

【序】イオン化に伴うポテンシャルの急激な変化により更にもう一つの電子が空準位へと励起される、いわゆる shake-up 過程の存在は古くより良く知られてきた。この shake-up に起因するサテライト状態への遷移は電子相関を敏感に反映するため、これまで多くの研究が行われている。特に Ne は電子数が少なく高精度な理論計算が可能であることから、サテライト状態の研究に絶好の標的であり、光電子分光法 (PES) や電子運動量分光法 (EMS) などを用いた研究が数多く報告されている。しかし、従来の PES[1]と EMS[2]の結果には、幾つかのサテライトバンドにおいて、その帰属や、ピーク強度と密接に関係する spectroscopic factor の値に明らかな相違がみられた。この原因としては、始状態の電子相関の効果や、高次ボルン項による two-step メカニズムの関与、極端に弱い遷移強度に起因した統計誤差の影響などが考えられ、その理解にはより詳細な研究が必要である。そこで、我々は最近開発した画像観測電子運動量分光装置[3]を用い、Ne のサテライト状態の対称性や spectroscopic factor に関する研究を行ったので報告する[4]。

【実験の原理】電子運動量分光実験では、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  $p_1, p_2$  を同時検出法により測定する。これにより、既知の入射電子のエネルギー  $E_0$  と運動量  $p_0$  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  $q$  を同時に決定できる。

$$E_{\text{bind}} = E_0 - E_1 - E_2, \quad q = p_0 - p_1 - p_2 \quad (1)$$

特に EMS 微分散乱断面積の  $q$  依存性は電子運動量分布と呼ばれ、イオン終状態の対称性を反映した特徴的な形状を示す。これにより、サテライト状態の対称性を実験的に曖昧さなく決定することができる。これは、 $E_{\text{bind}}$  のみをパラメータとする PES には無い、EMS の利点の一つである。

実験装置の模式図を図 1 に示す。電子銃で生成した高速電子ビームを試料ガスと球型アナライザーの焦点で交差させ、標的の電子衝撃イオン化を起こす。これにより生成した電離電子と散乱電子のうち、45° 方向に飛び出したものを球型アナライザーでエネルギー分析した後、二組の二次元検出器で計測する。一般に球型アナライザーは方位角  $\phi$  の情報を保持するので、電子の検出位置からその運動量とエネルギーを共に決定することができる。実験は入射電子エネルギー依存性を調べるため、 $E_0 = 1250, 1450, 1670 \text{ eV}$  で行った。各  $E_0$  に対するエネルギー分解能  $\Delta E$  は、それぞれ 2.4, 2.8, 2.9 eV であった。

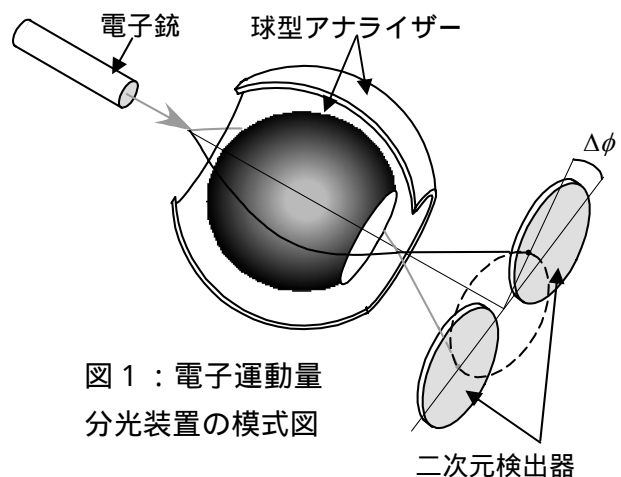


図 1 : 電子運動量分光装置の模式図

【結果と考察】図 2 に  $E_0 = 1450 \text{ eV}$  で測定した Ne の束縛エネルギースペクトルを示す。2s<sup>-1</sup> 主遷移ピークに対応するバンド 1 の高エネルギー側に、多くのサテライトバンドが現れている。

図中に点線で示す $\Delta E$ の幅を持つガウス関数を用いてdeconvolutionを行い、各サテライト状態への遷移の寄与を抜き出した。同様の手法を、異なる $q$ に対する束縛エネルギースペクトルに適用し、得られたピーク強度を $q$ の関数としてプロットすることで、サテライトバンドの電子運動量分布を求めた。

