

## 配向分子 - 電子衝突実験手法の確立

### —空間電荷効果を考慮した電子モノクロメーターの開発—

(東工大院理工)

○奥村拓馬、森湧真、北島昌史、穂坂綱一、河内宣之

### A new experimental method for molecular-frame electron collision —Development of a new electron monochromator considering the space charge effect—

( Dept. of Chem. Tokyo Tech. )

○T. Okumura, Y. Mori, M. Kitajima, K. Hosaka, and N. Kouchi

**【序論】** 電子と分子の衝突は最も基本的な衝突過程であり、量子力学創成期から衝突問題の代表的モデルとして長く研究され、また幅広い分野において重要な知見を与えてきた[1]。例えば、高層大気中でのエネルギー緩和過程や化学反応、また、生体分子に対する放射線作用はいずれも電子-原子・分子衝突が中心的な役割を果たしている。さらに、入射電子が一時的に標的分子に束縛されることで生じる負イオン共鳴状態は一般に多様な崩壊チャンネルを有し、反応性が高く化学反応の中間体として重要である。ところで、これまでの電子-分子衝突実験では分子の回転運動のため分子配向を区別できず、それについて平均化した情報のみを得ていた。我々は、平均化により失われた情報を明らかにするため、電子衝突による分子の解離性イオン化過程と axial-recoil 近似[2]を利用して、分子配向まで規定した電子衝突実験(配向分子-電子衝突実験)を実現することを目指し、新たな実験装置を開発している。

我々が目指す配向分子-電子衝突実験手法では、電子衝突による分子の解離性イオン化過程で生成する散乱電子、放出電子及びフラグメントイオンの3粒子を同時計数する。ここで得られる断面積は高次の微分断面積となるため、その値は小さく、測定時間の増大により実験は困難となる。本実験では、測定時間を短縮するため、大強度かつ高エネルギー分解能の入射電子ビームが生成できる電子モノクロメーターが必要不可欠となる。我々は従来にない大強度と高いエネルギー分解能を両立する電子モノクロメーターの開発を目指して、種々の電子軌道シミュレーションを行ってきた。本研究では、電子軌道シミュレーションの結果、従来考慮されてこなかった空間電荷効果がモノクロメーターの性能に大きな影響を与えることが分かったので、それを報告する。空間電荷効果とは電子ビーム中の電子が互いに反発することに起因する効果であるが、電子ビーム強度の微小な固体表面用の電子分光装置において、その効果を研究した例が知られている[3]。一方、その計算コストの高さから、大きな電子ビーム強度が要求される気相標的に対する電子衝突実験用の装置に対して、その影響が研究された例はほとんどない。本研究では、本研究室で稼働中の静電半球型電子エネルギー選別器を用いた電子モノクロメーターをモデルとして、空間電荷効果がモノクロメーターに与える影響を調べた。

**【評価方法】** 空間電荷の影響を直接実験的に評価するのは困難であり、コンピュータによる電子軌道シミュレーションの利用が不可欠である。本研究では、稼働中の静電半球型電子モノクロメーターをモデルとして空間電荷効果まで含めた電子軌道シミュレーションを行った。静電半球型電子エネルギー選別器のジオメトリを図1に示す。まず、モノクロメーターの動作条件を計算の初期条件として、

計算で求めた透過電子ビームの電流値やエネルギー分解能を実際の実験結果と比較し、計算結果が現実の系を再現することを確認した。この計算結果を利用して、実験では評価不可能な電子ビームの収束性やエネルギー分散作用に対する空間電荷効果の影響を、選別器への入射電流値 $I_{in}$ 、透過エネルギー $E_0$ の関数として調べた。

**【結果】**図2に静電半球型電子エネルギー選別器出射面における電子ビームの電流密度分布を示す。図2から以下の2点に分かる。

①収束性について：空間電荷効果により電子ビームの収束性が変化する。

空間電荷効果を無視した図2(a)では電子ビームが収束しているのに対し、空間電荷効果を考慮した図2(b)ではビームが広がっている。従来、静電半球型は偏向角 $\theta = 180^\circ$ でビームが収束するとされてきたが、空間電荷効果によりこれが破れることが分かった。また、本条件においては、偏向角を $180^\circ$ よりも大きくすると(図2(c), (d))、 $\theta = 200^\circ$ においてビームは収束する。すなわち、空間電荷効果はビームが収束するまでに要する距離を伸ばす。

