

ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-6. 放射光科学
小項目	1-6-8. X線非弾性散乱分光

<p>概要（200字以内）</p> <p>X線非弾性散乱(IXS)分光は、第三世代放射光の登場によって開花した新しい分光法である。IXSは物質の原子構造、電子構造、さらには振動構造までカバーする万能のプローブである。そればかりでなく、磁性体や超伝導材料の評価に有用な先端的なプローブであり、内殻励起状態について新たな研究領域をつくりつつある開拓的なプローブでもある。今後、分析法としての深化と応用の拡大、この両面の発展が期待できる。</p>	
<p>共鳴X線非弾性散乱</p> <p>○内殻励起状態に関する新しい研究領域 ○機能性材料のキャラクタリゼーション</p> <p>深い内殻に空孔生成 寿命幅フリー・高分解能X線吸収</p> <p>浅い内殻に空孔生成 状態を選別したX線吸収</p> <p>価電子に空孔生成 価電子の多体効果</p>	<p>非共鳴X線非弾性散乱</p> <p>○原子構造、電子構造から振動構造までカバーする万能のプローブ</p> <p>コンプトン散乱 ○価電子の電子構造 ○フェルミオロジー</p> <p>X線ラマン散乱 ○極限条件下の軽元素の電子構造・原子構造</p> <p>超高分解能分光 ○フォノンのq依存性 ○物質のダイナミクス</p>
<p>現状と最前線</p> <p>X線非弾性散乱(IXS)は、吸収や発光から得られるスペクトルをその一部として包含する、凝集体の電子状態と原子構造、両方についての豊かな情報源である[1-3]。信号強度の弱さのために利用が進まなかったが、「第三世代」と呼ばれる放射光の登場によって強度の問題が解決されはじめ、その応用が急速に拡大している。</p> <p>IXSは非共鳴散乱と共鳴散乱に大別できる。非共鳴IXSは、電子の基底状態の平均軌道半径rと移行運動量qの積の大きさに応じて、別種の情報を与える。$qr \gg 1$の条件下で起こる散乱が有名なコンプトン散乱[1]である。これは基底状態の波動関数と直接対応しており、結晶性の物質については、散乱の異方性の測定を通じてバンド構造を決定できる。</p> <p>$qr \ll 1$の条件下で起こる散乱はX線ラマン散乱[1]と呼ばれ、散乱プロファイルに浅い内殻の吸収構造が現れる。試料を真空中に置く必要がなく、窓材が使えるため、高圧など極限条件下でのVUV-軟X線吸収のプローブとして期待されている。</p> <p>最近では~10keVのX線を入射して~1meVのエネルギー損失を測定するという、超高分解能分光も可能になり、フォノンによる非共鳴IXS[2]から物質のダイナミクスを追跡する試みもはじまっている。</p> <p>共鳴X線非弾性散乱(RIXS)[3]のうち、深い内殻に空孔が生成する散乱からは、寿命幅による分解能制限を超えた、高分解能の吸収スペクトル[3]が得られる。浅い内殻に空孔が生成す</p>	

る RIXS では、化学効果による分裂がしばしば起こるが、分裂の原因が特定できれば、化学状態を選別した X 線吸収スペクトル[3]を導出できる。価電子帯に空孔ができる RIXS は、価電子の多体効果を強く反映する。これを解析すればバンド間遷移に関する新しい知見が得られる。磁性材料や超伝導関連材料の RIXS は、X 線分光におけるホットトピックの 1 つである。

分子集合体を含む凝縮系の新しい分析手段として、IXS 分光の実験的な土台はほぼ確立した。今後、IXS 分光を分子科学や材料科学に十全に生かしていくためには、まず IXS 専用ビームラインの設置と、その開放的運用が望まれる。IXS を解析する理論の進展も必要であろう。将来的には顕微 IXS 分光や時分割 IXS 測定、さらには X 線レーザーを用いた新しい IXS 分光 (3 次・4 次の IXS 散乱分光や、フェムト秒レベルでの内殻空孔の緩和研究など) に期待したい。

文献

- 1 林 久史、放射光科学入門 (渡辺 誠、佐藤 繁 編)、286-295、東北大学出版会 2004
- 2 林 久史、日本結晶学会誌 **40**、177-184 (1998)
- 3 林 久史、分光研究 **53**、283-294 (1994)

将来予測と方向性

・ 5 年後までに解決・実現が望まれる課題

(1) X 線ラマン散乱並びに RIXS 専用ビームラインの設置。ならびに、生化学試料や機能性材料の汎用的な分析ツールとしての、その開放的運用。

(2) 高分解能 X 線吸収や状態選別吸収を解析する理論的枠組みの確立。

・ 10 年後までに解決・実現が望まれる課題

(1) IXS の顕微分光、時間分解測定への展開。

(2) X 線レーザーを利用した新しい IXS 分光の開発。

キーワード

X 線非弾性散乱、コンプトン散乱、X 線ラマン散乱、寿命幅フリー吸収、状態選別吸収

(執筆者: 林 久史)