

[9] 倉辻, 飯田: 本研究会の講演

[10] Y. Aharonov and J. Anandan : Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 1593.

ヤーン・テラー効果における Berry の位相

東大・理 青 木 秀 夫

1. 序

ベリーの位相は量子力学の基本的帰結であるが、これが物理の様々な分野に現われることに最近興味もたれている。この中には

- a) 量子ホール効果^[1-3]
- b) 分子やクラスターの変形と電子構造^[4]
- c) ゲージ場の理論^[5]

等が含まれる。最近 Ham^[6]が、化学物理において馴染み深いヤーン・テラー効果においても、ボルン・オープンハイマー近似での波動関数の性質をベリーの位相という観点で理解できることを示しているのので、この仕事を紹介した。

これは、ヤーン・テラー(複数軌道)問題における電子の波動関数 ψ が、空間を 360° 回転させても元に戻らず

$$\psi(2\pi) = -\psi(0)$$

のように符号が変わるという、Longuet-Higgins^[7]の時代から知られていた性質を、原子核の座標を断熱パラメータとしたときの電子波動関数のベリーの位相と見なせる、ということである。フォノンの波動関数 ϕ も符号が変わるので、全波動関数 $\psi\phi$ は勿論一価関数となる。

2. ヤーン・テラー効果

結晶中の錯体(例えば MgO 中の Cu)の電子と原子核に対する全ハミルトニアン

$$\mathcal{H}_{\text{total}} = \mathcal{H}_{\text{el}} + \mathcal{H}_{\text{n}} + \mathcal{H}_{\text{el-n}}$$

の中の電子と核との相互作用は、核の平衡の回りの基準振動座標 \mathbf{Q} を用いて

$$\mathcal{H}_{\text{el-n}} = V_{\text{cf}} + \sum_{\Gamma} V_{\Gamma}^{(1)} Q_{\Gamma} + \dots$$

のように展開される。ここで V_{cf} は結晶場ポテンシャル、 Γ は錯体の対称群の既約表現。 $\mathcal{H}_{\text{el}} + V_{\text{cf}}$ で決まる電子状態が縮退している(ヤーン・テラー・イオン)の場合、この展開は、上式右辺のように Q の一

