2 異方的電荷分布による非共鳴 Thomson 散乱

$\mathrm{CeB_6}$ での例として図 1.6 に示したような，四極子秩序のために異方的になった電荷分布による Thomson 散乱の散乱振幅を書き表そう [15]．ここでは，原子 1 個からの散乱振幅を考える．まず，電荷による Thomson 散乱の散乱振幅は，(1.30) より，

$$F_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{\kappa}) = (\boldsymbol{\varepsilon}'^{*} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \langle a| \sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}_j} |a\rangle \tag{2.1}$$

である[*26)]．ここで，(1.19) のように，$f_0(\boldsymbol{\kappa}) = \langle a| \sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}_j} |a\rangle$ を原子散乱因子として定義し，平面波 $e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}}$ を球ベッセル関数 j_l で展開すると[*27)]，次のように変形できる．ただし，l は偶数である．

$$\begin{aligned}
f_0(\boldsymbol{\kappa}) &= \langle a| \sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}_j} |a\rangle & (2.2)\\
&= \langle a| \sum_j \sum_{lm} 4\pi i^l j_l(\kappa r_j) Y_m^{(l)}(\hat{\boldsymbol{r}}_j) Y_m^{(l)*}(\hat{\boldsymbol{\kappa}}) |a\rangle & (2.3)\\
&= \sum_{lm} 4\pi i^l Y_m^{(l)*}(\hat{\boldsymbol{\kappa}}) \langle a| \sum_j j_l(\kappa r_j) Y_m^{(l)}(\theta_j, \phi_j) |a\rangle & (2.4)\\
&= \sum_{lm} 4\pi i^l Y_m^{(l)*}(\hat{\boldsymbol{\kappa}}) \cdot \int_0^\infty r^2 R^2(r) j_l(\kappa r) dr \cdot \langle a| \sum_j Y_m^{(l)}(\theta_j, \phi_j) |a\rangle & (2.5)
\end{aligned}$$

ここで，$\hat{\boldsymbol{r}}_j$ と $\hat{\boldsymbol{\kappa}}$ は，それぞれ $\boldsymbol{r}_j$ と $\boldsymbol{\kappa}$ の単位ベクトルであり，$\hat{\boldsymbol{r}}_j$ は極座標 (θ_j, ϕ_j) として表した．また，

$$\langle j_l(\kappa) \rangle \equiv \int_0^\infty r^2 R^2(r) j_l(\kappa r) dr \tag{2.6}$$

$$C_m^{(l)}(\theta_j, \phi_j) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_m^{(l)}(\theta_j, \phi_j) \tag{2.7}$$

を使うと[*28)]，

$$f_0(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_{lm} 4\pi i^k Y_m^{(l)*}(\hat{\boldsymbol{\kappa}}) \langle j_l(\kappa) \rangle \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \langle a| \sum_j C_m^{(l)}(\theta_j, \phi_j) |a\rangle\,. \tag{2.8}$$

ここで，異方的電荷分布を形成している電子系の波動関数 $|a\rangle$ は，合成角運動量 J の状態の重ね合わせとして，

$$|a\rangle = \sum_{M=-J}^{J} c_M |J, M\rangle \tag{2.9}$$

と表されるものとしよう．$\mathrm{CeB_6}$ であれば，AFQ 秩序状態での固有関数だと思えばよい．すると，

$$\langle a| \sum_j C_m^{(l)}(\theta_j, \phi_j) |a\rangle = \sum_{M,M'} c_M^* c_{M'} \langle JM| \sum_j C_m^{(l)}(\theta_j, \phi_j) |JM'\rangle \tag{2.10}$$

と書けるので，結局，行列要素 $\langle JM| \sum_j C_m^{(l)}(\theta_j, \phi_j) |JM'\rangle$ の計算ができればよいことになる．これは，結晶場ハミルトニアンの行列要素にもでてくるものであり，Wigner-Eckart の定理を使った等価演算子法として知られている方法が使える[*29)]．それによると，

$$\langle JM| \sum_j C_m^{(l)}(\theta_j, \phi_j) |JM'\rangle = (J||\hat{C}^{(l)}||J) \frac{\langle JM|JM'lm\rangle}{\sqrt{2J+1}}\,. \tag{2.11}$$

[*26)] $-\frac{e^2}{mc^2}$ の因子は除いた．
[*27)] 球ベッセル関数による平面波の展開は文献 [47] の (5.53) 式．
[*28)] $R(r)$ は状態 $|a\rangle$ の動径方向の波動関数．
[*29)] より詳しくは，http://home.hiroshima-u.ac.jp/tmatsu/Matsumura/Research.html:「結晶場中における局在 $4f$ 電子系の波動関数と物理量の計算」を参照．

ここで，$(J||\hat{C}^{(l)}||J)$ は比例定数（還元行列要素）であり，Stevens 因子 $\theta_J^{(k)}$ を使って，

$$(J||\hat{C}^{(l)}||J) = \frac{\theta_J^{(k)}(J||\hat{T}^{(k)}||J)}{(3||\hat{T}^{(k)}||3)}\,; \qquad (J||\hat{T}^{(k)}||J) = \frac{1}{2^k}\sqrt{\frac{(2J+k+1)!}{(2J-k)!}} \tag{2.12}$$

と表される．したがって，最終的に，

$$\boxed{f_0(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_{lm} 4\pi i^k Y_m^{(l)*}(\hat{\boldsymbol{\kappa}})\langle j_l(\kappa)\rangle\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\cdot\frac{\theta_J^{(k)}(J||\hat{T}^{(k)}||J)}{(3||\hat{T}^{(k)}||3)}\cdot\sum_{M,M'} c_M^* c_{M'}\frac{\langle JM|JM'lm\rangle}{\sqrt{2J+1}}} \tag{2.13}$$

と表される[*30)]．

[*30)] 通常，f 電子系の基底 J 多重項についての Stevens 因子 $\theta_J^{(l)}$ は $l = 2, 4, 6$ について定義されている．ここでは，$l = 0$ についても必要である．f 電子数を n とするとき，$\theta_J^{(0)} = n$ である．