

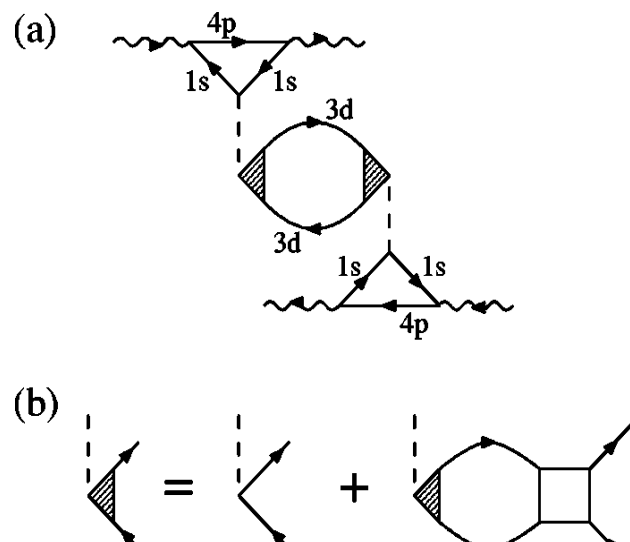
「遷移金属化合物における共鳴非弾性散乱の理論」

茨城大学理学部 五十嵐潤一

最近、強力な放射光を利用して、遷移金属 K 吸収端を用いた共鳴非弾性 X 線散乱(RIXS)実験が行われ、遷移金属化合物の電荷励起が調べられている。しかしながら、その散乱過程は、二次の光学過程で記述され複雑なため、そのスペクトルの起源を明らかにする理論的解析が重要になる。本講演では、その一般的枠組みを与える定式化[1]について La_2CuO_4 を例にとり議論したあと、擬一次元系の Sr_2CuO_3 の RIXS スペクトルの解析を実験と比較して議論する。最後に、最近実験結果が出た NiO の RIXS スペクトルについて議論する。

