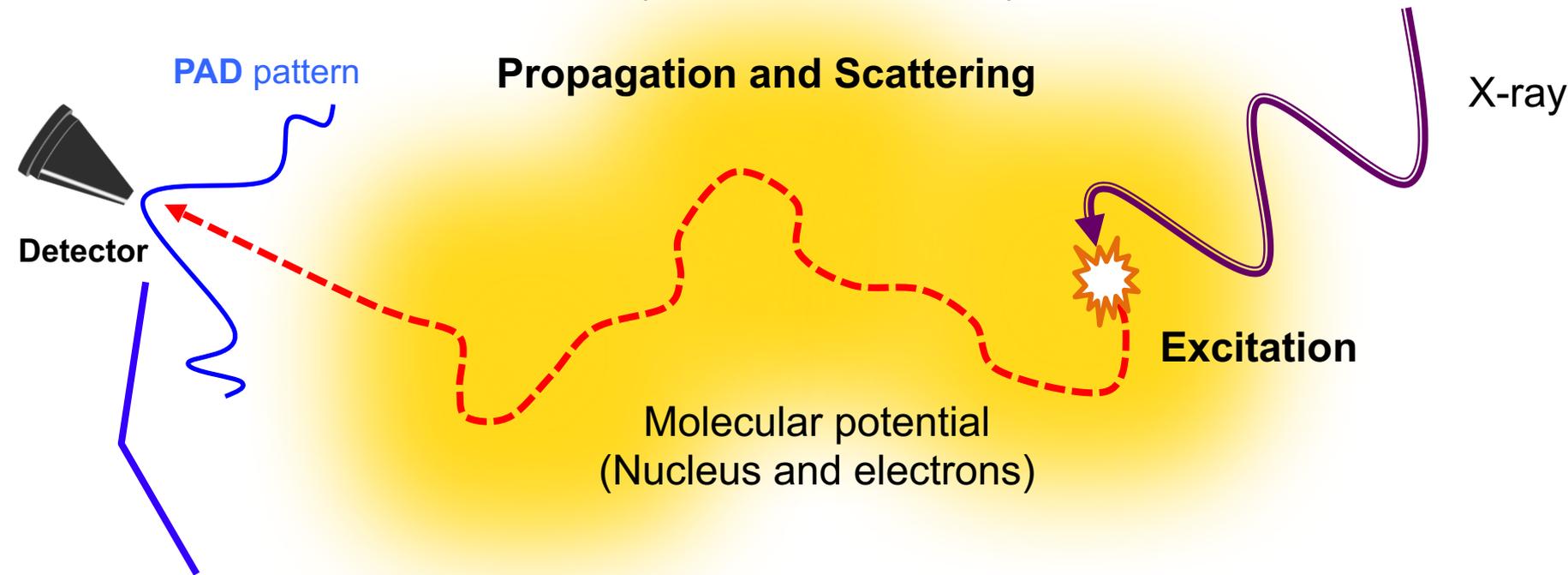


多重散乱理論に関連した研究事例の紹介  
気体分子の光電子角度分布

千葉大学大学院 融合科学研究科  
ナノサイエンス専攻 ナノ物性コース

