

## 審査の結果の要旨

氏名 吉田 芙美子

本論文はベリリウム原子の光励起に関する放射光を用いた実験および数値解析に関する研究で 6 章より構成されている。

第 1 章は序論で、研究の背景と目的を述べている。ベリリウム原子の特徴について化学的性質などを紹介するとともに、その基底状態の電子配置( $1s^2 2s^2$ )からの光励起により期待される知見についてまとめている。あわせて少数電子系原子 (He, Li) の放射光を用いた光励起研究について既往の研究を概観しているとともに 4 電子系への拡張との関連性について論じている。

第 2 章では原子構造を記述するために必要となる理論について記述している。原子物理における波動関数にはじまり、光励起による自動イオン化準位のスペクトルで特徴的な非対称形状となる Fano プロファイルについて、離散準位と連続状態の干渉効果によることを既往の研究に沿ってまとめ、実験と対比する際に必要となるパラメータを整理している。

第 3 章では外殻電子の光励起状態の解析についてまとめている。ベリリウム原子の外殻電子( $2s^2$ )を光励起することにより、2 電子系ヘリウム原子( $1s^2$ )との対比が可能となることなど実験の意義を明らかにした後、実験装置の説明を行っている。真空容器は電子衝突加熱オーブン、放射光・原子相互作用領域、飛行時間型(TOF)質量分析器から構成されていることが説明している。これにより価数に応じた( $Be^+$ ,  $Be^{2+}$ )スペクトルを取得することが可能となる。さらに本研究で利用された放射光施設として高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 放射光科学研究施設(KEK Photon Factory)を概観し、さらに本実験で必要とされる 20 eV 付近のビームラインである BL-20A について紹介している。これらの装置により、本実験で焦点を当てている  $3snp$  Rydberg 系列の光イオン化スペクトル( $Be^+$ )を観測している。これら共鳴状態のエネルギー値、半値幅、Fano パラメータを Fano の公式をフィッティングすることにより導出するとともに、 $3p4s$  を摂動項として確認している。さらにそのスペクトル形状を既往の R-matrix 計算および超球座標系計算から得られるスペクトルと比較することで、摂動項の影響を評価している。

第 4 章では内殻電子の光励起状態の解析についてまとめている。ベリリウム原子の内

殻電子( $1s$ )を光励起することにより 3 あるいは 4 電子の相関を示す共鳴状態の観測およびその同定を高分解能分光で行うとともに、既往の計算例との比較を行うことが述べられている。ここでは特に 4 つのイオン化限界( $1s(2s2p\ ^3P)$ ,  $1s(2s2p\ ^1P)$ ,  $1s(2s3s\ ^3S)$ ,  $1s(2s3s\ ^1S)$ )に収斂する Rydberg 系列に着目して実験を行っている。本実験で用いている KEK PF のビームライン BL-16B を紹介しており、120 ~140 eV の光子を利用している。実験の結果、多くの新たな共鳴状態を観測しており、それらについてエネルギー値、半値幅、Fano パラメータなどの導出を行っている。これらについて議論しているとともに、エネルギー値よりイオン化限界値の導出も行っている。これらの共鳴状態は既往の計算例との比較により同定を行っているが、特に高エネルギー側において同定ができない状態が多く観測されていることを明らかにした。

第 5 章では内殻励起状態を明らかにするための数値計算についてまとめている。ベリリウム原子の励起状態の理論計算および数値解析について既往の研究をまとめており、本研究では Multi Configuration Dirac-Fock(MCDF)法を用いている。計算手順についてまとめられており、基底状態のエネルギー値を計算には 14,000 程度の配置関数(configuration state function:CSF)を用いており、励起状態には 2,000 程度の CSF を用いている。しかしながら、計算資源の制限より振動子強度の計算において基底状態は 38 の CSF を用いている。計算の結果、基底状態エネルギーは高い精度で計算出来ており、基底状態には  $1s^22s^2$  が約 91% に対して  $1s^22p^2$  が約 9% 含まれていることを明らかとした。さらに振動子強度の計算より、強度の大きい準位および( $1s2s3p\ ^2P$ ) $nl$  の Rydberg 系列を同定することができた。

第 6 章は結論であり、本研究のまとめが述べられている。

以上を要するに、本論文は 4 電子のベリリウム原子を対象として、放射光により光励起された状態を飛行時間型質量分析装置により観測することで、内殻および外殻電子が励起された共鳴状態のエネルギー値を測定するとともに、数値解析によりその共鳴状態を同定し、4 電子系での電子相関について新たな知見を見いだしている。こうした成果はシステム量子工学の進歩に貢献することが少なくない。よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。