

4C03

$E \otimes e$ 動的 Jahn-Teller 問題: 強結合極限での近似解析解

(ルーヴァンカトリック大¹, 京大福井セ², 京大院工³)

佐藤 徹^{1,2,3}, Liviu F. Chibotaru¹, Arnout Ceulemans¹

1 序

電子状態と振動状態がともに 2 重縮退した $E \otimes e$ Jahn-Teller 系の動的 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は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現在まで続けられてきた⁴。

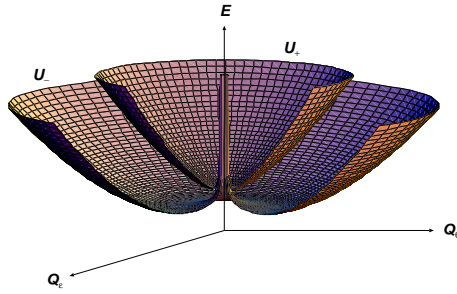
今回我々は、 $E \otimes e$ 動的 Jahn-Teller 問題の強結合極限における近似解析解を得た。さらに、断熱近似のもとでの $E \otimes e$ 動的 Jahn-Teller 方程式の数値解を求め、得られた解析解と比較した。また、得られた近似解を用いて非断熱相互作用積分を求めた。

2 結果と考察

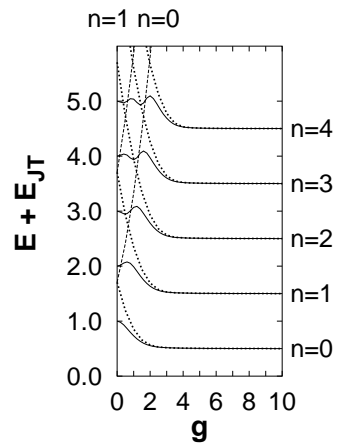
強結合極限における粗い近似での解析解は従来から知られているが¹、境界条件が正しく満たされていないため、非断熱積分が発散するなどの欠陥が存在した。今回得られた解は正しい境界条件を満足するため、この発散の問題は解決された。得られた近似解析解と Longuet-Higgins らにより求められた数値解との比較から、強結合極限において、得られたエネルギーの表式は g^{-4} まで正しいこと、非断熱相互作用は g^{-6} 程度であることがわかった。また、Longuet-Higgins らにより数値的に求められたエネルギースペクトルにみられる結合定数の小さな領域での振動挙動は、avoided crossing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

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).



⊠ 1: Potential energy surfaces of the linear $E \otimes e$ problem including centrifugal energy.



⊠ 2: Comparison of the numerical solutions for the decoupled equations of the lower sheet (dotted lines) and upper sheet (broken lines) for $j = 1/2$ with those of the coupled equation (solid lines) calculated using the $N = 100$ circular oscillator basis functions after Ref. 1 in the range of $0 \leq g \leq 10$, where g is dimensionless coupling constant. Energy unit is $\hbar\omega$, and $E_{JT} = 1/2g^2$ Jahn-Teller stabilization energy.