太田 落子

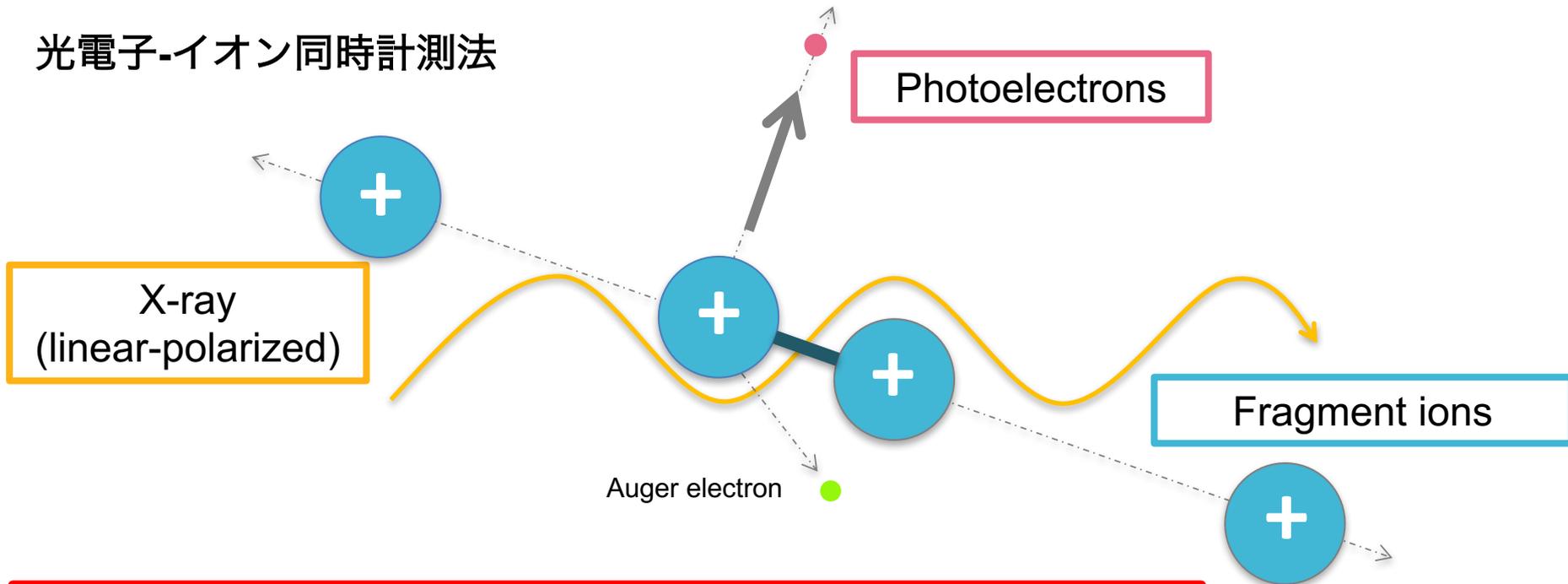
# PAD : Photoelectron Angular Distributions (光電子角度分布)



