

動的 $E \otimes e$ Jahn-Teller 問題の強結合極限における解析解○ 佐藤徹^{1,2,3}, Liviu F. Chibotaru³, Arnout Ceulemans³¹ 京都大学福井謙一記念研究センター (〒606-8103 京都府京都市左京区高野西開町 34-4)² 京都大学大学院工学研究科 (〒615-8510 京都府京都市西京区京都大学桂)³ ルーヴァンカトリック大学化学科 (Celestijnenlaan 200F B-3001 Heverlee Belgium)

緒言

2重に縮退した電子状態 E と 2重に縮退した振動状態 e が結合した $E \otimes e$ Jahn-Teller 系を記述する動的 Jahn-Teller 方程式について、1958年に Longuet-Higgins らは数値解を求めている¹。この方程式の特定の結合定数に対する解析解は Judd により得られているが²、任意の結合定数に対する解析解はいまだ得られていない³。一方、結合定数 g の十分大きな極限に対する近似解を求める努力も近年まで続けられてきた⁴。今回我々は、 $E \otimes e$ 動的 Jahn-Teller 問題の強結合極限において、断熱近似した decoupled 方程式の解析解を得たので報告する。また、断熱近似のもとでの $E \otimes e$ 動的 Jahn-Teller 方程式の数値解を求め、得られた解析解と比較した。さらに得られた解析解を用いて非断熱相互作用積分を求めた。

結果と考察

強結合極限における粗い近似のもとでの解析解は従来から知られているが¹、境界条件が正しく満たされていないため、非断熱積分が発散するなどの欠陥が存在した。今回得られた解は正しい境界条件を満足するため、この発散の問題は解決された。得られた解析解と Longuet-Higgins らにより求められた数値解との比較から、強結合極限において、得られたエネルギーの表式は g^{-4} まで正しいこと、非断熱相互作用は g^{-6} 程度であることがわかった。また、Longuet-Higgins らにより数値的に求められたエネルギースペクトルにみられる結合定数の小さな領域での振動的挙動は、lower surface と upper surface の間の avoided crossing によるものであることがわかった。

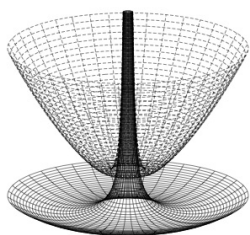


図 1. $E \otimes e$ Jahn-Teller 系の遠心項を含んだエネルギー曲面。lower surface と upper surface からなる。原点でエネルギーが発散することに注意。

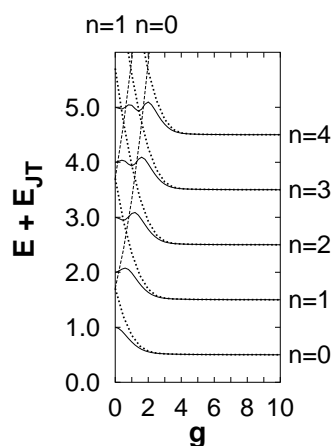


図 2. 動的 $E \otimes e$ Jahn-Teller 系のエネルギースペクトル。ここで定数 g は結合定数、 $E_{JT} = 1/2g^2$ は Jahn-Teller 安定化エネルギーで、エネルギーは $\hbar\omega$ 単位で示している。実線は coupled 方程式の解、点線が lower surface についての decoupled 方程式の解である。

参考文献

- ¹ H. Longuet-Higgins, U. Öpik, M. Pryce, and R. Sack, Proc. R. Soc. London Ser. A **244**, 1 (1958).
- ² B. Judd, J. Phys. C: Solid State Phys. **12**, 1685(1979).
- ³ M. Szopa and A. Ceulemans, J. Phys. A: Math. Gen. **20**, 6327(1987).
- ⁴ J. Dunn and M. Eccels, Phys. Rev. B **64**, 195104(2001).