

氏名	Tolstikhina Inga Yurievnas
学位（専攻分野）	博士（理学）
学位記番号	総研大甲第199号
学位授与の日付	平成8年3月21日
学位授与の要件	数物科学研究科 核融合科学専攻 学位規則第4条第1項該当
学位論文題目	Theoretical Studies of X-Ray Satellite Spectrum Formed in Highly Charged Ion Solid Interactions
論文審査委員	主査 教授 須藤 滋 教授 百田 弘 助教授 笹尾 眞實子 助教授 俵 博之 教授 藤本 孝（京都大学）

## 論文内容の要旨

At present much attention is being paid to experimental and theoretical studies of interactions of slow, highly charged ions with a surface. This attention is caused by the formation of a new physical object-so-called "hollow atom". The main feature of such a state of atom is the great number of vacancies in inner shells while the ionization degree of atom is low-almost neutral. With today's availability of powerful multicharged ion sources investigations on mechanisms of production and decay of such "hollow atoms" near solid surfaces have become a subject of considerable interest. These investigations are mainly aimed at understanding the neutralization dynamics of highly charged ions as they approach the surface and penetrate into the solid.

Deexcitation of this short-lived complex can take place via various electronic transitions between intra-atomic states in the particle or between particle and metal. Besides their fundamental interest, this process is also of practical relevance for plasma-wall interactions in gas discharges including thermonuclear fusion experiments or ion beam-activated material modification. The deexcitation of the "hollow atom" under the controlled conditions is very interesting from the point of view of creation of X-ray lasers.

In order to study the deexcitation processes of "hollow atom" formed under the interaction of slow multicharged ions (MCI) with a surface and to identify the X-ray satellite spectrum including a large number of unresolved line groups observed in such interaction a new theoretical approach has been suggested. In view of applications of this theoretical method to MCI it was based on the perturbation theory using the nuclear charge  $Z$  of MCI as a parameter. The electronic interactions between electrons and relativistic effects which are taken into account in the frame of Breit operator are included as a perturbation. To describe atomic orbitals, the H-like wave functions are used. Therefore, all atomic characteristics can be given by a series of  $1/Z$  powers. To improve the accuracy of the calculations by taking into account the screening of the nuclear charge of the MCI by inner shell electrons the screening parameter has been introduced. The vast number of the electronic states of ion have been reduced by averaging over the orbital ( $L$ ) and spin ( $S$ ) quantum numbers. The averaging over  $LS$  allowed us to express the desired atomic characteristics in analytical forms as a function of the electron numbers in various shells of the ion. Therefore, this method can be applied to practically any atomic system with arbitrary number of electrons and needs a considerably less time in comparison with the well known methods for the calculation of the atomic characteristics with the accuracies sufficient for various applications.

This method has been applied and has found to give generally good results for

the identification and prediction of the main features of X-ray spectra including M- and L- X-ray structures obtained recently by impact of highly charged  $Xe^{q+}$  ( $q=44-48$ ) ions on the Cu surface.

This X-ray spectra include a large number of the line groups that can not be resolved experimentally. The dominating electric-dipole transitions for L and M X rays have been defined and atomic characteristics of these transitions have been calculated.

The developed theoretical approach has also been applied to study the X-ray satellite spectra produced in an  $Ar^{17+}$  ions interacting with Ag surface, to predict the electronic configurations contributing to this spectrum and to describe one of the possible channels of the deexcitation process of "hollow" Ar atom through the Auger cascade and capture of the metal inner shell electrons. The results provided by the present method are in a good agreement with experimental data and are very interesting from the point of view of the investigation of the deexcitation processes in the interaction of MCI with a metal surface.

## 論文の審査結果の要旨

内殻にほとんど電子が存在せず、高い励起状態にいくつかの電子が存在する「ホロー原子」が近年実験的に確認され、その応用の可能性をも含め注目されている。

ホロー原子は高電離イオンが金属表面に近づく場合に生成されるが、その生成メカニズムはまだ十分には解明されていない。ホロー原子自体の存在は輻射遷移にともなうX線サテライトスペクトルの観測や、自動電離（オージェ過程）で放出される多数の電子の観測から確認される。しかしながら、これらの実験事実は今までは定性的に解釈されているのみであった。その原因のひとつは、多数の電子空孔と多数の励起状態電子から成るこの系は、主として最外殻1電子励起状態を取り扱ってきた従来の理論的枠組みが適用できないことによる。

本論文はこの複雑な原子状態を全体として記述する近似法を提案し、それに基づいてX線サテライトスペクトルを同定し、さらにホロー原子の生成過程についても考察したものである。

この方法は、非相対論的水素様波動関数から出発して、実際の電子状態のそれからのズレを（1）イオンの核電荷数の逆数で展開する近似法に、（2）電子間相互作用、相対論的效果を内殻電子による遮蔽パラメーターとして組み入れ、（3）ひとつの configuration（電子の空孔、占有状態の主量子数、軌道角運動量量子数の組み）から生ずる膨大な数の原子状態に対して、全軌道角運動量、スピン角運動量量子数についての平均をとることにより、この複雑な原子状態を、実験との比較に必要な精度は維持しながら現実的に取り扱えるようにしたものである。

高電離キセノンを銅表面に照射したときに観測されるX線スペクトルの解釈にこの方法を適用し、いくつかの幅の広いピークが、L殻に空孔を持ち、M、N殻電子が電気双極子遷移を行うときのサテライト線の集団であると同定した。高電離アルゴンを銀表面に照射したときのX線スペクトルはいくつかの分離したピークを示すが、それらのピークそれぞれを、M殻、N殻に電子が存在するときの $K_{\alpha}$ サテライト線として同定した。また、このスペクトルをホロー中性原子から出発するオージェカスケード過程によるものとしての解釈を試み、成功している。

以上、本論文において、申請者はホロー原子に対する有効な近似法を確立し、それをX線サテライトスペクトルの解釈に適用した。この方法はホロー原子からの放出電子のエネルギースペクトルの解釈にも適用可能であり、高電離イオンと金属表面相互作用によるホロー原子生成メカニズムの解明にも資するであろう。よって、本委員会は、本論文は、その独創性と当該分野への貢献の程度から判断して、博士学位論文として十分な資格があると認めた。

また、論文審査委員全員の前で出願者に口頭試問を実施し、論文内容に関する質疑及び関連する基礎知識についての試験を行った結果、十分に研究内容を理解していることが示された。基本的事項についても、直接的に関連している原子物理について十分に理解している。

以上により、博士論文を合格とした。