PAD はポテンシャル構造を反映する。  
→ PADを解析することにより、幾何構造に関する情報を得られる。

# MFPAD : Molecular Frame Photoelectron Angular Distributions

光電子-イオン同時計測法

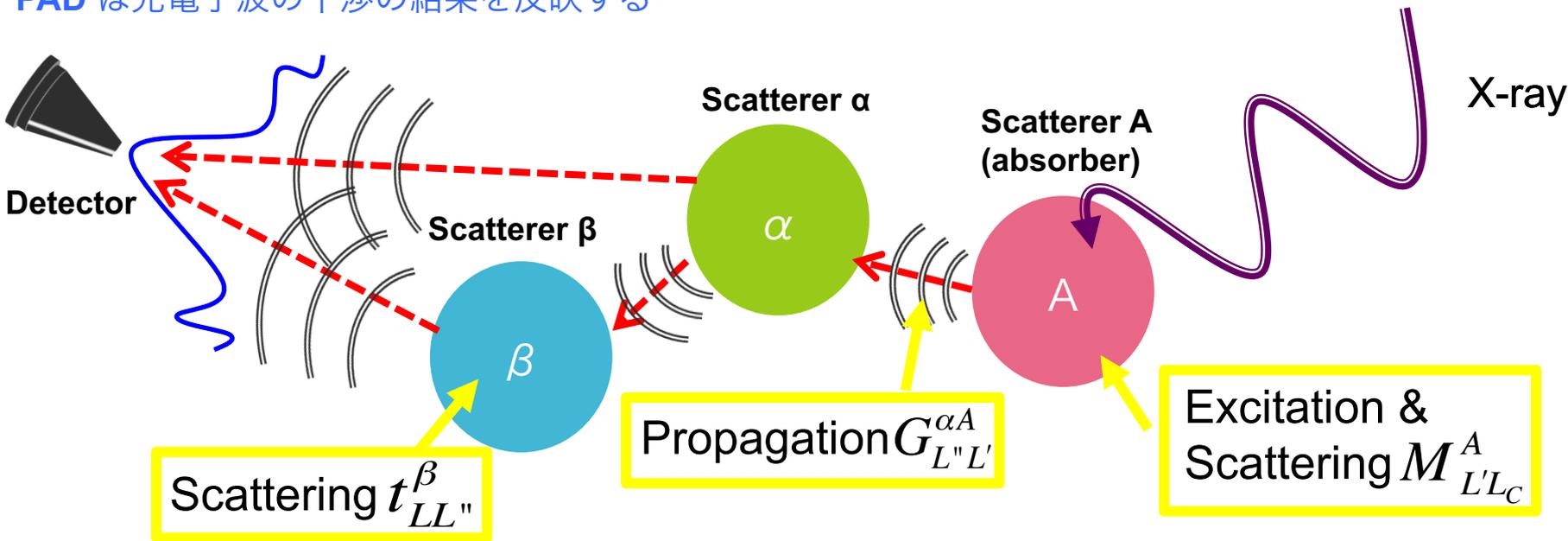


光電子とフラグメントイオンを同時計測することにより、分子軸に対するPADを得ることができる。

# Multiple Scattering theory

→連続状態を正しく記述できる

PAD は光電子波の干渉の結果を反映する



系をどのように分割するか?

## 研究目的

より精度の良いPAD計算手法を確立する。  
ポテンシャル構造がPADパターンに与える影響を考察する。

## 研究方法

分子全体の  
ポテンシャルを作る

分子ポテンシャルを  
サイトに分割する

多重散乱計算  
を行う

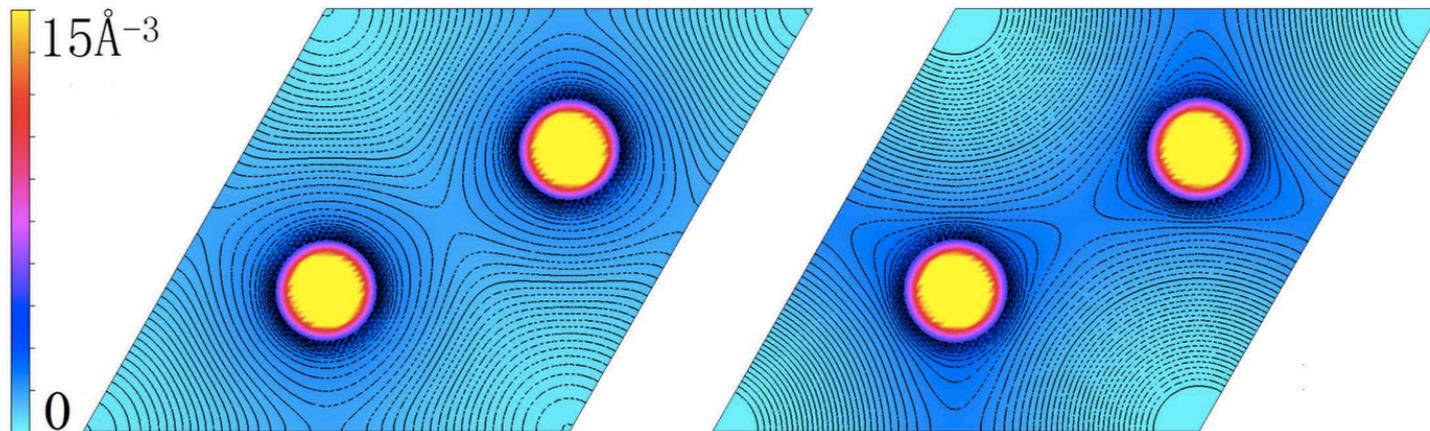
分子ポテンシャルとして、  
**non-SCFポテンシャル** と **SCFポテンシャル** を用いた計算を行い、比較する。  
ポテンシャルの取り扱いについて、  
**Muffin-tin近似** と **Full-potential法** を用いた計算を行い、比較する。

