg¹, 高橋 正彦¹, 上田 潔¹

分子座標系における光電子放出角度分布 (Molecular-Frame Photoelectron Angular Distribution, MFPAD) を測定することにより、分子の光イオン化ダイナミクスに関する詳細な情報を得ることが出来る。MFPADを測定する我々の装置は、位置敏感検出器を備えた二台の飛行時間型運動量分光計により、全立体角に放出される電子とイオンを検出するものである^[1,2]。分子軸の向きはaxial recoil 近似により決定される。ところが、これまでの解析法では、入射光の電気ベクトルと分子軸の張る平面上に電子が放出されるイベントのみを選択していたため、大部分のイベントは利用されていなかった。

最近我々は、全イベントを用いて解析する“プロジェクション法”を開発した^[3,4]。双極子近似の下で、MFPADは下式のように簡略化される。

$$I(\theta_e, \phi_e, \theta_n^{\text{lab}}) = F_{00}^{(m)}(\theta_e) + F_{20}^{(m)}(\theta_e) P_2^0(\cos \theta_n^{\text{lab}}) \\ + F_{21}^{(m)}(\theta_e) P_2^1(\cos \theta_n^{\text{lab}}) \cos \phi_e \\ + F_{22}^{(m)}(\theta_e) P_2^2(\cos \theta_n^{\text{lab}}) \cos 2\phi_e \\ F_{JN}^{(m)}(\theta_e) = \sum_J C_{J'JN}^{(m)} P_{J'}^N(\cos \theta_e)$$

ここで θ_e と ϕ_e は分子座標系での電子の放出方向、 θ_n^{lab} は入射光の電気ベクトルと分子軸のなす角を表す。全立体角に放出される電子とイオンを検出すれば、全イベントを用いて $F_{JN}^{(m)}(\theta_e)$ 関数を抽出することが出来る^[3]。

$$F_{JN}^{(m)}(\theta_e) = \frac{(2J+1)(J-N)!}{2\pi(1+\delta_{N,0})(J+N)!} \int_0^\pi \sin \theta_n^{\text{lab}} d\theta_n^{\text{lab}} \times \\ \int_0^{2\pi} d\phi_e I(\theta_e, \phi_e, \theta_n^{\text{lab}}) P_J^N(\cos \theta_n^{\text{lab}}) \cos(N\phi_e)$$

本研究では、この手法を用いて、以前に報告したCO₂分子のMFPADのデータ^[1,2]を再解析した。実験はSPring-8のBL27SUで行ったものである^[1,2]。O⁺とCO⁺の同時計測により分子軸を決定し、さらにこれらと光電子を同時計測することにより分子座標系における光電子放出角度を決定した。

図1の上部にC 1s光電子放出について、プロジェクション法により解析した実験結果を示す。C原子から放出される光電子が隣りのO原子によって散乱されない場合には、光電子放出方向は入射光電気ベクトルの向きと一致し、傾きが1の帯が見出せると予測される。しかし、図1からは多様な構造が見出され、光電子が分子内で散乱されていることがはっきりと分かる。また、励起エネルギー312 eV付近には形状共鳴

があることが良く知られている。しかし、312.2 eV の解析結果をみると、形状共鳴と思われるような特殊なパターンは見られない。これより、この付近のエネルギーでは電気ベクトルの向きの変化に対して MFPAD は敏感でないことが分かる。図 1 の下部には *ab initio* 計算による結果を示してある。計算結果は実験結果をよく再現している。

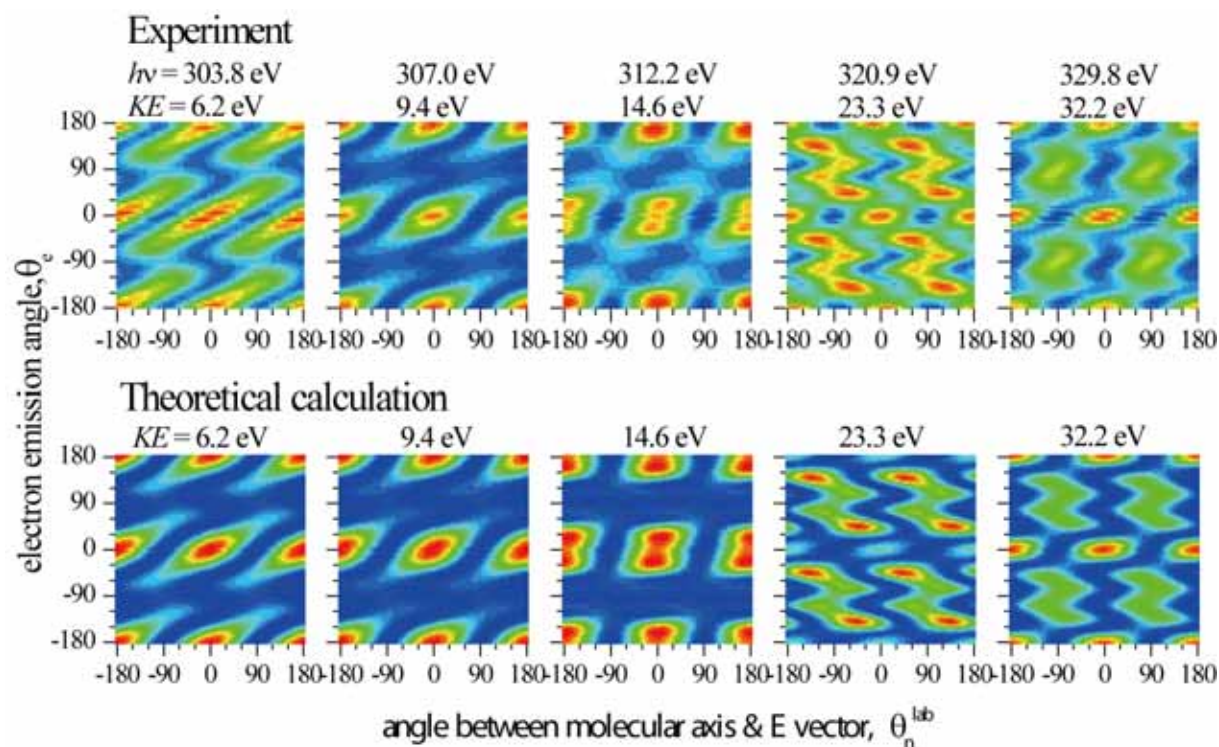


図 1. CO₂分子のC 1s 光電子放出のMFPAD。CO₂分子のC 1sイオン化ポテンシャルは 297.63 eV^[5]。入射光子エネルギーは 303.8 eV, 307.0 eV, 312.2 eV, 320.9 eV, 329.8 eVである。横軸は入射光の電気ベクトルと分子軸のなす角であり、O⁺の反跳方向を 0°, CO⁺の反跳方向を 180°と定義している。縦軸は光電子放出方向と分子軸のなす角である。なお、光電子放出方向は、入射光の電気ベクトルと分子軸の張る平面上である。

参考文献

- [1] N. Saito *et al.*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **36**, L25 (2003).
- [2] N. Saito *et al.*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **38**, L277 (2005).
- [3] R. R. Lucchese *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **155**, 95 (2007).
- [4] A. N. Grum-Grzhimailo *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **155**, 100 (2007).
- [5] K. C. Prince *et al.*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **32**, 2551 (1999).