

# 気相分子の内殻ホール移動過程

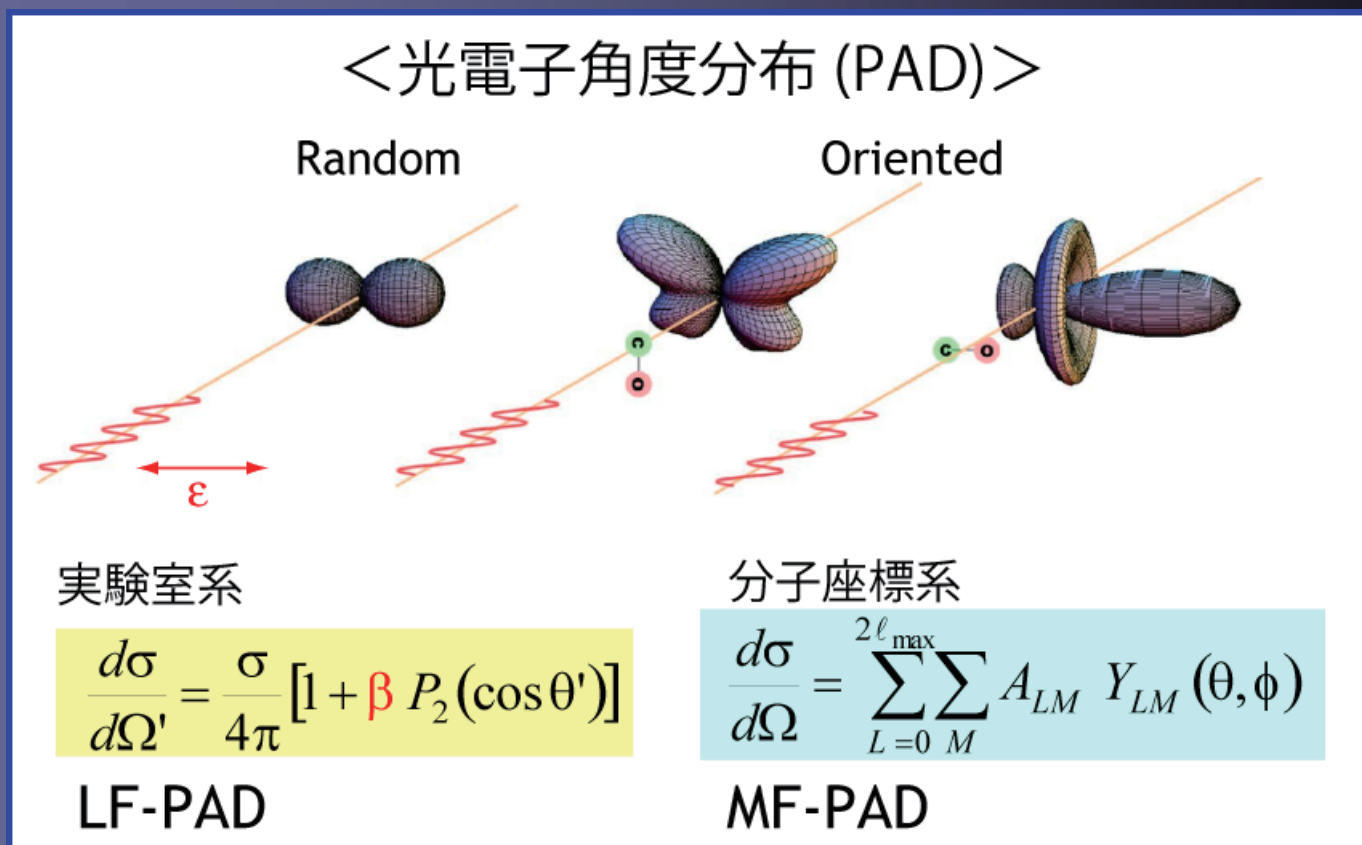
(東北大学 多元物質科学研究所)

