



Title	光電子回折における円2色性 -電子の回転運動の直接検証-
Author(s)	大門, 寛
Citation	大阪大学低温センターだより. 1993, 84, p. 1-5
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/3592
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

光電子回折における円2色性

— 電子の回転運動の直接検証 —

基礎工学部 大 門 寛 (豊中4696)

1. はじめに

我々は、高エネルギー研究所の放射光を用いて種々の光電子分光の実験を行っているが、最近世界に先駆けて円偏光による光電子回折パターンを測定し、電子の回転運動を直視する事に成功した¹⁾ので紹介する。

電子が単純に原子核の周りを回っているという古典的な描像は量子力学を学習してからはあやふやになり、p軌道やd軌道の波動関数の形を想像して我慢しているのが私を含めて多くの人の実状ではないだろうか。つまり、電子の軌道角運動量は量子力学の最も基礎的な概念であるが、実際に電子が回転運動をしているという概念は古典的なような気がして隅に追いやられていたように思われる。今回の実験はその回転軌道を見たものである。

2. 結果と考察

図1に、本実験の測定器を示す。これは、我々が開発した2次元表示型の球面鏡分析器²⁾であり、等エネルギーの電子の放出角度分布を歪まずに広い範囲で2次元的に測定できる。高エネルギー研究所の

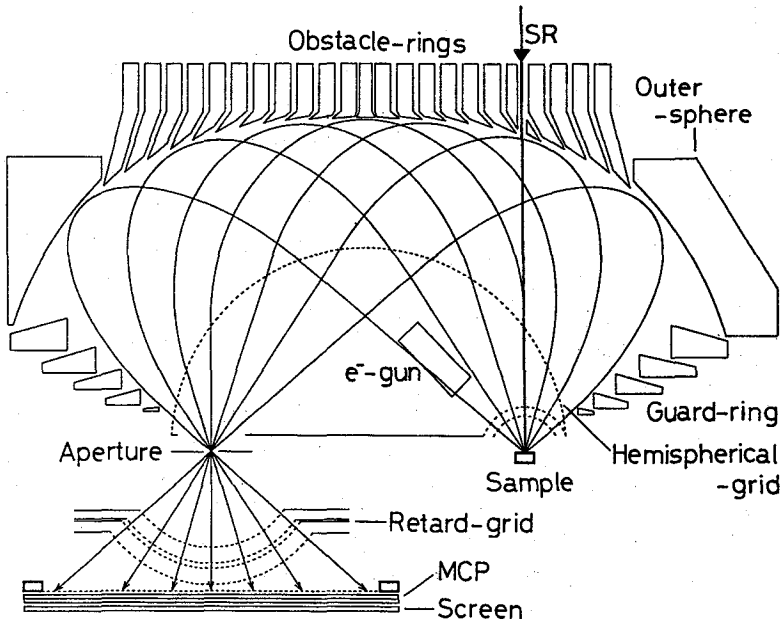


図1. 二次元表示型球面鏡分析器の断面図。円偏光 (SR) は試料に垂直に入射している。スクリーンに表示される光電子回折パターンは、真空の外からCCDカメラで測定される。

AR-NE1-Bというビームラインの円偏光アンジュレータから出た数百 eV の左右円偏光を、垂直分散型斜入射分光器を通して試料に垂直に入射した。試料はSi(001) 清浄面を用いた。

得られた光電子スペクトルのSi2p内殻のピークに分析器のパスエネルギーを合わせて、2p電子の放出角度分布（光電子回折パターン）を測定したものが図2である。これらのパターンは、得られた2次

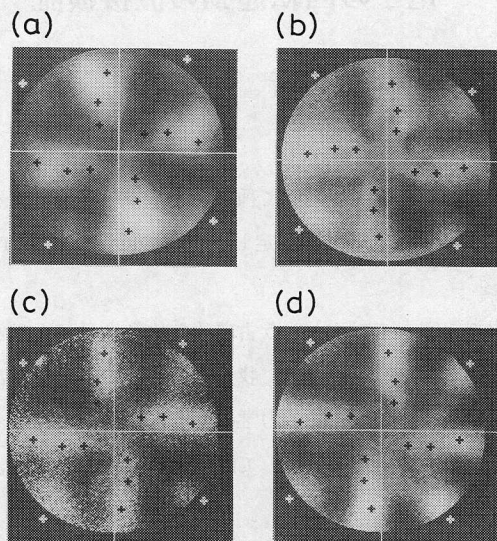


図2. Si2p内殻光電子の放出角度分布（光電子回折パターン）。(a)運動エネルギー＝150 eV、円偏光の電場の回転の向きはこの紙面内で反時計回り、(b)運動エネルギー＝450 eV、円偏光は時計回り、(c)、(d)は運動エネルギー＝250 eV、円偏光はそれぞれ反時計回り、および時計回り。これらのパターンは、生データを分析器の透過効率パターンで割った結果である。

