

結晶の電子状態に現れる相対論効果とパリティ対称性の破れ

播磨尚朝 (Hisatomo HARIMA)

神戸大学大学院理学研究科 (Graduate School of Science, Kobe University)

相対論効果を私たちの日常生活において考える機会はほとんどない。しかしながら、物質の電子状態を通じて相対論効果は広く日常生活に関わっている。相対論効果を考慮した場合に、一電子のシュレーディンガー方程式には、スカラー項（質量補正やダーウイン項）とスピン軌道相互作用という2種類の補正項が現れる[1]。スピン空間と実空間を結びつける後者の相互作用は、磁気異方性やマルチフェロイクスの起源として議論されているが、前者のことはあまり話題に上らない。実は、いずれの相対論効果も異なった形で日常的に現れている。

典型的な電子の速度を u として、 $(u/c)^2$ の割合で相対論効果は現れる。通常の電子状態のエネルギーでは $(u/c)^2$ は極めて小さい。ではなぜ、相対論効果は現れるのだろうか。それについては、原子やイオンの正電荷が多くの内殻電子によって遮蔽されていることに注意する必要がある。例えば、金の1s電子に対する $(u/c)^2$ は約0.3であり、金の内殻電子には大きな相対論効果が生じている。この相対論効果によって、金の5d電子の励起が可視光域で可能になり、私たちは金色を目にすることができる。実は、スピン軌道相互作用の大きさも原子核近傍の強いポテンシャルでほぼ決まってしまう、原子間のポテンシャルの変化には極めて鈍感である[2]。

さて、通常の物理現象は空間反転を行っても変化しない。このことをパリティ対称性がある、または、パリティが保存されている、と言う。ところが、結晶には空間反転対称性がないものが数多くある。それらは、原子位置で空間反転対称性がないものと巨視的な結晶全体として空間反転対称性のないものに大別される[3]。前者の典型例をダイヤモンド構造とすれば、後者の例は閃亜鉛鉱型（ジンクブレンド型）構造となる。この他にも表面状態を考えれば、空間反転対称性が欠如していると考えられる。結晶でのパリティ対称性の破れは一般に電子状態の縮退を解く。この状態の分裂の背景にはスピン軌道相互作用が重要な役割を果たしているが、分裂の大きさはスピン軌道相互作用の大きさでは決まらない[2, 3]。バンドのパリティ対称性の破れによるエネルギー利得によって相転移する $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ の電子状態を例に、パリティ対称性の破れと電子状態の関係について解説する。

講演内容の一部については、新潟大学の柳瀬陽一氏との共同研究である。

[1] D D Koelling and B N Harmon, J. Phys. C: Solid State Phys. **10** 3107 (1977).

[2] 柳瀬陽一・播磨尚朝、「スピン軌道相互作用と結晶中の電子状態」(その1～その3)、固体物理 **46-5**, 229 (2011); **46-6**, 283 (2011); **47-3**, 101 (2012).

[3] 播磨尚朝、「群と結晶」、数理物理 (特集: 群と物理学) **601** 34 (2013).