山崎優一

# Core-level Photoemission of Molecules in Gas Phase

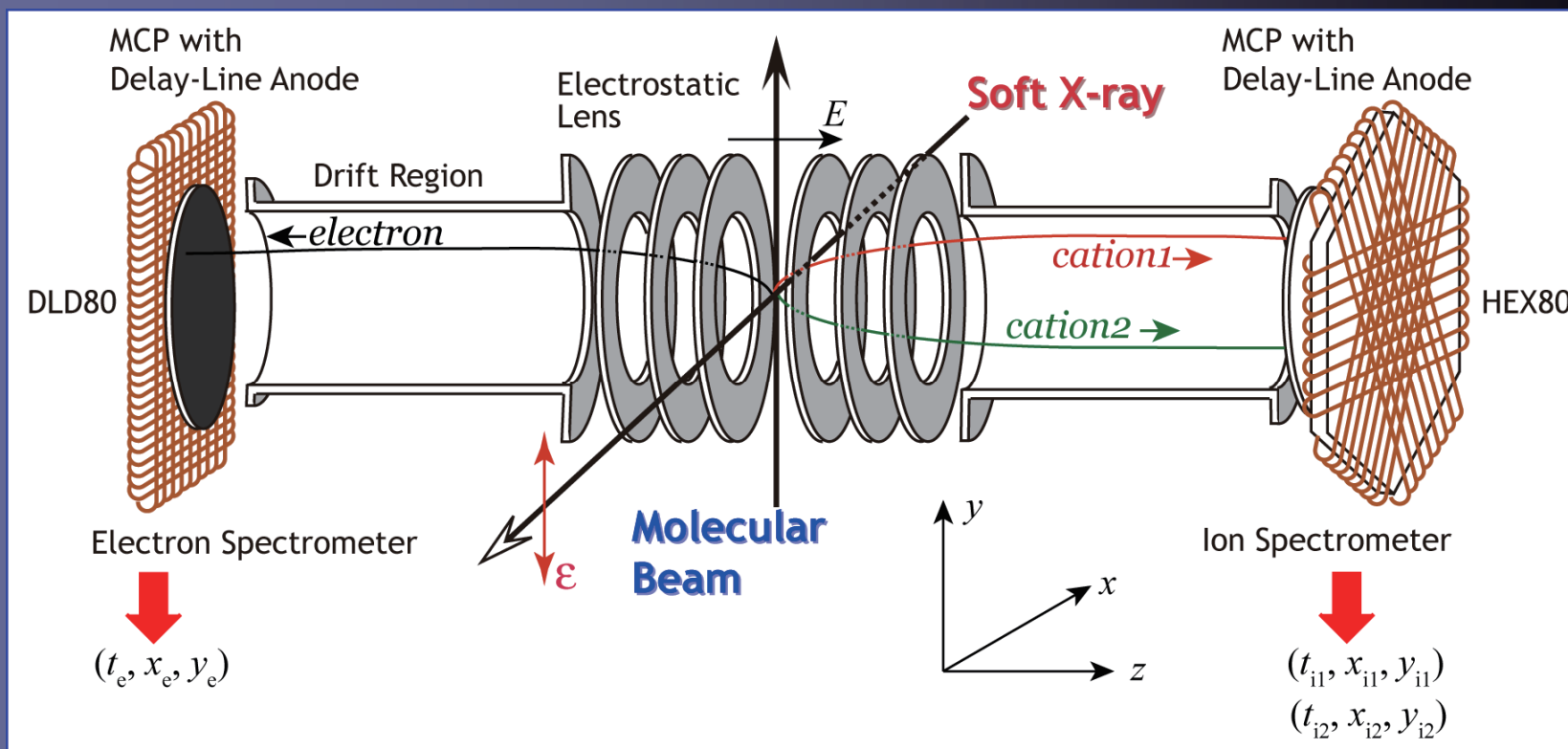


における分子配向効果・立体ダイナミクス



# COincidence Velocity-map Imaging Spectrometer: CO-VIS

K. Hosaka *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **45** (2006) 1841.



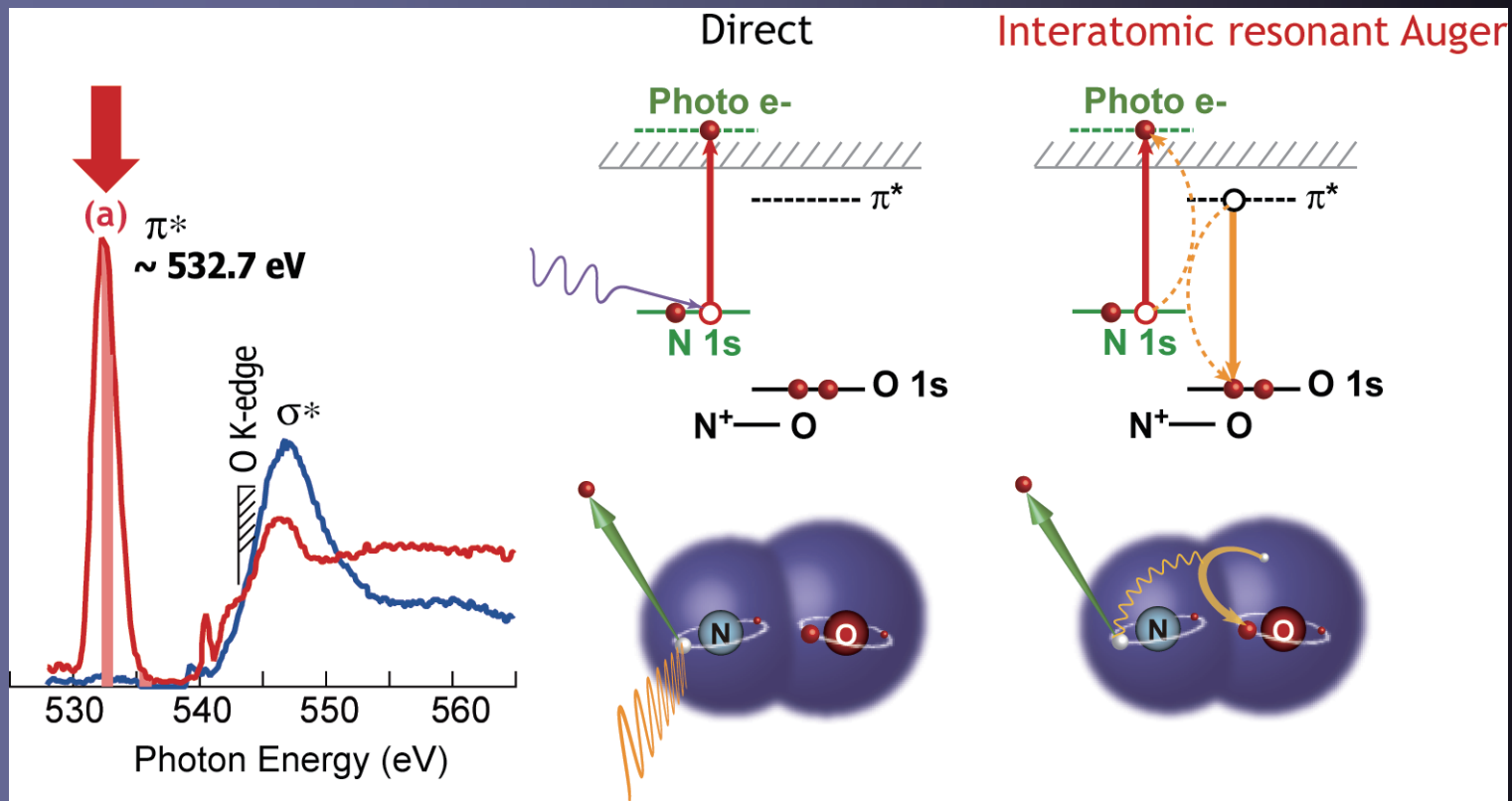
荷電粒子の運動量

$$p_z \propto (t - t_0)$$

$$p_x \propto x/t$$

$$p_y \propto y/t$$

# Inter-atomic Resonant Auger



Off-resonance: Direct

On-resonance: Direct + Resonant Auger

# Intensity Difference between on- and off-resonance

- On-resonanceでのN 1s光電子強度,  $I_{\text{Res}}(\text{N}1s)$

$$\begin{aligned} I_{\text{Res}}(\text{N}1s) &\propto \left| \underbrace{D_{\text{N}1s}}_{\text{Direct}} + \underbrace{VD_{\text{O}1s}}_{\text{Resonant Auger}} \right|^2 \\ &= |D_{\text{N}1s}|^2 + 2\text{Re}(D_{\text{N}1s} \cdot VD_{\text{O}1s}) + |VD_{\text{O}1s}|^2 \\ &\approx |D_{\text{N}1s}|^2 + 2\text{Re}(D_{\text{N}1s} \cdot VD_{\text{O}1s}) \end{aligned}$$

∴ F. J. García de Abajo *et al.*,  
*Phys. Rev. Lett.*, **82** (1999)  
4126.