元データを、分析器の透過効率パターンで割ったものである。図の中心が試料に垂直な方向（001）であり、円の外周は約 43° である。試料の対称面（100）、（010）の延長が図の白い縦軸、横軸である。(a)は、2p電子の運動エネルギーが150 eVになるように分光器を調整して測定した2pの光電子回折パターンであり、円偏光の電場の回転の向きはこの紙面内で反時計回りである。(b)は運動エネルギーが450 eV、円偏光の回転は時計回り、(c)、(d)はともに運動エネルギーが250 eVで、円偏光の回転はそれぞれ反時計回り、および時計回りである。強いピークが軸の左右に回転して観測されている。回転の向きは円偏光の電場の回転方向と一致している。軸からの回転角は、エネルギーが低いほど大きくなっている。図中の十字印は、後に述べる計算によって予想された位置である。

これらの強いピークは前方散乱という効果によってできるものである。光電子は原子から出た後で球面状に広がるが、近くに原子があると、原子のポテンシャルは電子にとって引力なので凸レンズのような作用をして電子波を集める。従って、光電子が進む方向に原子があると、その前方の波動場が強くなる。散乱する原子までの距離が短いほどその効果は大きく、ピークは強くなる。大体の所は、最近接原子のみを考えれば良い。

Si（001）面の場合、どのような前方散乱が強く観測されるかを（100）断面で示したのが図3である。最近接原子の組み合わせのみを考慮すると、[112]方向には2組のペアがあるので強いピークが期待できる。[113]方向には一組しかないが距離が近いので同様に強いピークが期待できる。[115]には弱い

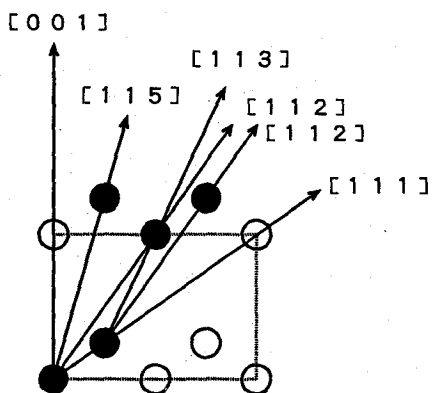


図3. Si (100) 断面図。

このようなずれは光電子がまっすぐに広がらずに、図4のように回転しながら広がった結果として説明する事が出来る。つまり光電子の軌道が回転運動によって図4のように曲がっているために、A原子に衝突するときの前方散乱の方向はOAを結ぶ直線の方ではなく曲がった軌道に沿った方向となる。

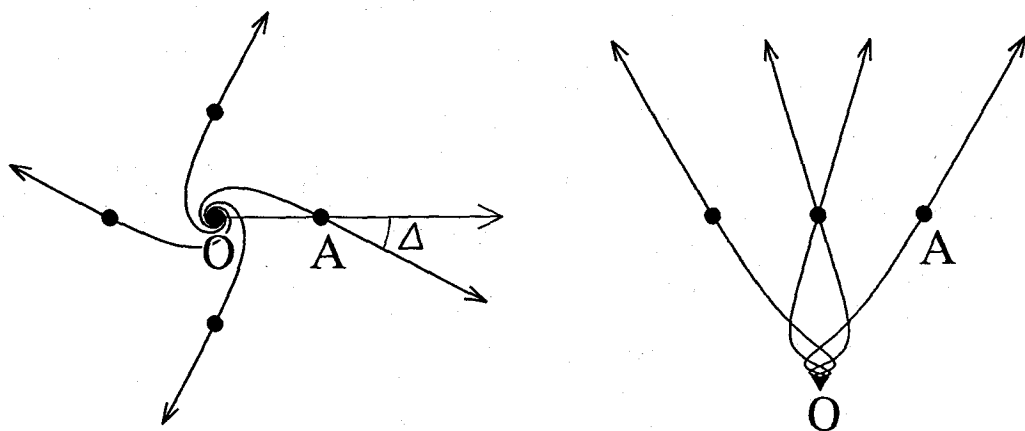


図4. ある角運動量を持つ光電子の [112] 方向にある4個の原子 (Aなど) を通る軌跡 (実線)。左は上面図、右は側面図である。電子は回転しながら進むために光電子にとっての前方散乱の方向はOAの向きからΔだけずれる。

