

氏 名 伊 藤 真 義

学位（専攻分野） 博士(理学)

学 位 記 番 号 総研大甲第310号

学位授与の日付 平成10年3月24日

学位授与の要件 数物科学研究科 放射光科学専攻

学位規則第4条第1項該当

学 位 論 文 題 目 コンプトン散乱における散乱光子と反跳電子同時測定法の開発と
その応用

論 文 審 査 委 員 主 査 教 授 飯田 厚夫
教 授 安藤 正海
教 授 大隅 一政
助 教 授 河田 洋
助 教 授 野村 昌治
教 授 塩谷 亘弘（東京水産大学）

論文内容の要旨

電子運動量密度 $\rho(p)$ の測定は、実空間の電子密度 $\rho(r)$ の測定では得ることが難しい価電子の状態およびそれに付随するフェルミ面の情報などを容易に得ることができ、物性研究において重要な知見をもたらす。その測定方法として、X線コンプトン散乱法、陽電子消滅 γ 線角度相関法などがある。陽電子消滅 γ 線角度相関法は運動量空間で高い分解能 ($0.05a.u.$ 程度) で電子運動量分布の一重積分量を与える有力な方法ではあるが、陽電子が正電荷をもっていることから格子間もしくは格子欠陥において高い確率で電子と対消滅を起こすなど、陽電子のもつ波動関数による不確定さから $\rho(p)$ そのものの定量的な議論に若干の問題がある。X線コンプトン散乱法は陽電子消滅法のもつあいまいさを原理的に含んでおらず、近年、放射光の出現によって急速に発展してきている。しかし、その与える情報は電子運動量密度 $\rho(p)$ の二重積分量である。電子状態およびフェルミ面の詳細な情報を得るためには、直接的に高分解能な三次元電子運動量密度分布を測定する手法の確立が強く望まれていた。近年、この問題に答えるべく、コンプトン散乱光子と反跳電子の同時計測法の研究が行われるようになった。この実験方法では、三次元電子運動量密度の情報を実験から直接求めることができる。しかし、散乱光子のエネルギー測定により運動量を測定する場合、光子のエネルギー分解能は半導体検出器に代表される検出器そのものによって制限され、その運動量空間での分解能は $0.5a.u.$ をきることは困難である。結晶分光により、 $0.1a.u.$ 以下の分解能はコンプトン散乱のみの測定では達成されているものの、本研究の同時測定に対して、その分光法を用いることは検出効率の観点から不適當である。一方、典型的な物質のフェルミ半径は約 $1a.u.$ 程度であるため、詳細なフェルミオロジー研究を行うためには $0.1a.u.$ 以上の分解能が要求される。

本研究は、コンプトン散乱光子と反跳電子の同時計測法の高分解能化を第一の目的とした。具体的には、反跳電子のエネルギー測定によって高分解能な三次元電子運動量分布の直接測定法の開発、及びその応用を行った。

反跳電子のエネルギー分析は、半導体検出器での光子のエネルギー測定では達成できない分解能を引き出すことができる。本研究では、PF-ARのシングルバンチ運転を利用して飛行時間測定法により反跳電子のエネルギー計測を行った。得られた運動量分解能は $0.3a.u.$ に達し、光子エネルギー測定による分解能を凌駕した。散乱光子の測定は13素子の半導体検出器で行い、散乱角の異なる位置に設置された光子検出器によって、同時に異なる p_x , p_y 方向の電子運動量密度測定が可能となった。同時計測系は、マルチパラメーターアナライザーによりリストモードで蓄積した。同時に、測定されたスペクトルの解析方法の確立と関連するソフトウェアの開発も行った。

反跳電子の固体内での平均自由行程は非常に短く、反跳電子は試料内において多重散乱を受け、その情報を変えてしまう恐れがあることは容易に想像できる。この影響は、モンテカルロシミュレーションコードにより検証した。その結果、電子の平均自由行程と同程度の膜厚の試料の測定ではその影響がほとんどないこと、また、膜厚が十分に厚くなっても同時計測されるイベントは試料表面付近で発生したもの、言い換えると多重散乱を受けていないイベントがその4割以上を占め、フェルミエッジの特徴をはっきりと測定することができるという結論に達した。これは、多重散乱されたイベントはその方向を変えてしまうために検出器に入って来なくなり、同時計測されないためである。