- Off-resonanceでのN 1s 光電子強度,  $I_{\text{Off}}(\text{N}1s)$

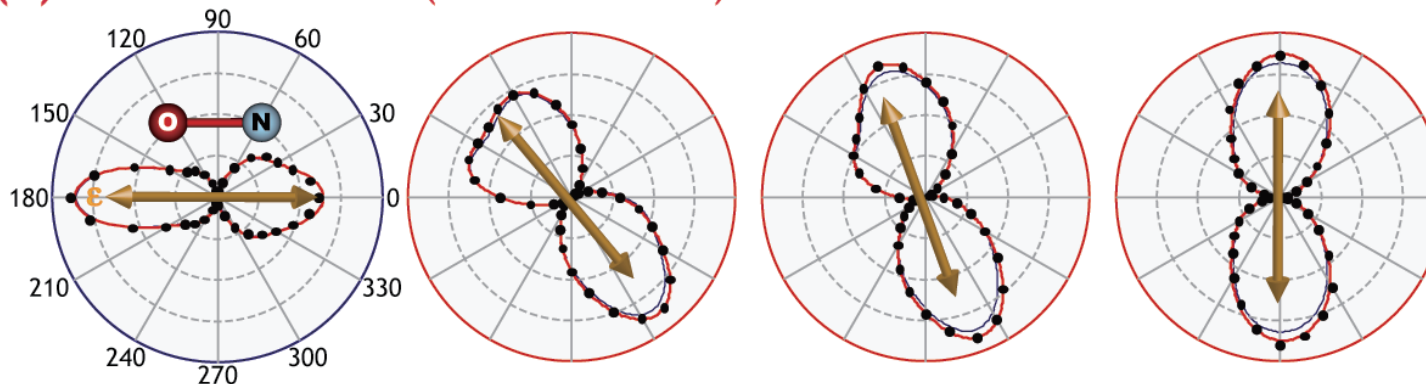
$$I_{\text{Off}}(\text{N}1s) \propto |D_{\text{N}1s}|^2 \quad (\text{Direct photoemission})$$

- 差分として観測される量

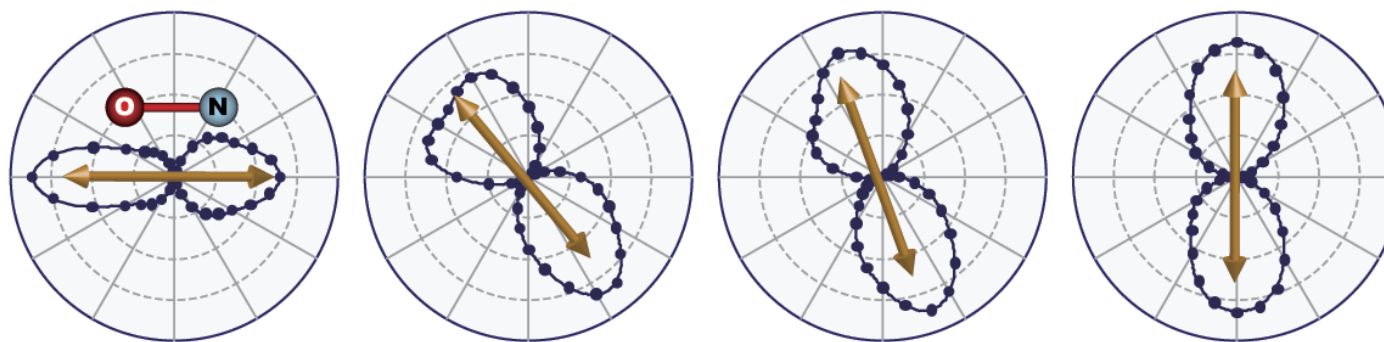
$$I_{\text{Res}}(\text{N}1s) - I_{\text{Off}}(\text{N}1s) = \underbrace{2\text{Re}(D_{\text{N}1s} \cdot VD_{\text{O}1s})}_{\text{Interference term}}$$