次の項が主要項となる。例としては、図1のように、八面体のMX₆型鎖体があり、この場合関与するのは2種の電子波動関数

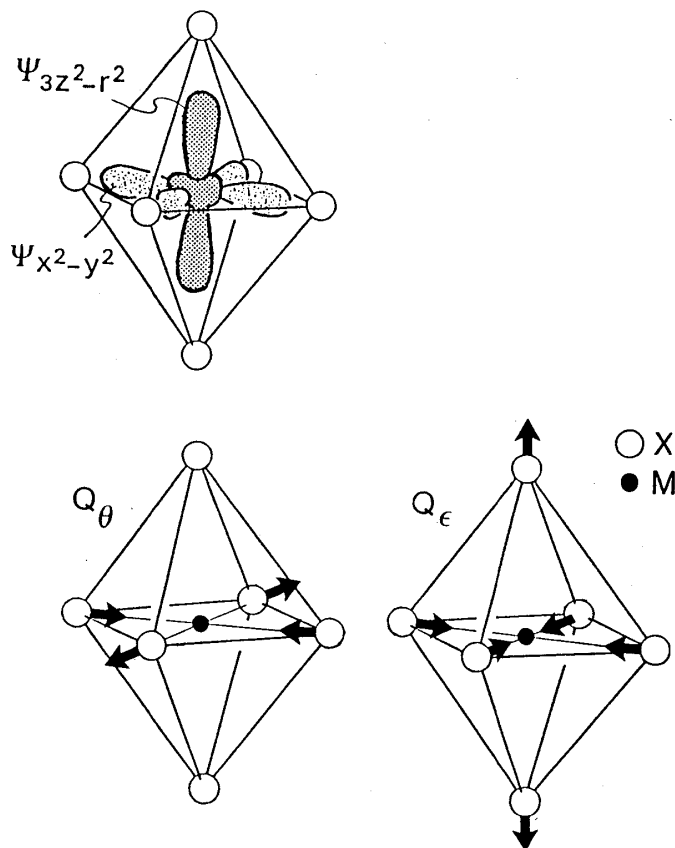


図1

$$\psi_{\theta} \propto (3z^2 - r^2)$$

$$\psi_{\epsilon} \propto (x^2 - y^2)$$

と2種のフォノン基準モード Q_{θ} , Q_{ϵ} である。 ψ_{θ} , ψ_{ϵ} を基底とすると

$$\mathcal{M}_{el-n} \propto \begin{pmatrix} -Q_{\theta} & Q_{\epsilon} \\ Q_{\epsilon} & Q_{\theta} \end{pmatrix}$$

と表わされ、これを対角化する電子状態は Q を

$$Q_{\theta} = \rho \sin \theta$$

$$Q_{\epsilon} = \rho \cos \theta$$

と表わすと、

$$\psi^{+} = \psi_{\theta} \cos \frac{\theta}{2} + \psi_{\epsilon} \sin \frac{\theta}{2}$$

$$\psi^{-} = -\psi_{\theta} \sin \frac{\theta}{2} + \psi_{\epsilon} \cos \frac{\theta}{2}$$

となる。これら ψ^\pm は、 $\theta \rightarrow \theta + 2\pi$ とすると符号を変えるが、これは、 $Q_\theta - Q_\epsilon$ 空間で \mathbf{Q} を円上を断熱的に一周させたときに電子波動関数が得るベリーの位相と見なせる。

3. 擬スピンによる記述

上と同等であるが、もう一つの見方が擬スピン^[8,9]

$$\tau = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$$

を用いても与えられる。ここで $\tau_z = +\frac{1}{2}$ ($-\frac{1}{2}$) が ψ_ϵ 占有 (ψ_θ 占有) に対応するが、詳しくはパウリ行列と同形に

$$\begin{aligned} \tau_+ &= C_\epsilon^\dagger C_\theta, \quad \tau_- = C_\theta^\dagger C_\epsilon, \\ \tau_z &= \frac{1}{2} (C_\epsilon^\dagger C_\epsilon - C_\theta^\dagger C_\theta) \end{aligned}$$

で定義される。ヤーン・テラー結合が

$$\mathcal{M}_{el-n} \propto Q_\theta \tau_x + Q_\epsilon \tau_z$$

であることから、 τ が \mathbf{Q} 方向での上下向スピン状態で対角化され、この際のスピン軸の回転に対し、(ψ_ϵ , ψ_θ) がスピノルと同じ変換性をもつことが、ベリーの位相に対応するといえる。この変換性は、構造的には、 \mathcal{M}_{total} と交換する有効スピンが存在する為で、これが交換したのは、関与するモードが2個のみ (\mathcal{M}_{el-n} の中に τ_x , τ_y , τ_z の内2個だけが現われる) ことに由来する。これから、上の議論が一般にどのような場合に成立つかがわかる。これらの協力的ヤーン・テラー効果等への拡張も面白い問題であろう。

References

- [1] D. Arovas, J. R. Schrieffer and F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 722.
- [2] Q. Niu, D. J. Thouless and Y. S. Wu, Phys. Rev. **B31** (1985) 3372.
- [3] H. Aoki and T. Ando, Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 3093.
- [4] G. Delacrétaz, E. R. Grant, R. L. Whetten, L. Wöste and J. W. Zwanziger, Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 2598.
- [5] F. Wilczek and A. Zee, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 2111.
- [6] F. S. Ham, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 725.
- [7] H. C. Longuet-Higgins, U. Öpik, M. H. L. Pryce and R. A. Sack, Proc. Roy. Soc. London, Ser. **A244** (1958) 1.
- [8] K. I. Kugel' and D. I. Khomskii, Sov. Phys. -JETP **37** (1973) 725.
- [9] H. Aoki and H. Kamimura, Solid State Commun. **63** (1987) 665.