

## 電子運動量分光による希ガス原子の内殻電子軌道の研究

(東北大多元研<sup>1</sup>、分子研<sup>2</sup>、東邦大理<sup>3</sup>、関西外大<sup>4</sup>)

三宅祐輔<sup>1</sup>、渋谷昌弘<sup>1</sup>、Khajuria Yugal<sup>2</sup>、渡辺昇<sup>1,2</sup>、高橋正彦<sup>1,2</sup>、  
宇田川康夫<sup>1</sup>、酒井康弘<sup>3</sup>、向山毅<sup>4</sup>

【序】電子衝撃イオン化過程の動力的完全実験である(e,2e)分光は、電子運動量分光とも呼ばれ、大きな移行運動量を伴う条件下で標的原子分子の電子構造や電子相関の直接的なプローブとなる。しかし、これまで行われてきた研究の多くは外殻電子軌道を対象としたものであり、比較的小さな断面積を持つ内殻軌道の研究は極めて少ない。我々は電子運動量分光の内殻軌道への定量的応用を図るため、まず、単純系であるXeの4d、4p軌道、およびArの2p、2s軌道について実験と理論との比較を試みた。

【実験】電子運動量分光は、電子衝撃イオン化により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 $p_1$ 、 $p_2$ の同時計測を行う。これにより、入射電子のエネルギー $E_0$ と運動量 $p_0$ は既知であるから、散乱前後のエネルギー保存則と運動量保存則を用いてイオン化エネルギー $E_{\text{bind}}$ と生成イオンの反跳運動量 $q$ が分かる。

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

さらに、入射電子のエネルギー損失および移行運動量が大きい場合、標的電子の電離前の運動量 $p$ はイオンの反跳運動量 $q$ の逆符号と等しい。

$$p = -q = p_1 + p_2 - p_0$$

従って、本分光により、電子運動量分布を軌道毎に分けて得ることができる。

実験は、我々が開発した画像観測電子運動量分光装置[1]を用いて行った。Xe4d、4p軌道、およびAr2p、2s軌道の電子運動量分布を、それぞれ入射電子のエネルギーが2100eV、2275eVの条件下で測定した。

【理論計算】非相対論的波動関数であるHartree-Fock(HF)軌道と相対論的波動関数であるDirac-Fock(DF)軌道を用い、平面波撃力近似(PWIA)、および歪曲波ボルン近似(DWBA)による(e,2e)断面積の計算を行った。

【結果と考察】実験で得たXeの結合エネルギースペクトルを図1に示す。5p、5s軌道からの主遷移ピークとそれらのサテライト構造の高エネルギー側に、4d、4p軌道からの主遷移ピークを見て取ることができる。

図2(a)、(b)、(c)はそれぞれXe5p、4d、4p軌道の実験的運動量分布である。図にはHF軌道を用いたPWIA計算(以下PWIA/HF)、DWBA/HF、DWBA/DFの結果を併せて示した。ここでは、形の比較を容易にするため、実験および理論的運動量分布をそれぞれ2.5 a.u.以下の運動量領域で面積1に規格化している。