②エネルギー分散作用について：図2(a), (b)を比べると、エネルギーによるビームの像の位置の変化は、空間電荷効果を考慮した場合の方が大きいことが分かる。すなわち、空間電荷効果によりエネルギー分散作用が増大する。

①、②の要素の競争により、選別器( $\theta = 180^\circ$ )を透過した電子ビームのエネルギー幅 $\Delta E_{FWHM}$ には最適値が存在する。様々な $E_0$ について、 $I_{in}$ に対する $\Delta E_{FWHM}$ の変化を図3に示す。空間電荷効果がなければ、 $\Delta E_{FWHM}$ は $I_{in}$ に依らない量であるが、空間電荷効果により $\Delta E_{FWHM}$ が $I_{in}$ に依存し、なおかつ極小が存在することが分かる。

設計の観点からは、空間電荷効果の存在下で如何に電子ビームを収束させるかが問題となる。電子ビームを収束させる手段として、本研究では静電円筒型電子モノクロメーターを用いる方法を模索した。当日は、静電円筒型電子モノクロメーターについての計算結果も報告する。

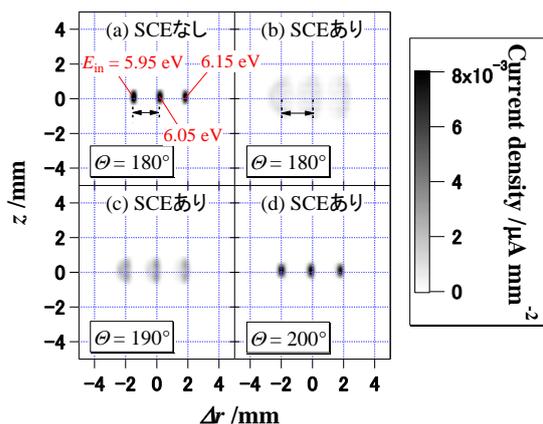


図2 静電半球型電子エネルギー選別器出射面における電流密度分布：選別器入射面におけるエネルギー $E_{in}$ が $E_0 \pm 0.05$  eVの電子について出射面における電流密度をプロットした。横軸は電子到達位置の中心からの変位、縦軸は紙面垂直方向の位置を表す。(a)は空間電荷効果(SCE)を無視した場合、(b)~(d)はSCEを考慮した場合。

### ○参考文献

- [1] M. J. Brunger & S. J. Buckman, *Phys. Rep.*, **357**, 215 (2002) [2] R. N. Zare, *Mol. Photochem.*, **4**, 1 (1972)  
 [3] H. Ibach, *Electron Energy Loss Spectrometers* (Springer-Verlag, Berlin, 1991)

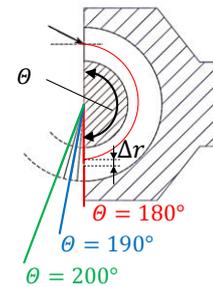


図1 モデルに用いた静電半球型電子エネルギー選別器

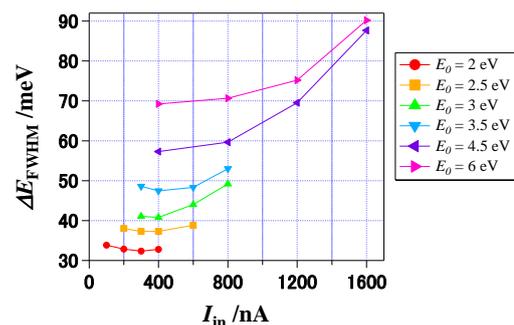


図3 電子ビームエネルギー幅の入射電流値依存性：静電半球型電子エネルギー選別器への入射電流値 $I_{in}$ に対し、出射電子ビームのエネルギー幅 $\Delta E_{FWHM}$ を各透過エネルギー $E_0$ についてプロットした。