# 分子全体の ポテンシャルを作る

分子ポテンシャルを  
サイトに分割する

多重散乱計算を行う

## Charge density of the graphene unit cell



**Non- SCF**

自由原子の電子密度および  
ポテンシャルの重ね合わせを用いる  
→共有結合の様子は考慮されない。

**SCF**

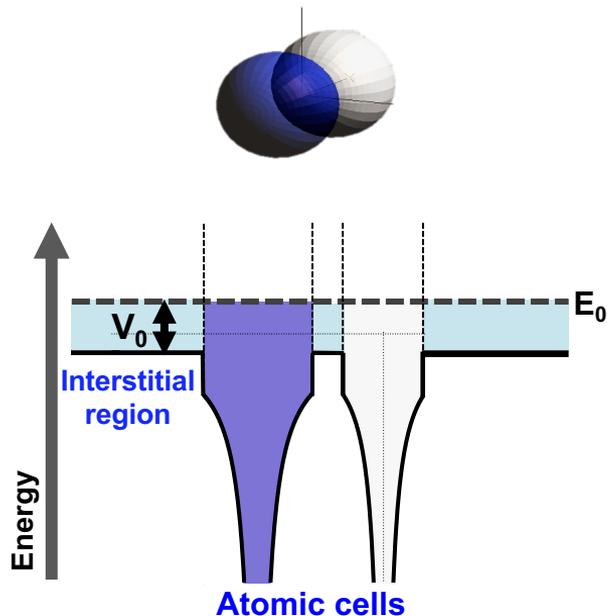
**自己無撞着**に求める  
(Self-Consistent Field)  
→**共有結合**の生成による電子密度  
およびポテンシャルの変化を考慮できる。

分子全体の  
ポテンシャルを作る

分子ポテンシャルを  
サイトに分割する

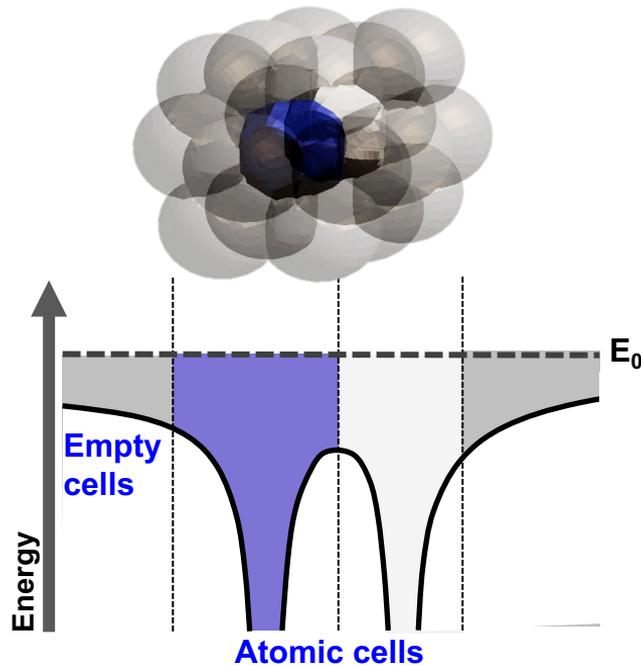
多重散乱計算を行う

## Muffin-tin 近似 (MT)



各サイトのポテンシャルを球平均する  
サイト外では一定とする  
→ポテンシャルの微細構造は失われる

## Full-potential法 (FP)



各サイトのポテンシャルを**厳密に扱う**  
→ポテンシャルの**微細構造を考慮できる**

# 計算方法

**FPMS** main developer : K. Hatada

A calculation code for the full-potential multiple scattering calculation, which focuses on the calculations of XANES spectra but can also calculate projected DOS and Resonant X-ray elastic Scattering.

Cooperating codes:

- MsSpec (Interface to full potential version)
- MXAN (XANES structural fitting code, extension to Full potential version)
- ES2MS (Interface to electronic structure codes)

**MsSpec** main developer : D. Sébilleau

Fortran package to compute the cross-section of several spectroscopies involving one (or more) electron(s) as the probe.

Available spectroscopies :

- Photoelectron diffraction
- Auger electron diffraction
- Low energy electron diffraction
- X-Ray absorption spectroscopy
- Auger Photoelectron coincidence spectroscopy

