

## 論文審査の結果の要旨

元木 創平

本論文は10章で構成されている。第1章から第4章は、それに続く章の共通事項について述べられている。すなわち、第1章では序論として分子の内殻光電離過程研究の歴史的背景と現状および研究目的が、第2章では配向分子からの光電子の角度分布の理論が、第3章では実験方法が、そして第4章では実験データの解析方法が述べられている。第5章から第9章は、研究課題毎にその研究成果が述べられている。そして、第10章には研究成果全体の要約がまとめられている。以下に研究成果の概要を記す。

第5章：N<sub>2</sub>分子の2σ<sub>g</sub>光電離における形状共鳴メカニズムを解明するために、左右楕円および直線偏光放射光を使い、形状共鳴のエネルギー領域で、配向N<sub>2</sub>分子からの2σ<sub>g</sub>光電子の角度分布測定を行なった。角度分布の実験データを解析することによって、光電離チャンネルに寄与するpσ, fσ, pπ, fπ部分波に対する遷移行列要素とそれらの位相差をユニークに決定した。その結果、形状共鳴領域ではfσ部分波に対する遷移行列要素が増大すると同時に、fσとpσの部分波の位相差が約πラジアン増大することを発見した。すなわち、2σ<sub>g</sub>光電離における形状共鳴は、fσ部分波のシングル・チャンネルの共鳴である明確な実験結果を初めて示した。

第6章：CO分子のC1sおよびO1sの光電離チャンネルに現れる形状共鳴メカニズムを解明するために、直線偏光放射光を使い、形状共鳴のエネルギー領域で、放射光の電気ベクトルに対して平行及び垂直に配向したCO分子からのC1sおよびO1s光電子の角度分布測定を行なった。角度分布の実験データを解析することによって、lσ部分波に対する遷移行列要素とそれらの位相差、およびlπ部分波に対する遷移行列要素とそれらの位相差を決定した。その結果、C1sの光電離では、共鳴領域でdσ, fσ部分波に対する遷移行列要素が増大し、O1s光電離では、共鳴領域でsσ, pσ, dσ, fσ部分波に対する遷移行列要素が増大することを発見した。この実験結果により、CO分子の形状共鳴は、多チャンネルの共鳴であることを解明した。また、Cooper極小を、いくつかのチャンネルに明確に見出すことに初めて成功した。

第7章：二原子分子と三原子分子の形状共鳴メカニズムの違いを解明することを目的として、放射光の電気ベクトルに対して平行に配向したCO<sub>2</sub>分子からのC1s光電子の角度分布測定を行なった。角度分布の実験データを解析することによって、lσ<sub>u</sub>部分波に対する遷移行列要素とそれらの位相差を決定し

た。CO<sub>2</sub>分子の形状共鳴に強度を与える 4σ<sub>u</sub> 非占有分子軌道の SCF 計算の結果、hσ<sub>u</sub> 部分波に対する有効ポテンシャルの形状および多重散乱理論の計算結果から、C 1 s の形状共鳴のメカニズムを次のように解釈した。hσ<sub>u</sub> 部分波がポテンシャル障壁によって分子領域にトラップされるが、部分波の間の強いカップリングに誘起され、pσ<sub>u</sub> と fσ<sub>u</sub> 部分波がポテンシャル障壁から逃げ出し、それらが遠方での光電子の波動関数を形成する。

第 8 章：重原子が含まれた分子の形状共鳴のメカニズムを解明するために、第 7 章と同様な実験を OCS 分子の C1s 光電離過程について行なった。ここでは、多くの部分波が光電離のチャンネルに寄与するために、遷移行列要素と位相差の解のセットは多数得られた。そこで、遷移行列要素のエネルギー依存性が最もなめらかになるものを正しい解とした。その結果は、dσ部分波の遷移行列要素が共鳴領域で増大するものとなった。12σ非占有分子軌道の SCF 計算の結果、および iσ部分波に対する有効ポテンシャルの形状から、C 1 s の形状共鳴は、iσ部分波が分子領域にトラップされるが、部分波の間の強いカップリングにより、S 原子サイトの局在した領域に dσ部分波がトラップされるものと解釈した。

第 9 章：OCS 分子のそれぞれの K-edge 吸収端で、対称性分離光吸収スペクトルを測定した。SCF 計算を行い、スペクトルの吸収構造を同定した。その結果、価電子軌道とリドベルク軌道の混成が強く起こっていることを発見した。

なお、本論文第 5 章は、足立・伊藤・石井・副島・柳下・Semenov・Cherepkov との共同研究であり、第 6 章は、足立・彦坂・伊藤・佐野・副島・柳下・Raseev・Cherepkov との共同研究であるが、論文提出者が主体となって実験及び解析を行なったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。また、投稿予定となっている本論文第 7 章・第 8 章・第 9 章も共同研究の成果であるが、論文提出者が主体となって実験及び解析を行なったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。