# N 1s $e^-$ Angular Distributions for Arbitrary Configurations

(a) On-Resonance (the  $O1s \rightarrow \pi^*$ )

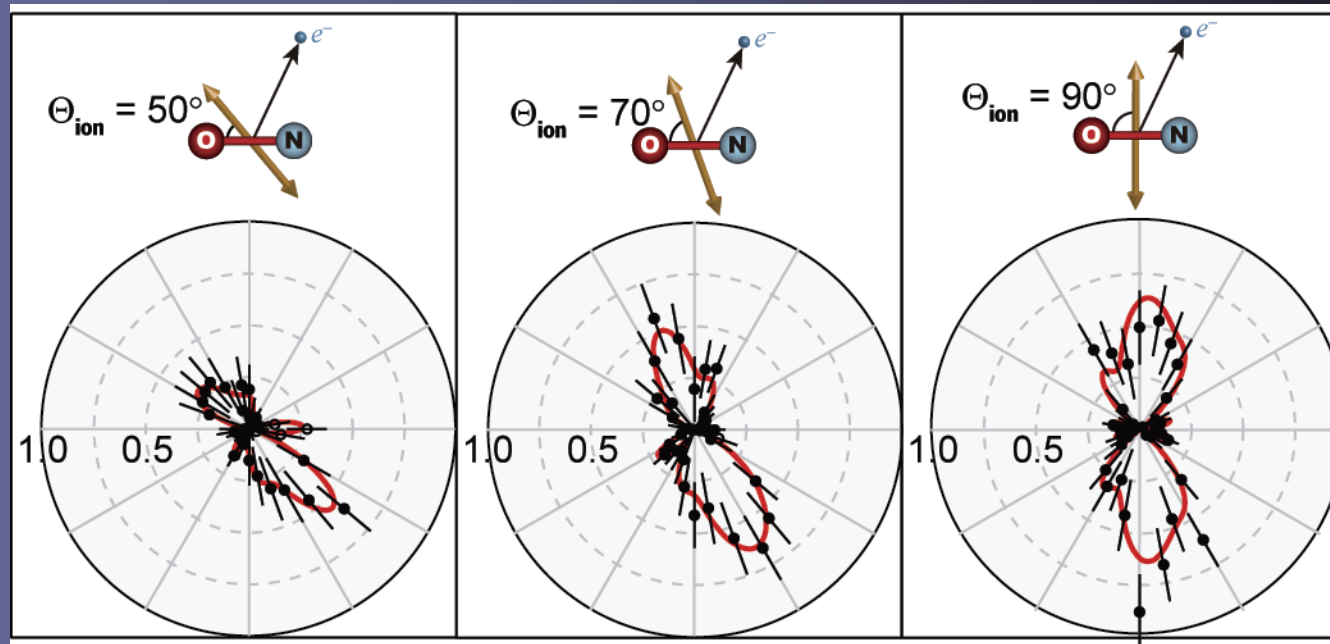


(b) Off-Resonance



- 偏光ベクトルの方向に強く放出される

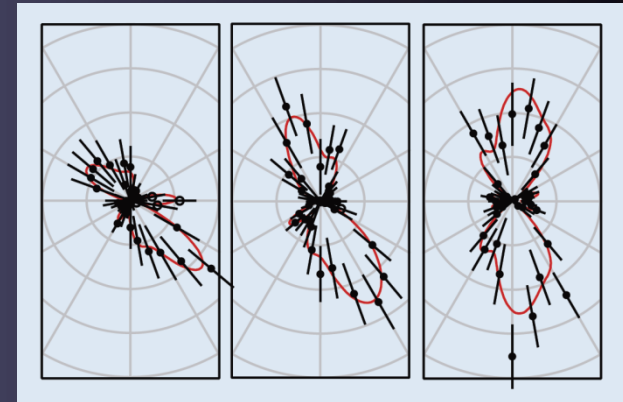
# Angular Distributions of the Interference Term ( $D_{N1s} \cdot VD_{01s}$ )



- 偏光ベクトルの方向で強い (効果)  
 $\longleftrightarrow$   $D_{N1s}$  depends on the polarization geometries.
- 分子軸方向に節:  
 $\longleftrightarrow$   $VD_{01s}$  is a p-type shape.

