

4P064

## 電子運動量分光を用いた Ne の価電子イオン化：電子相関と歪曲波効果

(東北大・多元研) 渡辺 昇, ○高橋 正彦

**【序】** 電子線コンプトン散乱の動力的完全実験である電子運動量分光 (Electron Momentum Spectroscopy: EMS) は、標的原子・分子の電子状態を研究する上で強力な実験手法である。本分光によれば、電離電子がイオン化以前に属していた軌道の運動量空間波動関数の二乗、即ち軌道毎の電子運動量分布を直接的に観測することができる。こうしたEMS研究においては、従来、標的始状態における電子相関の影響が無視できるほど小さいと仮定する、いわゆる標的Hartree-Fock (HF) 近似が広く用いられてきた。近年、画像観測型EMS装置の開発[1,2]により測定精度の格段の向上に成功し、標的HF近似において考慮されない電子相関の影響を定量的に観測することが可能になってきた。そこで我々は、本分光を原子・分子における電子相関の研究に適用することを目指し、まずはその基盤となる知識を得ることを目的とした。特に本研究では、実験結果を定量的に解釈する上で必要となる、電子衝突ダイナミクスに起因した歪曲波効果についての正確な知見を得ることを試みた。この目的のため、単純系であるNe原子を対象とし、2pおよび2s価電子イオン化に対するEMS断面積を高精度で測定した。得られた実験結果を異なる近似レベルで計算した理論的なEMS断面積と比較することで、歪曲波効果と電子相関の影響について調べたので報告する。

**【実験】** EMS 実験では高速電子衝撃イオン化で生成する非弾性散乱電子と電離電子のエネルギー  $E_1$ ,  $E_2$  と運動量  $\mathbf{p}_1$ ,  $\mathbf{p}_2$  を同時計測法により測定する。既知の入射電子のエネルギー  $E_0$  と運動量  $\mathbf{p}_0$  を用いて、散乱前後のエネルギー保存則と運動量保存則からイオン化エネルギー  $E_{\text{bind}}$  と生成イオンの反跳運動量  $\mathbf{q}$  を同時に決定できる。

$$E_{\text{bind}}=E_0-E_1-E_2, \quad \mathbf{q}=\mathbf{p}_0-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2 \quad (1)$$

実験は我々が開発した画像観測型 EMS 装置[2]を用い、 $E_0=1.2, 2.0$  および  $4.0$  keV で行った。

**【理論計算】** 歪曲波ボルン近似 (DWBA) によれば、EMS 断面積は以下の式で与えられる。

$$\sigma_{\text{DWBA}}=(2\pi)^4 \frac{p_1 p_2}{p_0} S_f \left| \left\langle \chi_{p_1}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \chi_{p_2}^{(-)}(\mathbf{r}_2) \middle| V_{12} \middle| \varphi_f(\mathbf{r}_1) \chi_{p_0}^{(+)}(\mathbf{r}_2) \right\rangle \right|^2 \quad (2)$$

$\chi_{p_0}^{(+)}$  と  $\chi_{p_1}^{(-)}$ ,  $\chi_{p_2}^{(-)}$  はそれぞれ入射電子と放出二電子を表す歪曲波であり、 $V_{12}$  は電子間ポテンシャルである。また、 $\varphi_f(\mathbf{r})$  は、中性始状態 ( $N$  電子) とイオン終状態 ( $N-1$  電子) の波動関数の重なりを用いて表される規格化された Dyson 軌道である。

$$\varphi_f(\mathbf{r})=S_f^{-1/2} \left\langle \Psi_f^{N-1} \middle| \Psi_i^N \right\rangle \quad (3)$$

なお、spectroscopic factor と呼ばれる定数  $S_f$  は Dyson 軌道の規格化因子  $S_f^{-1/2}$  により定義される。ここで、 $\Psi_i^N$  を HF 波動関数で置き換える標的 HF 近似を適用した場合、Dyson 軌道は近似的に一電子 HF 軌道で与えられる ( $\varphi_f(\mathbf{r}) \sim \phi_{\text{HF}}(\mathbf{r})$ )。

特に入射電子および放出二電子のエネルギーが十分に大きく、標的原子のポテンシャルの影響が無視できる場合、(2)式中の歪曲波を平面波で置き換えることができる。この条件下において撃力近似を適用する平面波撃力近似 (PWIA) によれば、EMS 断面積は Dyson 軌道のフーリエ変換、即ち運動量空間 Dyson 軌道  $\varphi_f(\mathbf{q})$  の二乗に比例する ( $\sigma_{\text{PWIA}} \propto S_f |\varphi_f(\mathbf{q})|^2$ )。

本研究では、DWBA および PWIA に基づく理論計算を行った。このとき、HF 軌道、および配置換相互作用 (CI) 波動関数から導出した Dyson 軌道を計算に用いた。なお、理論的波動関数の計算には、f および g 関数を取り除いた d-aug-cc-pVQZ 基底を使用した。

