

陽電子消滅と材料科学

表記に関して、日頃思っていることを若い研究者や学生諸君に伝えたいと思う。陽電子消滅は、(1) 創成期：1960年代–1970年代, (a) 電子運動量分布, 特に合金や液体金属の電子状態 (フェルミ面やそのボケ) の測定, (b) 原子空孔, ボイドや転位など空孔型欠陥の検出, (c) ポジトロニウム (Ps) を利用した自由空孔寸法測定などの実験法として見出され, (2) 発展・定常期：1980年代から現在, 陽電子消滅 2 次元角相関 (2DACAR), 消滅ガンマ線の同時計数ドップラー広がり (CDB), 低速陽電子ビームなどの実験法の開発と相まって, 材料科学のユニークな実験法として発展してきたことは御承知のとおりである*).



東北大学名誉教授
長谷川 雅幸
Masayuki HASEGAWA

陽電子消滅が与えてくれる情報は、陽電子の消滅相手となる電子が与えてくれる陽電子–電子運動量分布や電子密度 (これらは陽電子の波動関数によって modify された電子の運動量分布や密度) に関してである。結晶中に入射され、熱化した陽電子の波動関数は結晶全体に広がった状態 (非局在状態) にある。このような場合の陽電子消滅が与える情報は、結晶全体についての電子状態に関するものと考えてよい。

一方、結晶中に空孔型欠陥があると、陽電子はその領域に敏感に捕獲 (空孔型欠陥捕獲) されてしまい、局在状態となることから、その領域のみの電子と消滅する。このような捕獲は、非常に敏感に起こる。例えば、純金属中の陽電子消滅は、原子空孔濃度で 1 ppm–100 ppm の範囲の空孔型欠陥の検出を得意とする。この濃度範囲が、熱空孔や照射損傷の研究分野での関心領域とほぼ一致していることなどから、これらの分野で不可欠の実験方法となってきた。

また、合金系で陽電子親和力の高い元素のクラスターや析出物 (ここでは簡単のためクラスターと総称する) が形成している場合、陽電子が敏感にそれらクラスターに捕獲 (陽電子親和力捕獲) され局在状態になる場合がある。顕著な場合には、溶質元素濃度が 1 % 程度以下の希薄合金でも、このような捕獲が顕著に起こることもあり、クラスターの形成過程や電子構造に関するユニークな情報を与えてくれる。

さて、このような陽電子消滅法は、材料科学の一般の研究者からどのような評価を受けているのであろうか？ 金属や半導体材料の研究者からは一定の評価を得ていることは間違いない。例えば金属の照射損傷の分野では、他分野の研究者が自ら陽電子寿命や CDB 実験を自らの実験方法の一つとして利用しているグループもある。その一方で、「陽電子消滅はぴったり照準があった場合には、材料のミクロな構造に関して非常にクリアな情報が得られるが、一般にはそうでない場合も多い」と指摘される先生がおられるのも事実である。ある場合には役立つが万能ではないとの評価であらうか。材料研究者に、我々の成果をもっとアピールしていく必要がある。

考えてみれば、1960年代–1990年代は、陽電子消滅単独の論文でも高く評価される場合もあったが、その後は他の実験手段、例えば金属では電子顕微鏡やアトムプローブ、半導体では電子スピン共鳴 (ESR) やフォトルミネッセンス (PL) を併用したり、第一原理計算による結果との詳細な定量的比較検討が望まれる時代に入っているのではと思う。陽電子消滅の研究者も材料研究者と同じ土俵の上で協力し、競争していかなければならない時代に入っている。陽電子消滅にとって、単独でも勝負できる創成期から、他の手法も併用駆使して材料研究に寄与する発展・定常期に入っているのではと思う。若者が、材料科学での評価を高めるために、再発展を遂げてくれることを切に願うものである。

* 誌面の都合で、表面関係や Ps を利用した研究については省略する。