一例として、バンド2と4の電子運動量分布を図3に示す。比較のため、Hartree-Fock軌道を用いた歪曲派近似(DWBA)計算の結果も、併せて示している。統計誤差が大きいものの、バンド2のスペクトルは運動量原点で極小値、 $q \sim 1$  a.u.付近で極大値を持ち、 $2p^{-1}$ 主遷移の電子運動量分布と同じ形状をしている。従って、このバンドは $^2P$ 対称性を持つイオン終状態への遷移によるものであると結論できる。これは、バンド2のサテライト状態が $^2S$ 対称性を持つとしたSamardzic等のEMS測定の結果[2]とは異なり、PES[1]や最近の理論計算[5]による帰属を支持するものである。

一方、図3(b)に示すバンド4のスペクトルはバンド2の場合とは異なり、運動量原点で最大値を持ち、その形状は $2s^{-1}$ 主遷移の電子運動量分布と類似している。このことから、バンド4は主に $^2S$ 対称性を持つイオン終状態への遷移に起因していることがわかる。実際、DWBA計算との比較より求めたspectroscopic factorの値は、 $2s^{-1}$ の成分が0.011と支配的で、 $2p^{-1}$ の成分は0.003であった。このspectroscopic factorの値は、最近の理論計算の結果[5]と良く一致している。

同様の解析法を他のバンドに対しても適用し、サテライト状態の帰属とspectroscopic factorの決定を行った。得られた結果を、報告されているPESやEMS実験、及び理論計算の値と比較するとともに、各サテライト状態への遷移における電子相関の効果や、 $E_0$ 依存性などについても検証した。当日はこれらの結果について、詳細に報告する予定である。

## References

- [1] S. Svensson *et al.*, J. Electron. Spectrosc. Relat. Phen. **47**, 327 (1988).
- [2] O. Samardzic *et al.*, Phys. Rev. A **48**, 4390 (1993); M.J. Brunger *et al.*, J. Phys. B **25**, L481 (1992).
- [3] M. Takahashi *et al.*, J. Electron. Spectrosc. Relat. Phen., accepted.
- [4] N. Watanabe *et al.*, J. Electron. Spectrosc. Relat. Phen., accepted.
- [5] G. Fronzoni *et al.*, Chem. Phys. **220**, 15 (1997); A.S. Kheifets, J. Phys. B **28**, 3791 (1995).

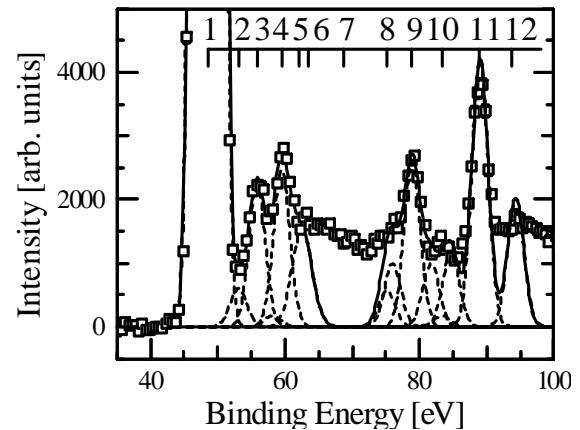


図2 : Ne 束縛エネルギースペクトル

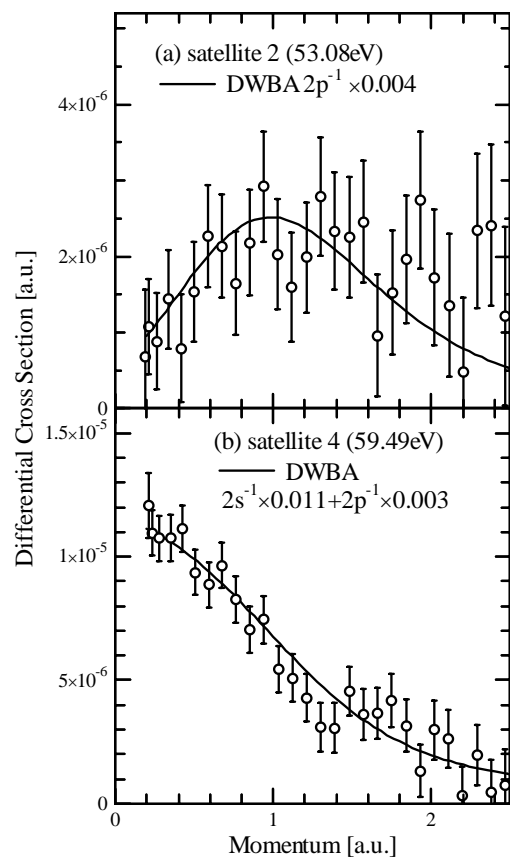


図3 : バンド2、4の電子運動量分布