

| | |
|----------|---|
| 氏 名 | 内山 英史 |
| 学位（専攻分野） | 博士（理学） |
| 学位記番号 | 総研大甲第 846 号 |
| 学位授与の日付 | 平成 17 年 3 月 24 日 |
| 学位授与の要件 | 高エネルギー加速器科学研究科 物質構造科学専攻 学位規則第 6 条第 1 項該当 |
| 学位論文題目 | 二次元 X 線検出器を用いたコンプトン散乱光子・反跳電子の同時計測法の開発と三次元電子運動量密度分布測定 |
| 論文審査員 | 主 査 教授 大隈 一政 教授 松下 正 教授 野村 昌治 教授 河田 洋 助教授 岩住 俊明 名誉教授 塩谷 亘弘（東京水産大学） |

私の研究は、「二次元 X 線検出器を用いたコンプトン散乱光子・反跳電子の同時計測法の開発と三次元電子運動量密度分布測定」である。

物質の凝集・結合や電氣的性質に関わる価電子の波動関数は実空間では広がって存在するが、それをフーリエ変換をして運動量空間に移すと局在している。したがって、運動量密度を直接測定することは価電子の電子状態の研究を行うのに極めて有効である。

一方、コンプトン散乱は電子と X 線の衝突現象として記述することができ、衝突前後の運動量及びエネルギー保存則から、散乱前の電子の運動量の情報を得ることができる。特に、散乱 X 線の方向、反跳電子の方向、そして散乱 X 線もしくは反跳電子のエネルギーを各散乱課程ごとに分離して同時測定することができれば、電子の三次元電子運動量密度分布を直接測定することができる。この原理を利用すれば固体内電子の運動量密度分布を知ることができるということは古くから知られていたが、実際に有用なデータが得られるようになったのは高強度放射光光源が利用できるようになった近年である。

具体的には、以下のようにして実験装置の開発を行った。入射 X 線としては、反跳電子の試料内での多重散乱を軽減するために 115keV のエネルギーを選択し、散乱 X 線は種々の散乱方向を同時に計測できるように二次元 X 線位置敏感型検出器によって検出する実験装置を開発した。一方、試料から飛び出してきた反跳電子はマイクロチャンネルプレートによって検出すると同時に、そのエネルギーを PF-AR のシングルバンチ運転を用いてエネルギー窓を設定することのない、明るい飛行時間測定法によって決定する。また、測定時のエネルギー分解能の向上をはかるために減速ポテンシャルシステムの導入を行っている。そしてコンプトン散乱光子と反跳電子を同時計測する回路系を設計及び構築を行うと同時に、そのデータ解析手法の確立を行い三次元電子運動量密度分布測定を可能にした。

この装置を用いての実証実験をアルミニウム多結晶薄膜の試料について行った。アルミニウムの価電子は電子ガス近似がよく成り立つ電子系で、ある大きさの運動量（フェルミ運動量）以上の運動量を持たないことが知られている。アルミニウムは酸化しやすい物質であるので、その影響を減らすために測定チャンバー内に蒸着装置を設置して 50nm 厚の薄膜試料の作成を行った。この試料の厚さは多重散乱の効果を軽減するのに必要な薄さである。三次元電子運動量密度分布の結果は中央部分でのフラットトップが確認でき、実験から求められたフェルミカットオフの位置は理論から得られるそれと一致した。そして、一度に連続的な三次元電子運動量密度分布測定が可能であることを示した。

次に、単結晶シリコン薄膜の三次元電子運動量密度分布測定を行った。シリコン単結晶試料は、その三次元電子運動量密度分布測定のみならず、将来的に単結晶シリコン薄膜を基盤として種々の物質をその基板上で成長させたナノ構造を持つ物質の電子状態を研究するベースの試料としての役割も持っている。アルミニウムの場合と同様に多重散乱の影響を小さくするために100nmの厚さの試料を準備した。その試料はSOI(Silicon on Insulator)基盤より、試料部となる100nm厚の単結晶Si薄膜部分のみを残すという特殊な作成方法により作られた。得られたシリコン単結晶の三次元電子運動量密度分布の結果はFLAPW(Full-potential Linearized Augmented-Plane wave)バンド計算で得られたそれらと比較した。実験値と理論値とは良い一致を示し、異方性を確認することもできた。