**【結果と考察】** 図 1(a)に  $E_0=1.2$  keV で測定した Ne 2p 電子イオン化に対する EMS 断面積の  $q$  依存

性、即ち運動量分布を示す。比較のため、CI 波動関数による Dyson 軌道を用いた DWBA 計算 (DWBA-CI) と PWIA 計算 (PWIA-CI) の結果、および HF 軌道を用いた DWBA 計算 (DWBA-HF) の結果を併せて示している。ここでは運動量分布の形状について比較するため、実験および理論的な運動量分布の面積が互いに等しくなるようにスケール倍している。図から、電子相関と歪曲波の効果をどちらも取り入れていない PWIA-HF は、実験値に比べ強度分布が高運動量側にシフトしていることが見て取れる。運動量分布に現れる電子相関の影響と歪曲波効果について詳細に議論するため、PWIA-HF からの差を図 1(b) にプロットした。DWBA-HF の結果を見ると、歪曲波効果を取り込んだことで理論値は大幅に改善されるが、依然として実験との間に有意な差が残っている。さらに DWBA-CI を用いて電子相関の影響を取り入れると、低運動量領域における運動量分布の強度が増大し、実験を完全に再現するようになる。電子相関による低運動量成分の増加は、Dyson 軌道が HF 軌道に比べ、位置空間においてより広がっていることを強く示唆している。また、DWBA-HF と DWBA-CI の比較から、 $E_0=1.2$  keV において、2p 運動量分布に現れる電子相関の影響と歪曲波効果は同程度であることがわかった。この結果は、EMS 実験を用いて標的の電子相関を定量的に調べる場合、歪曲波効果を考慮する必要があることを意味している。

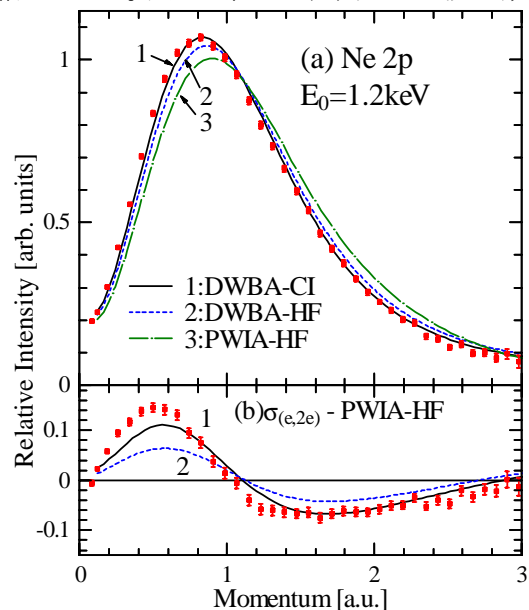


図 1 : 2p 電子イオン化の運動量分布

図 2 に Ne 2s 軌道の運動量分布を示す。なお、本実験では 2p 電子と 2s 電子のイオン化遷移間における相対強度は保たれている。そこで、2p 軌道の運動量分布を規格化する際に用いたスケール因子を 2s 軌道に対しても適用した。PWIA-HF は 2p 電子イオン化に対する 2s 電子イオン化の相対強度を大幅に大きく見積もっており、実験と強度の一致を得るためには、計算結果を 0.7 倍する必要がある。また、運動量分布の形状に着目すると、 $q>1.5$  a.u. で PWIA-HF は運動量の増加に伴い実験値に比べ強度が急激に減少してゆき、ゼロに近づいていっている。こうした実験との相違を、DWBA-HF

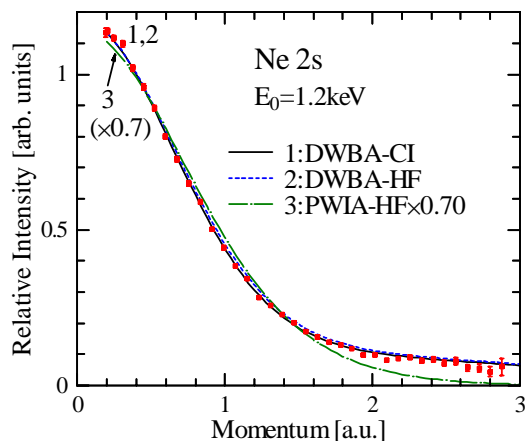


図 2 : 2s 電子イオン化の運動量分布

は完全に解消しており、2s 電子イオン化において歪曲波効果の影響が非常に大きいことがわかった。Ne 2s 電子は、束縛エネルギーが 48.5 eV と大きく、原子核に比較的近い領域に束縛されているため、標的原子ポテンシャルの影響により歪曲波効果が強く現れたと考え、本結果を理解することができる。なお、DWBA-CI は DWBA-HF と良く一致しており、2p 電子イオン化の場合とは異なり、2s 電子イオン化の運動量分布における電子相関の影響は無視できるほど小さい。

講演では  $E_0=2.0$  および 4.0 keV での結果も併せて示し、Ne 価電子イオン化における運動量分布に現れる歪曲波効果と電子相関の影響について詳細に議論する。

#### 【参考文献】

- [1] M. Takahashi *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **73**, 2242 (2002).
- [2] M. Takahashi *et al.*, J. Electron. Spectrosc. Relat. Phen. **141**, 83 (2004).