Title	Soft X-ray emission and absorption of metals (review)
Author(s)	芳田, 奎
Citation	物性研究 (1970), 14(1): A3-A8
Issue Date	1970-04-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/88104
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

研究会報告

「励起子」

標記の研究会が1970年1月22日～24日基研に於て行なわれた。同じ題目に就ての基研に於ける研究会は昭和33年に一度行なわれている。

此間実験的にも理論的にも励起子に就ての諸問題は可成の発展を遂げたが，今回は最近に於ける色々な仕事の成果が発表された。その内容の目次は以目の如くである。*)

1月22日（木）

金属中の局在ポテンシヤルに関連した異常性の問題　　東大・物性研　芳田　奎

SOR分光による固体スペクトルの研究，最近の発展　　東大・教養　佐々木泰三

絶縁体に於ける二電子励起について　　東大・物性研　秋元興一

磁性体光物性の諸問題　　東大・物性研　菅野　暁
NHK基礎研　青柳　淳

1月23日（金）

常磁性領域に於けるいわゆるマグノンモードについて　　京大・理　川崎辰夫

MnO，MnSのマグノンサイドバンド　　阪大・基礎工　望月和子
原田　勲

C_0F_2による光のラマン散乱　　東大・物性研　石川章夫

2次元反強磁性体に於ける2－マグノン吸収の理論　　東大・理　鈴木　直
上村　洸

フオノン・サイドバンドの理論　　東大・物性研　豊沢　豊
張　紀久夫

磁場によつて誘起されるポーラロン異常	九大・教養	中山正敏
	東大・物性研	住　　斎
分子性結晶に於ける励起子	名大・理	田中二朗

1月24日（土）

非周期電子系の光学的性質	京大・理	長谷川　洋
		神田邦彦
Excitons in Liquids and Amorphons Solids **)		
	京大・基研	武野正三
混晶の光スペクトルに見られる percolation		
	東北大・理	長沢信方
イオン結晶に於ける母体発光とその緩和現象		
	京大・理	中川英元
		豊田紘一
		伊藤　稔
		中井祥夫
分子系に於ける Hartree－Fock 基底状態の不安定性と化学反応		
	京大・理	福留秀雄
高密度励起子の問題	東大・物性研	花村栄一
高密度励起子によるマイクロ波伝導	東大・物性研	森垣和夫

＊）　研究会世話人

長谷川　洋（京大理），　福留秀雄（京大理），

武野正三（京大基研），

＊＊）　著者の都合により口頭発表出来なかつた。

Soft X-ray emission and absorption of metals (review)

物性研　芳田　奎

Metal の軟X一線，吸収一発射端の singularity について Mahan の論文以後，多くの理論的研究がなされている。これらの研究の概略を紹介する。

emission と absorption とは全く parallel に計算されるので，主に absorption について説明する。

先ず，吸収の強度は，

$$I(\omega) = 2\pi \Sigma_f \, | \langle \psi_f | H' | \psi_i |^2 \, \delta(E_f - E_i - \omega) \tag{1}$$

で与えられる。ここに H′はX線と電子との相互作用で

$$H' = \Sigma_k \, g_k \, a_k^+ b + \mathrm{c.c.} \tag{2}$$

b は inner shell の電子をこわす operator, a_k^+ は cond. electron の creation operator である。g_k は coupling constant で一般には spherical harmonics によつて展開されるものであるが，簡単のために s－part のみをとり g_k= const とする。ψ_i, E_i は初めの状態の波動函数及びそのエネルギー，ψ_f, E_f は終りの状態に対応するものである。ψ_i では core 電子と free な伝導電子の ground state であり，ψ_f は core 電子が伝導電子の level に移つた状態である。ここで問題は ψ_f は core にできた hole による Coulomb potential が働いた場合の固有函数であるという点である。即ち，ψ_f は final state interaction を含む Hamiltonian

$$H_f = H_i - v \sum_{kk'} a_{k'}^+ a_k \, , \qquad H_i = \sum_k \varepsilon_k \, a_k^+ a_k$$

の固有状態である点である。従つて物理的には事情は明瞭であるが，問題は如何にして異る完全系の間の H′のマトリックス要素を勘定するかという計算技術の問題になる。

今,

$$\delta(E_f - E_i - \omega) = \frac{1}{\Pi} \mathrm{Re} \int_{-\infty}^{0} e^{i(E_f - E_i - \omega)t} dt \qquad (3)$$

を（1）に用いると，

$$I(\omega) = 2\mathrm{Re} \int_{-\infty}^{0} e^{-i\omega t} dt \sum_f \langle i | H'^{+} | f \rangle \langle f | e^{iE_f t} H' | e^{-iE_i t} | i \rangle$$

$$= 2\mathrm{Re} \int_{-\infty}^{0} e^{-i\omega t} dt \langle i | H'^{+} e^{iH_f t} H' e^{-iH_i t} | i \rangle$$

$$= 2\mathrm{Re} \int_{-\infty}^{0} e^{-i\omega t} dt \langle i | \Sigma_k b^{+} a_k \cdot \sum_k a_k^{+}(f) b(t) | i \rangle$$

