

軌道磁気量子数計測：現象の理解と応用

松井文彦

奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科 630-0192 奈良県生駒市高山町 8916-5

(2017年6月26日受付；2017年8月7日掲載決定)

Magnetic Orbital Quantum Number Measurements : Phenomena and Applications

Fumihiko MATSUI

Nara Institute of Science and Technology, Graduate School of Materials Science, 8916-5 Takayama-cho, Ikoma, Nara 630-0192

(Received June 26, 2017 ; Accepted August 7, 2017)

Core-level photoelectron diffraction provides element-specific atomic structure information. Forward focusing peaks (FFPs) indicate the directions of atoms surrounding a photoelectron emitter atom. When a core level is excited by circularly polarized light, angular momentum of light is transferred to an emitted photoelectron, which can be confirmed by the parallax shift measurement of FFP direction. Here I report the new observation and quantitative analysis of the angular momentum transfer from light to Auger electrons, and compare them with the photoelectron cases. Angular-momentum-polarized Cu *LMM* Auger electrons at the *L* absorption threshold, where the excited core electron is trapped at the conduction band, were detected. By setting an analyzer at the corresponding position in the FFP direction, the Auger electron with a specific angular momentum can be selectively detected. In the case of magnetic materials, circular dichroism in the X-ray absorption intensity was observed together with angular momentum transfer (parallax shift) effect.

KEYWORDS : photoelectron diffraction, Auger electron, circular dichroism, atomic orbital, XANES

1. はじめに

原子同士が結合し、結晶格子を組むと、電子は相互作用をもとに分子軌道やバンド分散を形成し、多彩な電子物性が発現する。角度分解光電子分光はエネルギー・運動量保存則に基づき、特に電子の遍歴的な振る舞いを詳細に調べる手法である。他方、物質の機能は結晶中の異種原子や界面、特殊なナノ構造から生まれる。原子軌道の四つの量子数（主・方位・軌道磁気・スピン）のうち、軌道磁気量子数は局所的な対称性を反映する。軌道磁気量子数は格子の歪みに敏感に反応し、スピン・軌道相互作用を通じて磁性の起源ともなり、また触媒反応における選択性を設計する上で要となる物理量である。本稿では、角運動量保存則に基づき、内殻励起で軌道磁気量子数を分析する方法について議論する。

局所電子状態を調べるためには、サイト選択的なプロ

ーブが必要となる。局在した内殻準位から放出される光電子強度角度分布（photoelectron intensity angular distribution, PIAD）には、励起原子からの参照波 ψ_0 と周囲の原子の散乱による物体波 ψ_{scat} が干渉し、光電子回折模様（ホログラム）として原子配列の立体的な情報が記録される。励起原子から隣接原子の方向に前方収束ピーク（forward focusing peak, FFP）が現れ、その周りの回折リングの開き角から原子間距離が算出できる。また最新のホログラフィーアルゴリズム¹⁾を用いて立体的な原子配列像が再現できる。Fig. 1はグラファイト層間化合物の原子配列像再生の例である²⁾。

異なる光電子放出原子サイトからの FFP や回折リングは異なる方向に現れる。周囲の原子の方向を指し示す回折模様から逆に励起原子のサイトを特定し、光電子を局所情報と対応付けることができる。回折分光法では原子構造解析と同時にサイト選択的な電子状態の解析を行う。光電子スペクトルには電子の平均自由行程で決まる脱出深さの範囲内にある全原子の情報が混ざっている