

共鳴非弾性X線散乱の理論の現状と実験への期待

遠山貴巳
東京理科大学理学部

軟X線を用いた3d遷移金属L吸収端での共鳴非弾性X線散乱(RIXS)では、3d軌道間の電荷励起(d-d励起)とともに電荷励起や2マグノン励起を伴った励起が低エネルギー領域に現れる。これらの励起に加えて、コアホールのスピン・軌道相互作用に起因するスピン反転励起(マグノン励起、パラマグノン励起)が観測され、銅酸化物高温超伝導体のスピン励起の理解に大きな進展をもたらした。ホールドーブ系ではドーピング依存性の小さなパラマグノン励起があり、一方、電子ドーブ系ではそれがドーピングとともに高エネルギー側にシフトする。また最近では、スピン反転励起スペクトルがラマン的(入射エネルギーに対して励起エネルギーが一定)な入射エネルギー依存性となり、一方、スピン非反転励起スペクトルは蛍光的(入射エネルギーとともに励起エネルギーが増加)な依存性を持つことが報告されている[1,2]。RIXSは中間状態を含む散乱過程であり、散乱断面積はクラマース・ハイゼンベルグ公式で与えられるが、その理論的な取り扱いは簡単ではない。スピン反転励起とスピン非反転励起が入射光・散乱光の分極や角度によって適当に組み合わせられて観測されるので、実験との対応を見るためには両者を個別に計算しておくことはスペクトルを分解する際に役立つ。

本講演では、銅酸化物高温超伝導体の銅L吸収端 RIXS の入射エネルギー依存性に着目した最新の理論研究を紹介する[3]。計算には銅酸化物高温超伝導体を記述する拡張ハバード模型の有限クラスターを用いる。散乱過程の計算においては、内殻 2p ホールのスピン・軌道相互作用は十分強いと仮定し、その内殻ホールによるクーロンポテンシャルを取り入れる。このクーロンポテンシャルをホールドーブ系の X 線吸収スペクトルと形状が合うように決めると、RIXS のスピン非反転励起の成分が蛍光的な振る舞いとなることが分かった。ドーブされたキャリアに起因する粒子・ホール励起の連続帯がスペクトルに現れた結果であり、最近の実験[1,2]と一致している。

最近、入射光と散乱光の分極を分離する実験も始まっており[1]、また、10meVに迫るような高分解能銅L吸収端 RIXS が海外で計画されている。それと歩調を合わせて、理論もより詳細な RIXS のプロセスを追う方向に向かっている。今後、実験と理論の密接な連携がますます必要とされる。日本からも新しい情報をさらに発信できるようになればと願っている。

[1] M. Minola *et al.*, Phys. Rev. Lett. **114**, 217003 (2015).

[2] H. Y. Huang *et al.*, Sci. Rep. **6**, 19657 (2016).

[3] K. Tsutsui and T. Tohyama, Phys. Rev. B **94**, 085144 (2016).