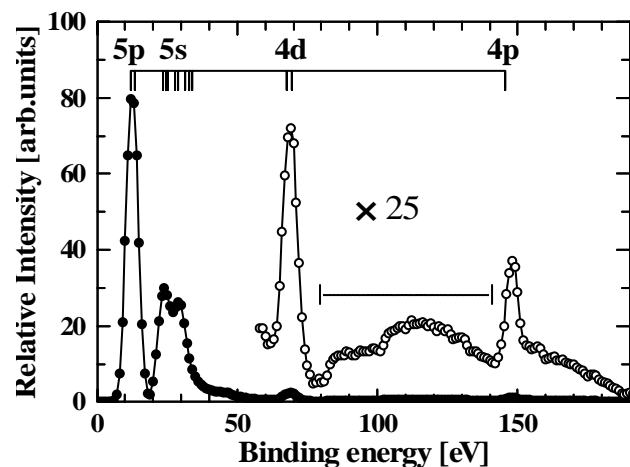


図1: Xeの結合エネルギースペクトル

図 2 (a)から、Xe5p 軌道に関しては約 1.5 a.u.以下の運動量領域において、PWIA/HF、DWBA/HF の双方が実験を定量的に再現していることが分かる。一方、図 2 (b)の Xe4d 軌道については、PWIA/HF が運動量原点近くで強度を持たない ungerade の対称性を見せるのに対し、実験は gerade の対称性を示す。この対称性の相違は DWBA/HF により解消でき、Brunger ら[2]および Brion ら[3]の先駆的研究を強く支持する。一方で、本研究により初めて観測された 2 a.u.付近に現れる断面積の極大値および、1 a.u.付近の極小値の位置など、実験と理論との間に有意な差が残ることが分かった。図 2 (c)の Xe4p 軌道の運動量分布は、本研究が最初の観測例である。これに関しても、DWBA/HF が実験を定性的に再現するが、低運動量領域で有意な差が残る。

講演では、実験と理論との差異は形のみでなく断面積の大きさにも現れることを報告する。そうした差異の原因を探るため、我々は標的原子の電離軌道の相対論的效果を取り入れた DWBA/DF 計算を行った。しかし、図 2 から明らかのように、顕著な相対論的效果を運動量分布に見出すことはできていない。現在、より進んだ DWBA/DF 計算を計画している。

本研究で得た新しい知見は主遷移以外にもあり、その一つが図 1 の Xe4d、4p 主遷移ピークの間には存在するブロードな構造( )である。これは 4d のサテライト構造として説明できる強度ではなく、事実、光電子分光法[4]では類似のブロードな構造は現れない。従って、電子衝突に特有の現象であることが分かる。そのメカニズムとして、例えば、5s イオン化で生成する非弾性散乱電子と電離電子のいずれかが残った Xe<sup>+</sup>イオンの 4d 電子と相互作用をし、巨大共鳴が起こる、といった 2 次の過程が考えられる。

#### 【参考文献】

- [1] M.Takahashi *et al.*, J.Electron Spectrosc.Relat.Phenom., **141**,83 (2004).
- [2] M.J.Brunger *et al.*, J.Phys.B., **27**, L597 (1994)
- [3] C.E.Brion *et al.*, J.Phys.B., **31**, L223 (1998)
- [4] S.Svensson *et al.*, J.Electron Spectrosc.Relat.Phenom., **47**,327 (1988).

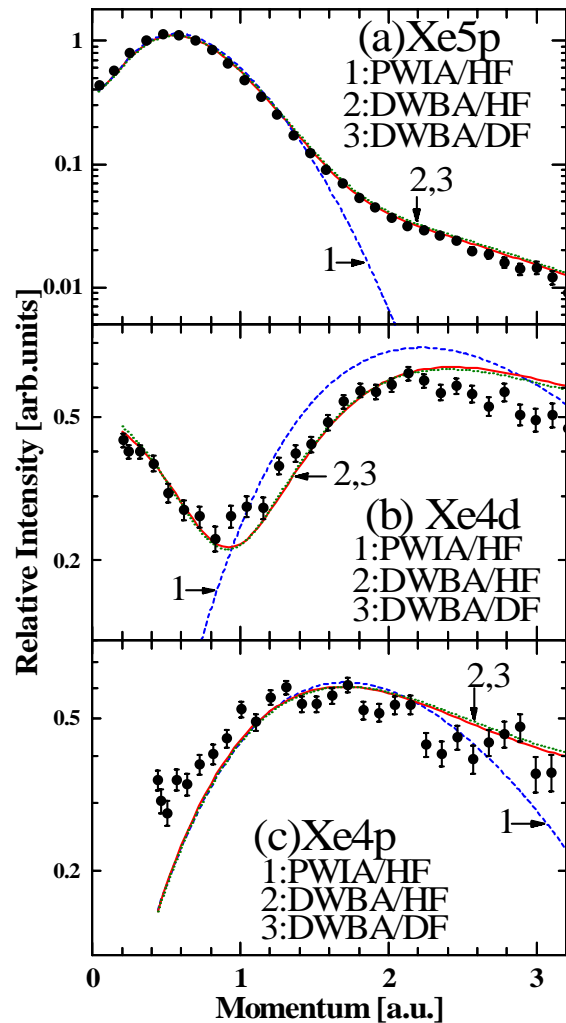


図 2 : Xe の運動量分布