となる。但し，

$$a_k(t) = e^{iHt} a_k e^{-iHt}$$

$$H = H_i - v \sum a_{k'}^{+} a_k b b^{+} \qquad (4)$$

従つて，

$$I(\omega) = 2\mathrm{Re} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} dt \sum_{kk'} \langle i | T a_k^{+}(t) b(t), b^{+} a_{k'} | i \rangle \qquad (5)$$

T は time ordering の operator である。従つて
$I(\omega)$ は

$$F_{kk'} = \langle i | T a_k^{+}(t) b(t) b^{+}(t') a_{k'}(t') | i \rangle \quad t < t' \quad (6)$$

なる量を計算すればその Fourier 変換として求めることが出きて，Mahan は（4）を（5）に用い（5）を摂動展開し，$\rho v \log \frac{\omega - \omega_c}{D}$ の形の発散項が現わることを見出し，（但しDはバンド巾の半分 ω_c は Fermi エネルギーと deep level E_0 との差，ρ は state density）このような $\omega \to \omega_c$ で発散する term，most diverging term の series を集め

$$I(\omega) = \frac{2\Pi}{1 + (\pi v \rho)^2} \theta(\omega - \omega_c) \left(\frac{D}{\omega - \omega_c}\right)^{2v\rho} \qquad (7)$$

なる結果をえた。また水野一石川は同じ most divergent の計算を next divergent も含めて行なつた。

Mahan 以後いくつかの Mahan の展開を精密化した paper があるが，最も重要な paper は Nozieres－Dominicis による漸近的に exact に（6）を解いたものであろう。その結果によると（7）式の（$D/\omega-\omega_c$）の中 $2v\rho$ が phase shift を δ として $2\frac{\delta}{\pi}-\frac{\delta^2}{\pi^2}$ によつて置き換わる。以下 N－Dの方法を説明する。

（6）式は次のように書くことができる。

$$\sum_{kk'} F_{kk'} = e^{-iE_0(t-t')} \langle i| e^{-iH_i(t-t')} b^+ \sum_{k'} a_{k'} e^{iH_f(t-t')} \sum_k a_k^+ b |\rangle$$

$$= e^{-iE_0(t-t')} \frac{{}_h\langle i| e^{-iH_i(t-t')} \sum_{k'} a_{k'} e^{iH_f(t-t')} \sum_k a_k^+ |i\rangle_h}{{}_h\langle i| e^{-iH_i(t-t')} e^{iH_f(t-t')} |i\rangle_h}$$

$$ {}_h\langle i| e^{-iH_i(t-t')} e^{iH_f(t-t')} |i\rangle_h \qquad (8)$$

第2行目の ${}_h\langle i|$ は伝導電子は initial state のままで，deep lerel に hole のある状態を意味する。また2行目のように2つの部分に分けたとき N－Dによれば，第1の factor から $\frac{1}{t}(t)^{2\frac{\delta}{\pi}}$ が第2の factor から $(t)^{-(\frac{\delta}{\pi})^2}$ が現れる。（8）の第2式の形に書くと deep level の operator は姿を消し，問題は単に ， static potential の1体問題になる。

今

$$\varphi(\tau\tau';tt') = \frac{{}_h\langle i| T a_k(\tau) a_{k'}^+(\tau') S(t't) |i\rangle_h}{{}_h\langle i| S(t't) |i\rangle_h}, \qquad (9)$$

$$s(t't) = T \exp\left[-i\int_t^{t'} H_{int}(\tau)d\tau\right],$$

なる deep hole による potential が t－t′ の間だけ働いている場合の Green function（$t<\tau$, $\tau'<t'$）を定義すると，$t'\to\infty$　$t'\to-\infty$ とすれば G（$\tau\tau'$; tt'）は通常の Green function $G^e(\tau-\tau')$ になる。

この Green function で $\tau \to t'$ $\tau' \to t$ とすれば，

$\varphi(\tau'\tau ; t t')$ は (9) 式の第1の factor に等しくなる。

N－Dは (8) の代りにより一般的な量 $\varphi(\tau\tau', t t')$ を正確に求める。

(8) の第2の factor は (9) がえられれば計算することができる。

第2の factor は

$$g(t) = {}_h\langle i | e^{+iH_i t} e^{-iH_f t} | i \rangle_h = e^{+iE_T t} \langle \psi_i(0) | \psi_i(t) \rangle, \tag{10}$$

とすれは，$t=0$ での ψ_i が H_f で運動し $\psi_i(t)$ のように時間とともに変化したとき，これらの波動函数の overlap integral である。これは $t \to \infty$ では Anderson の orthogonality catastoroph によつて0になる。

Anderson は

$$g(\infty) = \langle \psi_i | \psi_f \rangle = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\delta}{\pi}\right)^2 \log N} \qquad (\text{N は全電子数})$$