また、この装置を用いることにより、グラファイト薄膜、及び、アルミニウム薄膜の三次元電子運動量密度の測定を行った。グラファイト薄膜において、その膜が試料内の電子の平均自由行程程度であったため、測定結果には多重散乱の影響はほとんど現われなかった。測定結果は、分解能の違いをよく反映しており、また、KheifetsらのLMTO法による理論計算と一致した。

アルミニウム薄膜の測定結果は、自由気体モデルで表されるような明確なフェルミエッジを示さず、ブロードな形状を示した。これはアルミニウム薄膜の膜厚が反跳電子の平均自由行程の約6倍であるために、反跳電子の多重散乱の影響を強く受けているためである。このため、薄膜表面の酸化層を強く見ることとなり、得られた結果は、多重散乱、及び、表面の酸化層の効果を考慮することによりその統計精度において理論計算と一致した。また、

その表面酸化層の厚さは XPS の深さ依存性測定から独立に測定し，上記の正当性を確認した。

コンプトン散乱過程において，散乱光子，反跳電子の間にエネルギー保存則が成立する。同時計測において散乱光子，反跳電子双方をエネルギー測定することよりその散乱が，どの準位の電子によって起されたかを特定することができ，電子準位に選別した三次元電子運動量密度の測定が可能となる。本研究では，グラファイト，及び，アルミニウムの同時測定において電子束縛エネルギーの影響を明らかに検知し，電子準位に分けた電子運動量密度の計測の可能性を示した。

(論文審査結果)

伊藤真義君の博士論文の内容は 1) コンプトン散乱における散乱光子と反跳電子同時測定法の開発、及び 2) その応用としてグラファイト、アルミニウムの3次元電子運動量密度の測定である。

コンプトン散乱光子とその反跳電子の同時測定法は、3次元電子運動量を直接実験的に得られることから、大強度の放射光の出現に伴いその開発研究が世界的に進められてきた。しかし、今迄に開発されたものはその運動量空間での分解能が光子検出器のエネルギー分解能で決定され(0.5 a.u.程度)、必ずしも物性研究の手法には至っていない。同君は「反跳電子のエネルギー分析を行うことにより、高分解能化、並びに束縛エネルギー差を利用して電子状態選別測定が可能となるであろう」という独創的な考えの基に、新しい同時測定装置の開発を行った。電子のエネルギー分析はPF-ARのシングルバンチ運転を利用して飛行時間法により達成し、また同時に異なる運動量空間の電子密度を測定するために多素子の光子検出器を用いて同時計測するシステムを構築し、実験装置を完成させた。本実験装置により、運動量空間での分解能を0.3 a. u. の3次元電子運動量密度分布の測定が可能となった。

次に、グラファイト、アルミニウムの薄膜試料を作製しその3次元電子運動量分布の測定を行い、得られた結果をバンド計算の結果、もしくは自由電子モデルの結果と比較検討を行った。グラファイトは反跳電子の試料内での多重散乱の影響が少なく、バンド計算の結果と良く一致し、実験装置の有効性を指し示すとともに価電子の電子状態を明らかにした。一方、アルミニウムは反跳電子の試料内での多重散乱の影響が高く、表面酸化膜の電子運動量密度を強く反映していることを、電子多重散乱のモンテカルロシミュレーションの解析、及び実験的に表面酸化膜の厚さをXPSで測定することから見出した。また、両者の試料に対して、内殻電子の電子密度を束縛エネルギーの差異を用いて電子状態選別測定の可能性を明確に示した。

以上の研究は数物科学研究科放射光科学専攻の博士学位論文としての内容に値し、特に独創的な考えの基で新しい実験装置を完成させ、その装置によって得られた実験結果を的確にバンド計算及び電子多重散乱のシミュレーションにより説明し、さらに現在の実験装置の限界及びその発展性を明確にした内容は、専門的にも総合的にも極めて優秀な研究と判断した。