# Summary: interatomic resonant Auger

- NO分子のN 1s 光電子放出に対する隣接O原子の内殻光吸収の影響を、分子座標系光電子角度分布 (MF-PAD) 測定によって調べた。
- 原子間共鳴オージェ効果は、直接光電離チャンネルとの干渉を通して現れることを明らかにした。
  - 偏光ベクトルの方向で強い (Direct)
  - 分子軸方向に節 (Auger)
- MF-PADは原子間共鳴オージェのように極めて微弱な効果に対しても敏感かつ詳細な情報を提供し、関連現象の理解に有用。



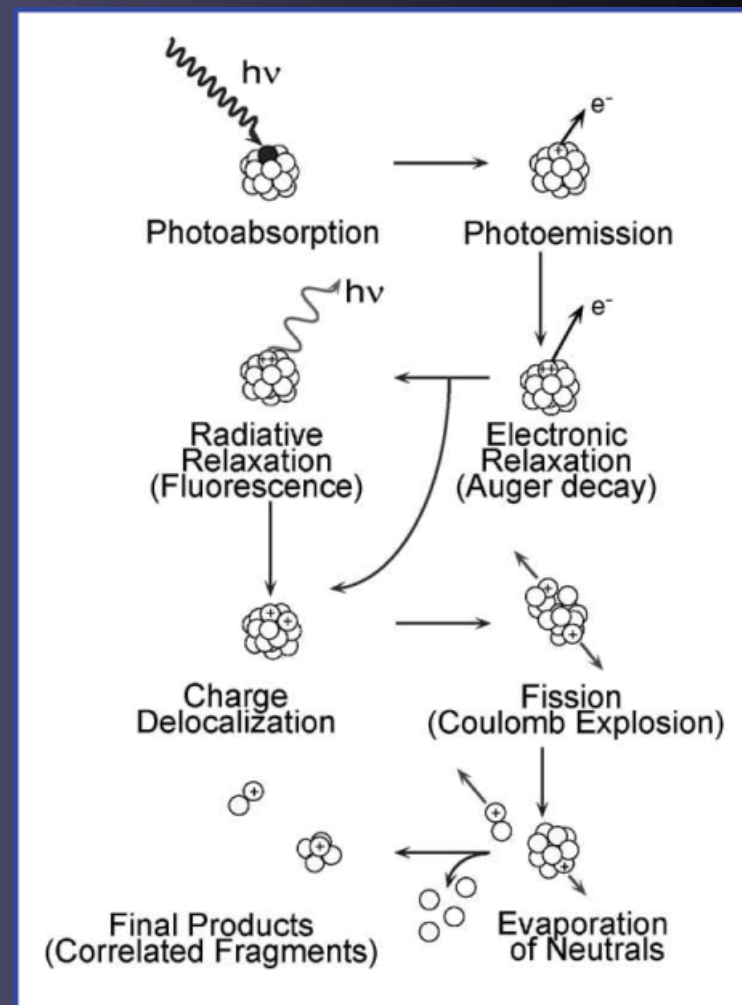


# Core-level Photoionization of Ne Dimer

- 弱いvan der Waals相互作用系  
内殻ホールの移動過程？

- 内殻電離後の様々な脱励起過程の理解
  - 解離パターン？
  - 生成のメカニズム？
  - タイムスケール？
  - Interatomic Coulombic Decay?

