

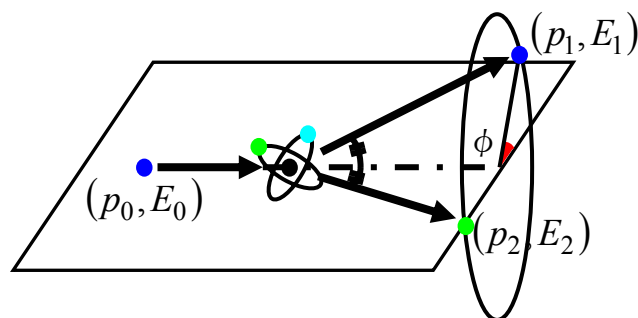
## 4P066 アセトンHOMOの電子運動量分布の衝突エネルギー依存性

(東北大多元研、分子研<sup>1)</sup>) ○趙泰慶、Yugal Khajuria<sup>1</sup>、渡辺昇、高橋正彦、宇田川康夫

【はじめに】電子運動量分光は運動量空間において軌道毎の電子の分布を直接観測でき、特に化学的に重要な外側に広がった軌道の形に敏感な実験手法である。この実験により得られる電子運動量分布は多くの場合、平面波インパルス近似 (PWIA) による理論計算と比較されているが、得られた電子運動量分布が理論計算値と大きく異なる例もいくつか報告されている。この原因として、装置のエネルギー分解能の問題、低い検出効率からくるS/Nの悪さ、あるいはPWIAが成り立っていない可能性などが考えられる。本研究の対象分子であるアセトンのHOMOもまた、衝突エネルギー1200 eVで得られた電子運動量分布が、理論計算値と形が大きく異なるという報告がされている [1]。そこで、検出効率を大幅に改善した画像観測電子運動量分光装置 [2] を用いて、異なるいくつかの衝突エネルギーで測定を行い、アセトンHOMOの電子運動量分布の理論計算値との差異について検討した。

【原理と実験】図1が実験の原理図である。電子運動量分光では、試料分子に電子を衝突させ、その時の電子衝撃イオン化により生成した非弾性散乱電子と電離電子の双方のエネルギーと運動量とを決定する。入射電子のエネルギーと運動量はあらかじめ分かっているので、エネルギー保存則から電子の放出軌道を特定でき、運動量保存則からその電子が衝突前に分子内で持っていた運動量の分布を決定することが出来る。

図2は装置の概念図であり、この装置では非弾性散乱電子と電離電子の散乱角がともに45°で、エネルギーが相等しい散乱二電子のみを検出する。この時、標的電子の運動量は散乱二電子の方位角差 $\phi$ に、エネルギーは動径方向の距離 $r$ に対応する。したがって二次元検出器と球形アナライザーを組み合わせることで、散乱二電子間のエネルギー分布と角度分布を広い範囲にわたり、一挙に測定することが可能となり、より高い検出効率を得ている。この装置を用いて、衝突エネルギー800, 1



$$\text{エネルギー保存則} : E_{bind} = E_0 - (E_1 + E_2)$$

$$\text{運動量保存則} : \mathbf{p} = (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) - \mathbf{p}_0$$

図1 実験の原理図

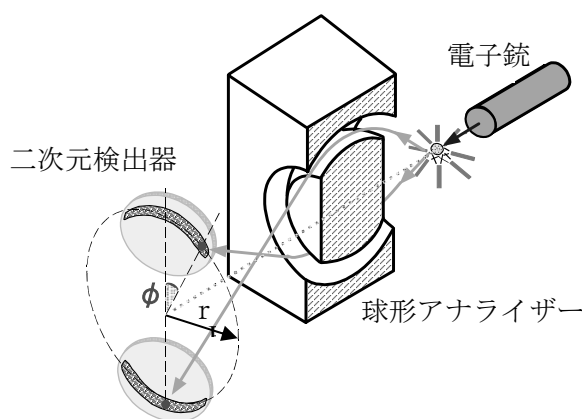


図2 装置の概念図

200, 1600 eVで測定を行った。

【結果と考察】図3は衝突エネルギー1200 eVで測定したアセトンの結合エネルギースペクトルとそれを幅1.6 eVのガウス関数でフィッティングしたものである。図から、本装置のエネルギー分解能はアセトンのHOMOを分離するのに十分であることが分かる。

