

内殻励起分光学の理論の進展

東大物性研 小谷章雄

内殻励起分光学理論の研究は、放射光を用いた内殻励起分光学実験の研究と深く関わりながら、今日まで進展してきた。物性研究専用の放射光源（第2世代光源）は1970年代に、世界に先駆けて我国で建設されたが、その頃に我々理論家は世界に先駆けて、不純物アンダーソン模型によるXPS, XAS(およびXES)の理論¹⁾(以下KT理論と呼ぶ)を提案し、La金属に対する実験のスペクトル構造の解明をおこなった。今から約30年前のことである。また、今年にはPFの放射光発生20周年にあたるが、約20年前は、内外の研究者の尽力によって、KT理論が大きな飛躍をとげた頃でもある。KT理論は拡張・改良されて、(1)Ceの混合原子価金属間化合物²⁾、(2)希土類の絶縁体化合物³⁾、(3)遷移金属化合物⁴⁾、のXPS, XASの解析に適用され、大きな成果をあげた。また、(4)XASにおける多重項構造と磁気円二色性(およびその総和則⁵⁾)の理論も特筆に値しよう。

最近の10年間は、第3(あるいは2.5)世代高輝度光源の活躍が著しい時代であるが、高輝度光源の出現によってもっとも顕著な発展をとげた分光分野の一つとして、共鳴X線発光分光(RXES)をあげることができる。我々は、RXES実験の開始に先立って、不純物アンダーソン模型によるfおよびd電子系のRXES理論に着手し⁶⁾、その後の実験の進歩に応じて、この分野の研究を最近の中心的課題と位置付けている⁷⁾。

研究会では、このような内殻励起分光学理論の研究発展の経過について、詳しい紹介をおこなう。

参考文献

- 1) A. Kotani and Y. Toyozawa : J. Phys. Soc. Jpn. **35** (1973) 1073, 1082; **37** (1974) 912.
- 2) Gunnarsson and Schönhammer : Phys. Rev. B **28** (1983) 4315.
- 3) J. C. Parlebas and A. Kotani : "Magnetism of Rare Earths and Actinides" ed. E. Burzo and M. Rogalski (1983) p. 242 ; A. Kotani, H. Mizuta, T. Jo and J. C. Parlebas : Solid State Commun. **53** (1985) 805.
- 4) J. Zaanen, C. Westra and G. A. Sawatzky : Phys. Rev B **33** (1986) 8060.
- 5) B. T. Thole, P. Carra, F. Sette and G. van der Laan : Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 1943.
- 6) Y. Kayanuma and A. Kotani : "Core-Level Spectroscopy in Condensed Systems" ed. J. Kanamori and A. Kotani (1988) p.72 ; S. Tanaka, Y. Kayanuma and A. Kotani : J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 1488.
- 7) A. Kotani and S. Shin : Rev. Mod. Phys. **73** (2001) 203.