1. RIXS スペクトルの定式化 [1,2]

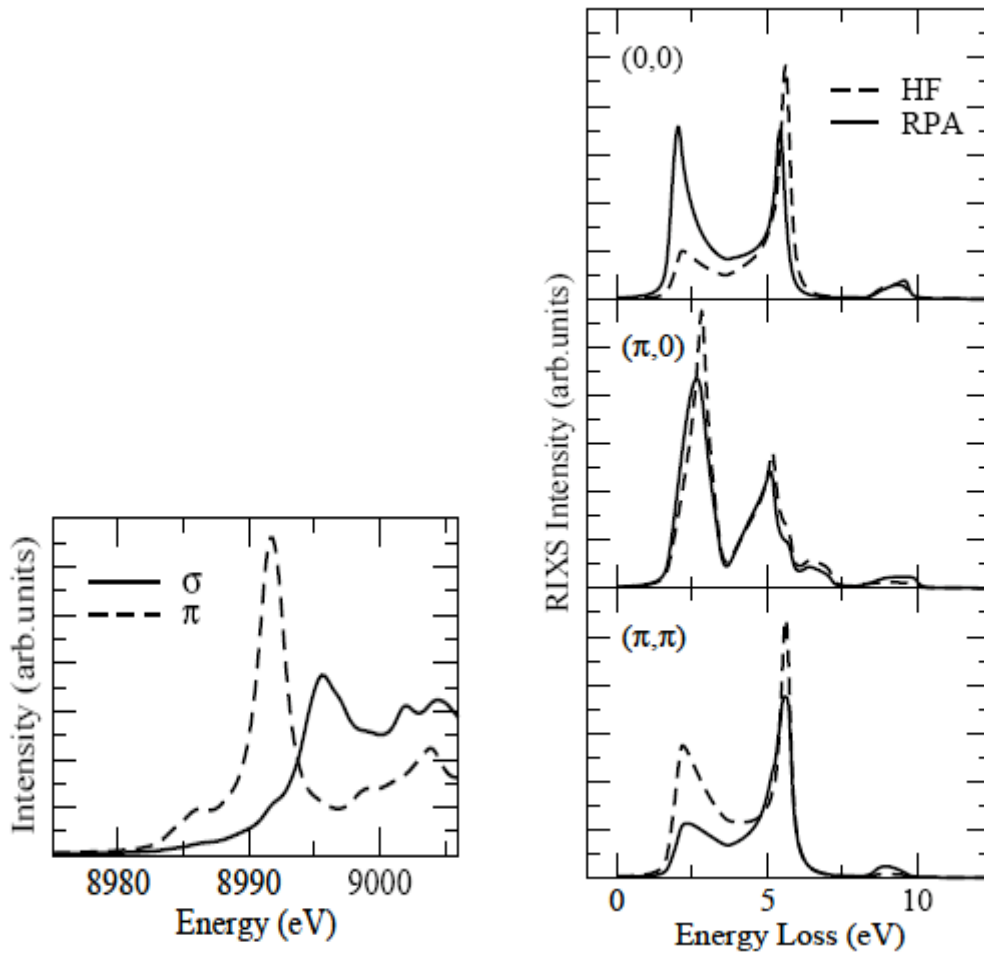
共鳴散乱スペクトル強度は下図にまとめられる。



図(a)は Keldysh 形式による diagram である。(b)は RPA による vertex 補正である。X 線の吸収により Cu 位置に 1s ホールと 4p 電子が作られ、1s ホールのポテンシャルにより 3d 電子-ホール対が作られる。引き続いて、4p 電子が 1s 状態に落ち込み X 線を放射する。終状態では 3d 電子-ホール対がのこる。

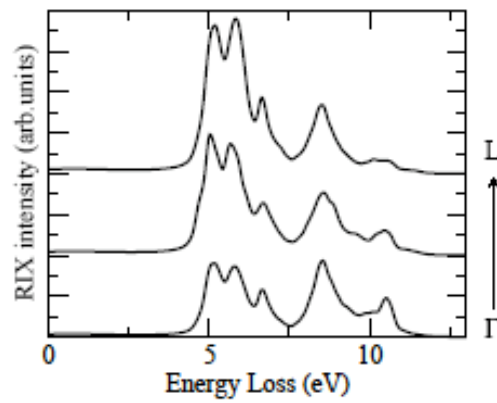
2. La_2CuO_4

$3d_{x^2-y^2}$ と $O2p$ 軌道を考慮した d-p 模型に基づき解析を行った。4p 状態はバンド計算に基づいた状態密度を用いて解析した。下図はバンド計算に基づく 4p 状態密度と、これに基づいてスペクトルの計算を行った結果である。実験結果[3]を半定量的に説明している。擬一次元系 Sr_2CuO_3 についても同様の解析を行い、実験とコンシステントな結果を得ている。



4. NiO

典型的な反強磁性体である。最近詳しい実験がおこなわれた。これに対して同様の解析を行った。下図にスペクトルの計算結果を示す。まだ HF 近似の範囲であるが、実験結果とよく対応していると思われる。



5. まとめと展望

RIXS の定式化を行い、 La_2CuO_4 , Sr_2CuO_3 , NiO に適用した。スペクトルは電荷励起に対応しており、その運動量依存性は 3d 状態密度の重みが増加していくものとして理解できる。反強磁性状態を仮定しているため、HF 近似はよい出発点になっていると考えられる。 La_2CuO_4 のスペクトルの $(0,0)$ と $(\pi,0)$ での違いは、RPA まで考慮しないととらえられない。本アプローチは、3次元系にも有効に適用できるとかんがえられ、その例として NiO のスペクトルの計算を示した。

今後の問題としては、第一に d-d 遷移の記述があげられる。本定式化では電子-ホール束縛状態として記述される。現在 NiO について計算が進行中である。第二は、ドーピングにより反強磁性相が壊れた場合の記述である。HF 近似はよい出発点にならないと思われる。この点についても計算が進行中である。

[1] T. Nomura and J. Igarashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 1677 (2004).

[2] T. Nomura and J. Igarashi, *Phys. Rev. B* **71**, 035110 (2005).

[3] Y. J. Kim et al., *Phys. Rev. Lett.* **89**, 177003 (2002).