なる結果を直接 derterminant の計算によつて求めた。

N－D の paper の essential part は (9) なる Green function の満たす Dyson E_q,

$$\varphi_{kk'}(\tau\tau') = G^a_{kk'}(\tau-\tau') + iv \int_t^{t'} \sum_{qq'} G_{kq}(\tau-\tau'') \varphi_{q'k'}(\tau''\tau') d\tau'' \tag{11}$$

を asymptotically に exact にとくことに成功したことである。suffix k, k′ について sum したものを改めて $\varphi(\tau\tau')$, $G(\tau-\tau')$ とすれば

$$\varphi(\tau\tau') = G^a(\tau-\tau') + iv \int_t^{t'} d\tau'' G^a(\tau-\tau'') \varphi(\tau''\tau') . \tag{12}$$

ここに $G^a(\tau\tau')$ は hole potential のない場合の free な Green function で，

$$G^a(\tau-\tau')=\frac{\rho(1-e^{-iD|\tau-\tau'|})}{i(\tau-\tau')},$$

Dは square band をとつたときの band 巾の半分，ρは const. state density である。

$(\tau-\tau')$ が大きいときは

$$G^a(\tau-\tau')=\frac{\rho}{i(\tau-\tau')}, \qquad (13), \quad G^a(0^+)=\rho D.$$

NDは，G^a を (13) の asympotic form を以て近似する，(12) の第2項は τ'' で積分されているから $\tau''=\tau$ の処を通る。従つてこの点を除外するために $G^a(\tau-\tau')$ を principal part をとつたものを用いる。こうすると (12) の Dyson Eq.は，

$$G(\tau\tau')=-i\rho P\left(\frac{1}{\tau-\tau'}\right)+\frac{\tan\delta}{\pi}\int_t^{t'}P\left(\frac{1}{\tau-\tau''}\right)\cdot\varphi(t''\tau')\,d\tau'' \tag{13}$$

のようになる。ここに Fermi 面について対称な band に対する phase shift δ と ρv との関係式

$$\tan\delta=\pi v\rho \tag{14}$$

を用いた。(13) 式は典型的な singular integral equation で Hilbert problem としてよく知られたものである。この方程式の解は $\delta\to 0$ で $G^a(\tau\tau')$ になるという条件のもとに

$$\varphi(\tau\tau')=G^e(\tau-\tau')\left[\frac{(\tau'-t')(t-\tau)}{(\tau-t')(t-\tau')}\right]^{\frac{\delta}{\pi}} \tag{15}$$

$G^e(\tau-\tau')$は $t=-\infty$ $t'=\infty$とした Dyson Eq. の解すなわち hole potential のある時の通常の Green f. である。即ち

$$G^e(\tau-\tau')=-i\frac{\rho}{1+(\pi v\rho)^2}P\left(\frac{1}{\tau-\tau'}\right)$$

である。従つて，

$$\varphi(t't;tt')=i\frac{\rho}{(1+(\pi v\rho)^2)}\frac{1}{t-t'}\left[i(t-t')D\right]^{2\frac{\delta}{\pi}}$$

ここに $\begin{array}{l}(\tau - t') \rightarrow iD^{-1}, \\ (t - \tau') \rightarrow iD^{-1}\end{array}$ ）と置く

また，（15）から一寸した計算によつて

$$g(t) = -e^{i\Delta t}(itD)^{-\left(\frac{\delta}{\pi}\right)^2} \qquad (16)$$

がえられる。△は hole の potential v による energy shift である。

以上が ND の理論の大要であるが，この問題は essential には 1 体問題であるので，漸近的に正確に解がえられたものと思われる。N－D以後，Ferrell Yubal－Anderson，Schotte & Schotte 等による有限温度への拡張などが試みられている。

最後に Schotte－Schotte による予想を付け加える。ND は（8）の第一式

$$\underset{h}{<} i \,|\, e^{-iH_i(t-t')} \sum_{k'} a_{k'} e^{iH_f(t-t')} \sum_k a_k^+ \,|\, i >_h \qquad (8)$$

を求めるのに，これを 2 つの因子に分解した $\sum_k a_k^+$ は，原点に局在した電子の波動函数であるから，$\sum_k a_k^+ | i >_h$ は Free な伝導電子の状態に 1 個電子を原点につけ加えた波動函数を意味する。これが一般に，

$$(8) \cong t^{-n^2}$$

になるという予想である。ここに n は原点から逃げてゆく電子の数を意味する hole potential が働いているから $\frac{\delta}{\pi}$ 個の電子は原点の近くに残る。従つて（8）式の場合は，$n = 1 - \frac{\delta}{\pi}$ で，$t^{-\left(1 - 2\frac{\delta}{\pi} + \frac{\delta^2}{\pi^2}\right)}$ となり ND の計算と合う。

また（8）の第 2 式の第 2 の因子に対しては最初 n＝0 であるから，逃げてゆく電子は $\left(-\frac{\delta}{\pi}\right)$ であつて，これは $t^{-\frac{\delta^2}{\pi^2}}$ になる。この予想からもつと一般的に（8）式を 2 つの因子に分解しないで計算が可能であろうというのが，Schotte & Schotte の考えである。