光電子角度分布で何が見えるか？



E. Rühl, *Int. J. Mass Spectrosc.* **229** (2003) 117.

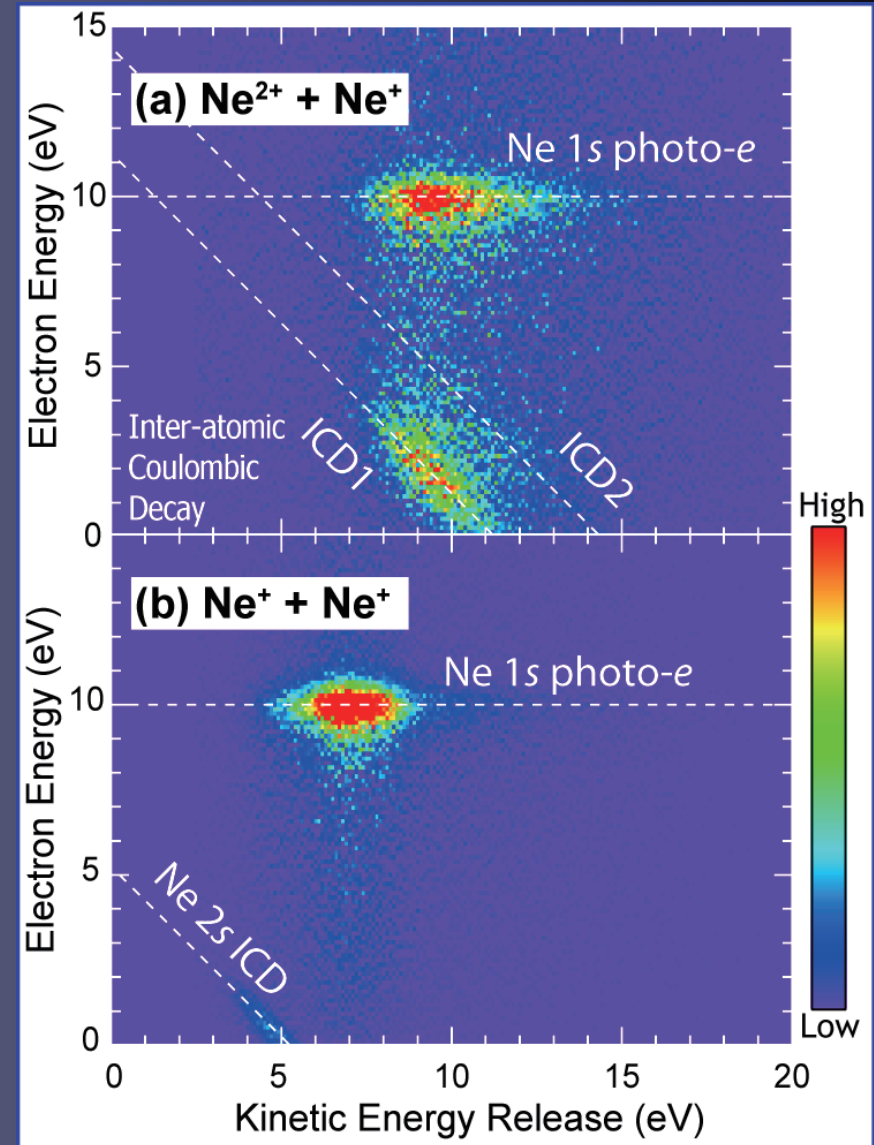
# Correlation between $E_e$ and KER

- $\text{Ne}_2 + h\nu \rightarrow \text{Ne}^{2+} + \text{Ne}^+$ 
  - 10 eV Ne 1s 光電子
  - ICD電子
  
- $\text{Ne}_2 + h\nu \rightarrow \text{Ne}^+ + \text{Ne}^+$ 
  - 10 eV Ne 1s 光電子

Ne 1s光電子と解離イオンの  
運動量ベクトル相関？

(a)  $\text{Ne}^{2+} + \text{Ne}^+$  pair?

(b)  $\text{Ne}^+ + \text{Ne}^+$  pair?