この曲がった軌道の詳しい解析は文献⁹⁾を見て頂くとして結果だけを書くと次のようになる。

$$\phi = -\frac{m}{k r \sin^2 \theta} + C \quad (1)$$

$$\theta = \text{const.} \quad (2)$$

Cは定数である。これらの軌道のうち [112] 方向にある原子 (Aなど) を通る4本を図4に実線で描いてある。

この式の導出において、原子の外側 (r, θ, ϕ) における光電子の波動関数 Ψ は次式のように考えている。

$$\Psi \propto \frac{e^{ikr}}{r} \times Y_l^m(\theta, \phi) \propto \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) e^{im\phi} \quad (3)$$

k は光電子の波数ベクトル、 Y_l^m は球面調和関数である。 $f(\theta)$ は θ だけの関数であり、例えば $(l, m) = (1, 1)$ のとき $f(\theta) = 1$ であり、 $(l, m) = (2, 2)$ のとき $\sin^2 \theta$ となる。 l は軌道角運動量の量子数、 m はその z 成分の量子数である。左 (右) ネジ円偏光では l は $l+1$ と $l-1$ に、また、 m は $m+1$ ($m-1$) に変わる。今の場合、始状態の l は 1 なので、終状態の l は 2 または 0 であるが、この実験での終状態の運動エネルギー領域においては $l=2$ の確率の方が $l=0$ の確率よりもずっと大きい。さらに、Clebsch-Gordan 係数を考えると、左ネジ円偏光の時は $m=2$ が、右ネジ円偏光の時は $m=-2$ が 1 番強く励起されることがわかる。(ここで、 $m=\pm 2$ の波動関数は、 $[001]$ 方向に強度を持たない事に注意する。)

この時、無限遠における OA 方向からの方位角のずれ $\Delta \phi$ は、

$$\Delta \phi = \frac{m}{kR \sin^2 \theta} \quad (4)$$

で与えられる。方位角のずれは m に比例し、 k 、 R 、 $\sin^2 \theta$ に反比例している。

以上をまとめると、散乱原子が出射原子から見て (R, θ, ϕ) の所にあると、前方散乱のピークは

$$(\theta, \phi + \frac{m}{kR \sin^2 \theta}) \quad (5)$$

の所に現れることになる。

(5)式で予想されるピーク位置は、古典的な考えにも対応している。角運動量 $m\hbar$ を持った粒子の直線軌道は原点 O を通らないが、 R が大きいところでは図 4 の実線の軌道に接している。この時の $\Delta \phi$ は、

$$\Delta \phi = \sin^{-1} \frac{m}{kR \sin^2 \theta} \quad (6)$$

となり、これは R が大きいときには (4) 式と一致する。

図 3 の $[112]$ 、 $[113]$ 、 $[115]$ の原子の組み合わせにおいて、(5)式によって計算したピークの位置を図 2 の中に小さな黒十字印で示してある。中心から遠いところから $[112]$ 、 $[113]$ 、 $[115]$ の順になっている。白十字はスクリーンから出ているが、 $[101]$ の位置である。 m は上に述べた理由により 2 とし計算している。(4)式は非常に簡単な式であり、合わせるようなパラメータも無いにもかかわらず良く一致している。また、始状態が s の場合には、終状態の m は 1 になるはずであり、(4)式から回転のずれは p からの光電子の場合の半分になるはずである。ここでは示さないが、 $2s$ 内殻からのパターンも測定し、そのピーク位置が (5)式で $m=1$ とした予想位置と良く一致していることも確認してある。

3. むすび

ここで観測されたピークの位置は、電子の回転運動の前方方向を示しており、この実験により、電子の原子核の回りの回転運動を見る事ができた事になる。電子の回転を見る事ができるようになった事に

より、色々な発展が期待できると思われる。自分の専門分野への応用として、光電子ホログラフィーに替わる新しい表面構造決定法を考えついた所である。読者の方々にもそれぞれの分野で色々な応用を考えて頂けると幸いである。

また、この実験では、非磁性の非光学活性物質において円二色性が測定されている。このことは、光電子を使って円二色性を研究するときには、ここで述べたような効果を考えなければならない事を意味している。また、従来の光電子回折の計算においてはこのような回転は考えていなかったので、より進んだ式をたてる必要が出てきている。

引用文献

- 1) H. Daimon, T. Nakatani, S. Imada, S. Suga, Y. Kagoshima, and T. Miyahara: Jpn. J. Appl. Phys. 32 (1993) Pt. 2, L 1480.
- 2) H. Daimon, and S. Ino: Rev. Sci. Instrum. 61 (1990) 57.