図4はそれぞれの衝突エネルギー $E_0$ での測定により得た電子運動量分布を比較したものである。規格化は、電子運動量分布に運動量 $p$ の自乗の重みをつけたものの0~2a. u.の領域での積分値が等しくなるように行った。図から、HOMO電子運動量分布の形が衝突エネルギー依存性を持ち、衝突エネルギーが大きくなるにつれて低運動量成分が小さくなっていることが分かる。

今回測定を行った最も高い衝突エネルギー1600 eVの電子運動量分布と理論計算値との比較を行ったものが図5である。以前報告がなされたもの[1]と同じように、実験値の低運動量成分が理論計算値よりも大きくなる傾向が見られた。この差異の原因として、衝突エネルギー1600 eVでは未だPWIAを満足する高エネルギー極限に達していない可能性が考えられる。そこで、より大きな衝突エネルギーでの測定を行い更なる検討を進めている。

#### 【参考文献】

- [1] C.E.Brion et al., Chem. Phys. **188** (1994) 109.
- [2] M.Takahashi et al., Rev. Sci. Instrum. **73** (2002) 2242.

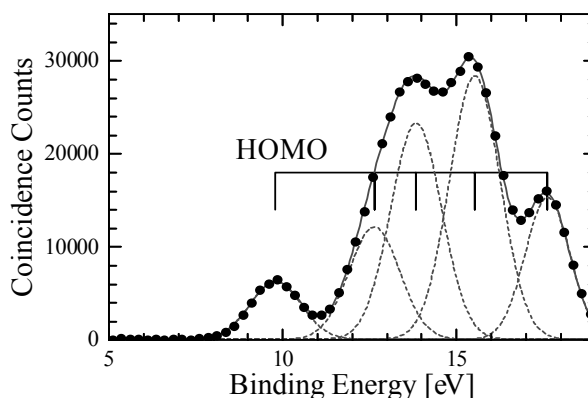


図3 アセトンの結合エネルギースペクトル

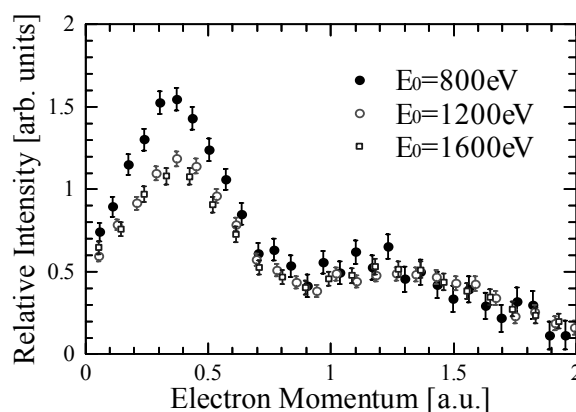


図4 異なる衝突エネルギーでのアセトンHOMOの電子運動量分布の比較

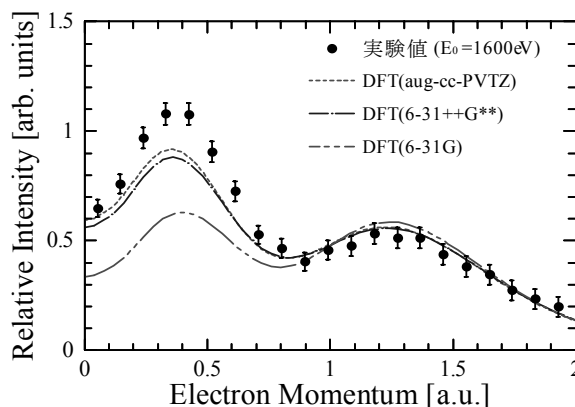


図5 アセトンHOMOの電子運動量分布と理論計算値との比較