# Ne 1s Photoelectron Angular

## Distributions

### ■ Ne<sup>2+</sup> + Ne<sup>+</sup> Channel

反転対称性が破れたMF-PAD

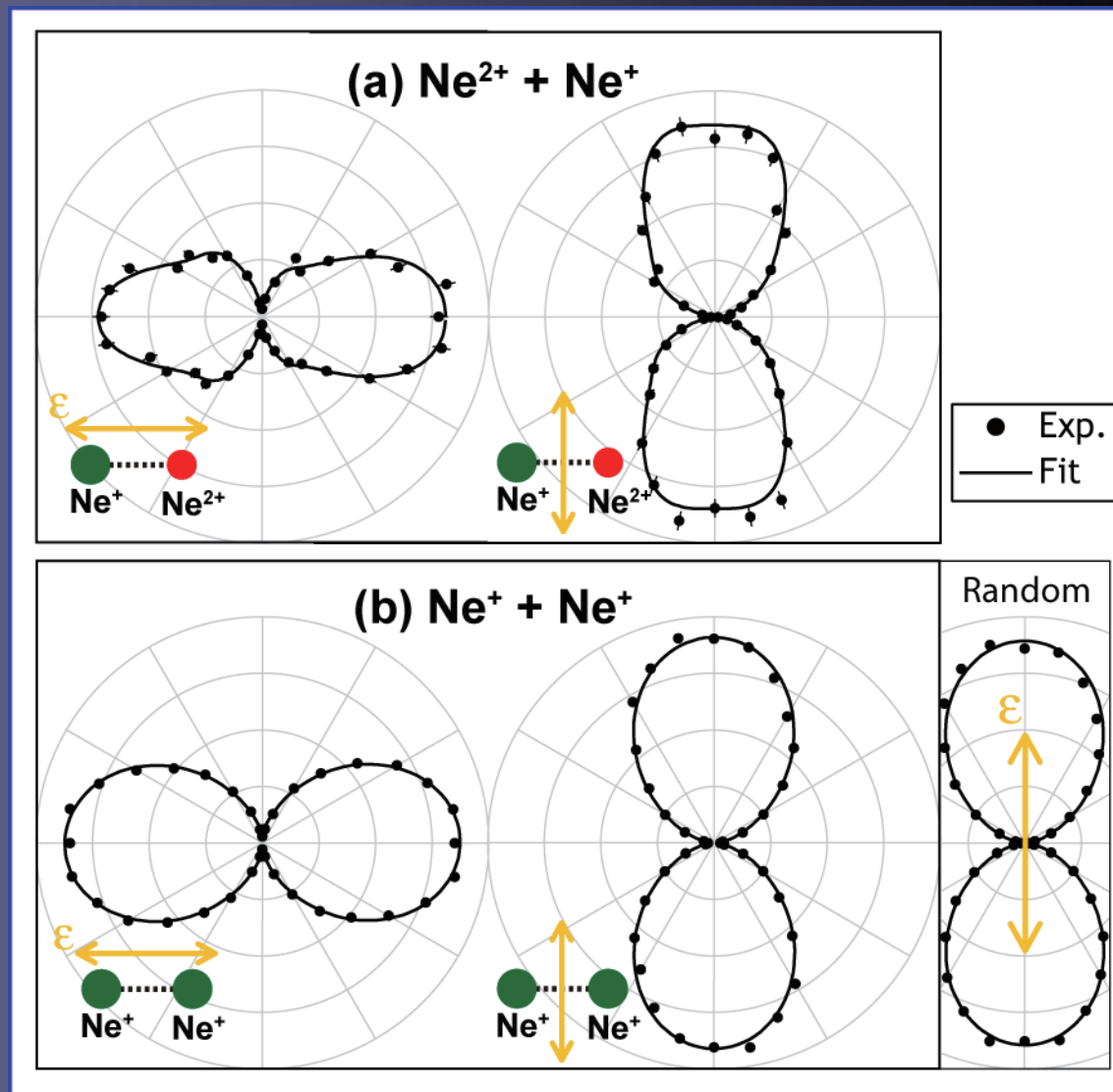
局在した内殻ホールの影響 (Fast dissociation)

### ■ Ne<sup>+</sup> + Ne<sup>+</sup> Channel

ランダム配向のPAD

運動量ベクトル相関の消失 (Slow dissociation)

## Mechanism?



# Summary: Core-hole localization and photodissociation pathways in vdW dimer

- CO-VISによりNe<sub>2</sub>の内殻光電離・光解離ダイナミクスを調べた。
- 解離チャンネルに依存したPADsの観測
  - Ne<sup>+</sup> + Ne<sup>2+</sup> (~0.1ps): MF-PAD
  - Ne<sup>+</sup> + Ne<sup>+</sup> (~ns): LF-PAD
- PADは内殻ホールの局在性、解離のダイナミクスを反映

