

◁研究会報告▷

4th International Workshop on
Auger Spectroscopy and Electronic Structure

高田 恭孝 (分子科学研究所)

上記ワークショップが6月23日から26日にドイツのForschungszentrum Jülichで開催された。同研究所のW. Eberhardt氏がチェアマンを務められ、同氏のグループのJ. Lüning氏, J.-E. Rubensson氏らによって運営された。著者は今回初めて参加したが、思っていた以上に放射光を利用した研究の割合が大きく、特に内殻吸収端近傍の共鳴オージェ過程に関する研究が多くあった。またX線共鳴発光に関しても幾つか発表がなされた。参加者は70名弱で、31件の口頭発表と28件のポスター発表があった。

研究内容が多岐にわたっており、ここで全てをカバーすることは困難であるので、内殻共鳴過程に関連した研究を中心に紹介させていただき、まず最初にW. Mehlhorn氏が“オージェ分光70年”と題して、その歴史的な発展をレビューした。1925年のP. Auger氏のArの霧箱実験によるオージェ過程の発見から50年代までの固体についての研究を第1期、60年から始まった気体についての電子分光器を使ったオージェ過程に関する詳細な研究を第2期、放射光の波長選択性を利用した吸収端近傍での脱励起過程に関する研究を第3期として分類し、PCI効果や共鳴ラマン効果などの幾つかの現象に関する研究が紹介された。また、電子スペクトルの2次元マッピングやコインシデンススペクトルが今後ますます重要になるであろうと指摘された。

P. Morin氏は分子のオージェ電子と解離イオンのコインシデンススペクトルについて講演し

た。コインシデンスレートを稼ぐためにオージェ電子の検出効率を高くすることを目的として開発されたダブルトロイダルアナライザーは、分解能100で 4π srの5%のアクセプタンスを有する。研究例として $^{14}\text{N}^{15}\text{NO}$ の結果を示し、末端のNの π^* 吸収ピークのトップとその両側(ほぼ半値)の3点に励起エネルギーを合わせた場合、共鳴オージェスペクトルの形状が異なること、さらに解離種が低エネルギー側で強く放出されるという現象を見だし、Renner-Teller効果により分子の変角振動が励起されることによると解釈した。

この他にもエネルギー分解能の高い励起光を利用し、特定の共鳴励起状態についてその吸収ピークから僅かに励起エネルギーをずらした(detune)場合に見られる現象に関する講演が幾つかあった。M. Piancastelli氏はCOのC $1s \rightarrow \pi^*$ ($v'=0$) 励起状態について、detuneすると電子スペクトルの $1\pi^{-1}$ とsatelliteの相対強度(分岐比)が変化し、しかもその谷($1\pi^{-1}$)とピーク(satellite)の位置が吸収ピークに対応する励起エネルギーより低エネルギー側にずれるという新しい現象を報告した。O. Björneholm氏は、HClのCl $2p$ 共鳴励起状態でdetuneすると低エネルギー側で分子のオージェピークが強く、ピークトップでは逆に解離原子のオージェピークが強くなり、これらの強度比が大きく変化することを報告した。

W. Wurth氏はRuおよびRuをXeやCOなどで修飾した表面に吸着したArについて、Ar

2p→4s 共鳴励起状態で detune したときのオージェ電子スペクトルについて報告した。コヒーレントな過程による結合エネルギー一定のピークと、電子が下地に移動してしまいコヒーレンスを失った過程による運動エネルギー一定のピークの強度比が detune の度合いによって変化することを示した。さらにその変化の度合いから見積った下地への電荷移動の速さは、表面修飾の効果を反映したものであった。

A. Bradshaw 氏は、CO の C 1s イオン化閾値近傍の二電子励起および形状共鳴領域で測定した高分解能光電子スペクトルについて講演した。C 1s⁻¹ の CIS (constant initial state) スペクトルは $v'=0$ から 4 まで大きくなるに伴い形状共鳴領域にみられるピーク位置が高エネルギー側にシフトすること、形状共鳴領域では conjugation satellite に加えて新たな satellite が現れること、C 1s⁻¹ の CIS に全ての satellite の CIS を足し合わせて初めて吸収スペクトルと一致することが示された。また、CO₂ の共鳴光電子スペクトルに双極子禁制の非対称伸縮および変角振動による構造が振電相互作用によって許容になって観測されるという最新の結果を示した。

X 線共鳴発光に関する研究としては A. Nilsson 氏の Ni(100)表面に吸着した N₂ についての講演が印象深かった。エネルギー分解能の高い励起光を使うことによって、下地と結合している N 原子と結合していない N 原子を選択して π^* 励起状態からの共鳴発光スペクトルを角度分解で測定し、価電子軌道の対称性まで分離している。その結果から、下地との結合は $2\pi^*$ への電子の逆供与と 5σ からの供与という単純なモデルと異なり、フェルミ準位近傍に分子の π 軌道と Ni 3d バンドからなる新たな π 対称性の軌道ができること、さらに 4σ , 3σ 軌道まで下地との結合の影響を受

けることが示された。

理論的な研究に関しては、F. Gel'mukhanov 氏が共鳴オージェ過程についての従来の時間に依存しない取り扱いに加えて、時間を取り入れた新たな理論的扱いから detuning 効果について講演した。後者から、共鳴オージェ過程（共鳴発光過程も同様）に要する時間が detune によって短くなり吸収ピークのトップでもっとも長くなるという結果が導かれ、解離原子のオージェピーク強度に対する分子のオージェピーク強度が detune によって増大するという最近の実験結果を説明することが示された。

E. Pahl 氏は HF 分子の共鳴オージェスペクトルを例にとり、wave-packet による理論的取り扱いが非常に有効であることを示した。また励起状態とオージェ終状態のポテンシャル形状によって解離種と分子のオージェピークの相対強度が変化するというシミュレーションが示された。

日本人としては、著者が Ni 平面錯体の、吉井氏が Si, P, S, Cl を含む分子（凝縮相）の共鳴オージェ過程についてそれぞれポスター発表を行った。

昨年の「軟 X 線非弾性散乱に関する研究会」と比した全体的な印象としては、原子についての発表が少なくなり、分子についての発表、特に detuning に関するものが中心的な話題であった気がする。しかも 1 年前には報告されていなかった新たな現象が幾つか報告され著者にとって非常に意義深いワークショップであった。どの放射光施設を利用して得た成果かは書かなかったが、ELETTRA のものもかなり見受けられるようになり、欧米の研究者が国境を越えて第 3 世代リングを利用していることが印象的であった。なお、今回は 2000 年にアメリカで開催されることになった。