以上の結果より、本研究において1)コンプトン散乱光子と反跳電子の同時計測装置に二次元X線検出器を導入することにより、連続的な三次元電子運動量密度分布を測定できるシステムの開発に世界で初めて成功した、2)アルミニウムの三次元電子運動量密度分布の測定に世界で初めて成功し、理論値と実験値でのフェルミカットオフの一致が確認できた、3)シリコンの三次元電子運動量密度分布の測定に世界で初めて成功し、異方性を確認することができた。

今後の展望として、本研究で開発した実験方法は先に述べたようにシリコン薄膜結晶上に成長させた種々のナノ構造、半導体、化合物、金属、合金材料等々の電子構造の研究に非常に有用であり、そこから得られる電子構造の知見は新材料設計・開発の基礎的なデータを得ることに寄与すると考えられる。

論文の審査結果の要旨

三次元電子運動量密度分布からは物質の物性を担う伝導電子、結合電子の情報を明確に捕らえる事が出来、その測定はフェルミ面の決定、結合電子の波動関数等の情報を与える。しかし、三次元電子運動量密度分布を実験的に測定する方法は陽電子消滅二次元角相関法、コンプトン散乱法が挙げられるが、それらから得られる情報は、運動量密度分布の1重積分量、もしくは二重積分量であり、データ処理に起因する誤差が不確定さとして低運動量空間に存在する。また、前者においては本質的に陽電子の波動関数の不確定さの問題も有している。従って、実験的に三次元電子運動量密度を求めることが要求されていた。

内山氏は、直接実験的に三次元電子運動量密度分布を迅速に測定するために、コンプトン散乱光子を二次元X線検出器によって測定し、反跳電子とのコインシデンス測定を行うシステムを開発するとともに、それを用いてシリコン結晶の三次元電子運動量密度の異方性を測定し、バンド計算の結果と比較検討した。

コインシデンス測定法それ自身は従来から0次元X線検出器を用いて開発されてきていたが、彼はそのシステムに2次元X線検出器を新たに導入し、物性的に興味を持たれる伝導電子、もしくは結合電子が存在する運動量空間 ($|p| \leq 2 \text{ a.u.}$) の領域を全て同時に測定出来るシステム(実験装置、計測データ処理法)を構築した。そのシステムのチェックを単純金属の典型であるアルミニウムで確認するための実験を行い、電子運動量密度がフェルミ半径の内側では平坦な分布を持っている事、またフェルミ半径が従来の報告と一致している事を確認している。

次にシリコン結晶の電子運動量密度を直接測定し、その異方性を有する3次元電子運動量密度分布を一度に測定できることを示すと同時に、その得られた異方性をFLAPWで計算されたバンド計算から予想されるそれらと比較検討を行った。その結果、低運動量空間領域 ($|p| \leq 0.6 \text{ a.u.}$) ではバンド計算からの予想とほぼ一致する事が確認された。一方、実験的に得られた異方性の値はバンド計算から予想される値よりも小さく、その原因は、従来通常のコンプトン散乱実験から報告されているように、バンド計算に電子相関の寄与の取り入れが不十分であることによるものであろうと推察している。一方、($|p| \geq 0.6 \text{ a.u.}$) の運動量空間ではバンド計算の予想との不一致が見られ、その原因は反跳電子の試料内での多重散乱による事を考察している。

また、将来の展望に関して、反跳電子の測定にも2次元検出器を導入・飛行時間法測定の飛行距離を増大させる事によって大幅にカウントレート、分解能の向上が期待されることを考察すると同時に、今後に対象とする物質に関する方向性も示している。

以上、本論文は世界ではじめて実験的に3次元電子運動量密度分布を一度に測定できる装置の開発研究とそれを用いたシリコン結晶の3次元電子運動量密度測定であり、その内容は専門的にも総合的にも高い水準の研究であると認められる。したがって、高エネルギー加速器科学研究科・物質構造科学専攻の博士論文としてふさわしい内容を持つと判断した。