# 相対論的XAFS,XMCD,XPD理論

千葉大学自然科学研究科、藤川高志

最近,重い原子からなる物質で興味ある物性を示す多くの物質が見つかっている。通常,相対論効果はヨウ素、キセノンより重い原子では本質的な役割を果たすと言われている。また放射光の進歩により強い光源が利用できるようになり、光がプローブとしてだけ振る舞うとしては扱えない現象もいくつか報告されている。内殻分光の解析にも相対論効果、強い光子場の影響を取り入れる必要が生じる。ここでは量子電気力学(QED)的にXAFS,XMCD,XPDの多体効果を取り扱う新しい理論的方法について議論する。

## 1 相対論的Keldysh Green関数

電子-光子相互作用を取り扱うのに非平衡光子Green関数、電子Green関数が必要になる。光子Green関数$D^{\mu\nu}$は次の汎関数微分で定義される。$A^\nu$ はベクトルポテンシャル、$j_\nu^{ext}$ は外部カレント密度である。

$$\frac{4\pi}{c}D^{\mu\nu}(1,2)=\frac{\delta<A^\mu(1)>}{\delta j_\nu^{ext}(2)} \tag{1}$$

一方1電子Green関数は

$$iG(1,2)=<T_c[\psi(1)\bar{\psi}(2)]>,\quad \bar{\psi}(2)=\psi^\dagger(2)\gamma^0 \tag{2}$$

$T_c$はKeldyshの閉じた時間順序経路の順に並べる演算子である。電子、光子Green関数の自己エネルギー$\Sigma,\Pi$は共通のバーテックス関数$\Gamma$を用いて表すことができる。

$$\Gamma_\nu(34,2)=-\frac{4\pi i}{c}\frac{\delta G^{-1}(3,4)}{\delta<A^\nu(2)>}, \tag{3}$$

$$\Sigma(1,2)=c\gamma_\mu\int d3d4G(1,3)\Gamma_\nu(32,4)D^{\mu\nu}(4,1^+), \tag{4}$$

$$\Pi^\mu{}_\nu(1,2)=c\gamma^\mu\int d3d4G(1,3)\Gamma_\nu(32,4)G(4,1^+). \tag{5}$$

この表示を用いて、$G,\Gamma,\Sigma,\Pi$の閉じた連立方程式、いわゆるHedinの方程式が得られる。例えば１次の自己エネルギーは

$$\begin{aligned}\Sigma^{(1)}(1,2) &= -4\pi i\gamma_\mu\gamma_\nu G(1,2)D^{\mu\nu}(2,1^+) \qquad (6)\\ &= iG(1,2)W(2,1^+)-4\pi iG(1,2)\gamma_i\gamma_j D^{ij}(2,1^+),\\ \Pi^\mu{}_\nu{}^{(1)}(1,2) &= -4\pi i\gamma^\mu\gamma_\nu G(1,2)G(2,1^+). \qquad (7)\end{aligned}$$

$W$は縦の場の遮蔽されたクーロン関数。クーロンゲージを用いると縦と横のクロス項は小さいので（６）式では縦と横（第２項）は分かれる。第１項は非相対論理論で現れる"GW"項である。横の場の項は光と電子の相互作用を記述する。$\Sigma^{(1)}=\Sigma_l^{(1)}+\Sigma_t^{(1)}$の近似を用いると１電子Green関数は縦の部分$G_l$に$\Sigma_t^{(1)}$の寄与が加わる形で書ける。

相対論的多体問題の困難な点は、「物理的な」正のエネルギー状態ばかりでなく「非物理的な」負のエネルギー状態も完全系の記述に必要な点である。その困難を避けるために、相対論的Green関数を、非相対論的Green関数を用いて展開する。特に、光電子には相対論効果を摂動的に扱って十分であるが、コア電子には相対論効果は本質的である。$4\times4$縦 Green関数$G_l$は次のように$2\times2$ quasi nonrelativistic Green関数$G_{11}$を用いて (8)式のように展開できる。ただし、$G_{11}$は自己エネルギーの$(1,1)$成分$\Sigma_{11}$に対するDyson方程式

$$G_{11}=G_{11}^0+G_{11}^0\Sigma_{11}G_{11}$$

を満足する。

$$G_l(\varepsilon)=\begin{pmatrix} G_{11}+\Delta G_{11} & G_{11}Q \\ QG_{11} & QG_{11}Q+1/(2c^2) \end{pmatrix} \tag{8}$$

