



Title	電子相関の強い系と弱い系の共鳴光電子放出の理論
Author(s)	仲野, 高志
Citation	大阪大学, 1987, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/2002">https://hdl.handle.net/11094/2002</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名・(本籍)	仲の高志
学位の種類	理学博士
学位記番号	第 7623 号
学位授与の日付	昭和 62 年 3 月 26 日
学位授与の要件	理学研究科物理学専攻 学位規則第 5 条第 1 項該当
学位論文題目	電子相関の強い系と弱い系の共鳴光電子放出の理論
論文審査委員	(主査) 教授 金森順次郎 (副査) 教授 伊達宗行 教授 櫛田孝司 教授 邑瀬和生 助教授 小谷章雄

### 論文内容の要旨

電子相関の強い系及び弱い系の共鳴光電子放出を理論的に研究した。電子相関の強い系の典型としてセリウム酸化物 ( $\text{CeO}_2$  と  $\text{Ce}_2\text{O}_3$ ) とガンマ・セリウムを、弱い系の典型として黒リンを考えた。セリウム酸化物ではセリウムの 4f 電子と酸素の 2p 電子の間の混合と、4f 電子間のクーロン相互作用及び内殻正孔の 4f 準位に対するポテンシャルを考慮した。また、黒リンに対しては、内殻正孔の伝導電子に対するポテンシャルと現実的な状態密度（伝導帯と価電子帯）を考慮した。

まず、セリウム酸化物の 3d 内殻光電子放出、価電子光電子放出及び逆光電子放出のスペクトルを充満帯アンダーソンモデルを用いて理論的に解析した。 $\text{CeO}_2$  には、以前にいくつか解析があるが、より実験結果にあうようにパラメータを選び直した。 $\text{Ce}_2\text{O}_3$  に対しては、解析はまだ行われていないので、これが最初の解析である。その結果、 $\text{CeO}_2$  は混合原子価状態にあるが、 $\text{Ce}_2\text{O}_3$  はほぼ 3 値 (f 電子を一個もつ) であることがわかった。

次に、セリウム酸化物の共鳴光電子放出スペクトルを計算した。その結果、上にあげたさまざまなスペクトルの解析と同じパラメータを使って、共鳴光電子放出スペクトルを実験とあわせることができた。このことにより、ここでのパラメータ値の評価はもっともらしいことが確かめられた。同様な解析をガンマ・セリウムに対しても行ない、 $\text{Ce}_2\text{O}_3$  型のモデルを用いることで解析することに成功した。

3 番目に、黒リンの共鳴光電子放出のスペクトルを理論的に解析した。以前の解析を、内殻正孔のポテンシャルと現実的な状態密度を用いることで改良した。その結果、共鳴光電子放出の中間状態において、内殻励起子がファノ型の共鳴と内殻励起のしきい値でのオージュ電子強度の増大に、重要なはたらきをしていることがわかった。

## 論文の審査結果の要旨

最近光を試料に照射して放出される電子のエネルギー、運動量等を測定する光電子分光およびその逆プロセスを測定する逆光電子分光の実験が盛んに行われている。この実験結果から固体内の電子状態についての情報を引き出すには綿密な理論解析が必要であり、また到達した電子状態についての描像は、光の波長領域によって異なる各種電子過程を統一的かつ定量的に説明できるものでなければならない。仲野君は電子相関の強い典型物質の一つである $Ce_2O_3$ および電子相関を實際上無視してもよい黒鱗について、まず各種データを説明するために考慮しなければならない電子間相互作用の大きさ、外殻電子状態での電子配置等を結論するための理論解析を行った。ついで最近データが得られるようになった共鳴光電子放出（内殻電子の励起に伴い二つの外殻電子の一つが内殻空孔と結合し他が放出されるプロセス）に着目しこれらの物質についてその解析のための理論を作り、実験結果と比較した。また共鳴光電子放出以外の実験からすでに電子状態の解析が行われていた $CeO_2$ 、 $\gamma Ce$ についても適用した。これまでの理論解析で結論された各種パラメータを用いた計算結果と実験との一致はよく、これまでの理論を裏づけるものであり、共鳴光電子放出の機構についても新しい知見を得ている。

仲野君の研究は $Ce_2O_3$ と $CeO_2$ でのf電子状態の相違や黒鱗での光電子放出での励起子の役割を明らかにしたこと、これらおよび関連する物質での共鳴光電子放出の機構を解明したこと等の幾つかの点で高く評価することができる。本論文は今後のこの分野の実験、理論両面での発展のための基礎を形成するもので、理学博士の学位論文として十分の価値を有するものと認める。