ここで相対論的$GW$近似で各$2\times2$部分自己エネルギーを表すと

$$\begin{aligned}
\Sigma_{11}(1,2)&=i\{G_{11}(1,2)+\Delta G_{11}(1,2)\}W(2,1^+),\\
\Sigma_{12}(1,2)&=iG_{11}(1,2)Q_2W(2,1^+),\\
\Sigma_{21}(1,2)&=i\{Q_1G_{11}(1,2)\}W(2,1^+),\\
\Sigma_{22}(1,2)&=\{Q_1G_{11}(1,2)Q_2+\frac{1}{2c^2}\}W(2,1^+).
\end{aligned} \tag{9}$$

この展開を用いることによって、相対論効果、多体効果、光子場の効果を系統的に取り入れることができる。

## 2　相対論的多体XPS理論

最初の応用としてXPSの理論解析を考えてみよう。観測点$\mathbf{r}$での光電子の流れの密度は次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
j^i(\mathbf{r},t)&=c<\bar{\psi}(\mathbf{r}t)\gamma^i\psi(\mathbf{r}t)>\\
&=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x'^i}-\frac{\partial}{\partial x^i}\right)trG^<(\mathbf{r}'t,\mathbf{r}t)\Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}},
\end{aligned} \tag{10}$$

コア電子に作用する相対論効果は摂動的には扱えないが、光電子に作用する相対論効果はQED摂動で十分である。スケルトン展開を用いて、光子グリーン関数の最低次の寄与を含んだ、標的から十分離れた点での光電子の流れの密度を求めると次のように表せる。ただし、$<n_\mathbf{k}>$は$\mathbf{k}$光子の平均数である。コア関数は4-spinorそのままで取り扱い、その「大きな成分」を$|\varphi_c>$,「小さな成分」を$|\chi_c>$とする。

$$\begin{aligned}
\mathbf{j_p}(\mathbf{r})_{r\to\infty}&=\frac{2\pi\mathbf{p}}{\Gamma}\sum_n|S_n|^2\delta(\varepsilon-\varepsilon_p)\delta(\varepsilon_p+E_n^*-E_0-\omega_k)\\
&\times[<f_\mathbf{p}^-|\Delta|\varphi_c><\varphi_c|\Delta^\dagger|f_\mathbf{p}^->+<f_\mathbf{p}^-|\Delta|\varphi_c><\varphi_c|\Delta^\dagger G_{11}\delta\tilde{T}|f_\mathbf{p}^->\\
&+<f_\mathbf{p}^-|\delta TG_{11}\Delta|\varphi_c><\varphi_c|\Delta^\dagger|f_\mathbf{p}^->+<f_\mathbf{p}^-|\Delta|\varphi_c><\chi_c|\Delta^\dagger Q|f_\mathbf{p}^->\\
&+<f_\mathbf{p}^-|Q\Delta|\chi_c><\varphi_c|\Delta^\dagger|f_\mathbf{p}^->+\ldots]<n_\mathbf{k}>,\quad Q=\sigma\cdot\mathbf{p}/2c
\end{aligned} \tag{11}$$

$f_\mathbf{p}^-$ は非局所、非エルミート光学ポテンシャル$\Sigma^a$の影響下で系の中を減衰しながら伝播する光電子波である。$|S_n|^2$はintrinsic なロス効果(shake-up)の起こる確率を表す。(11)の第１項は非相対論的極限でも残る項であるが、残りの項はいずれも$c\to\infty$の極限で消える相対論補正項である。$\delta T,\delta\tilde{T}$はいずれも$Q^2$のオーダーの項で、さらに自己エネルギーの$\Sigma_{11}$以外の部分を含んでいる。(11)式は今まで用いられてきた非相対論多体理論をそのまま使える形になっていて、温度効果、系の配向の効果などを自然な形で取り扱える。

高次の多体効果も相対論的Hedin方程式を用いて逐次近似により、extrinsic loss, 輻射場の動的遮蔽などを次々に考慮していくことができる.