

# スピン軌道相互作用を有する 1 次元分子鎖の 局所磁場による特異点多様体の変化

ダンハム 優仁<sup>A</sup>, Gonzalo Ordonez<sup>B</sup>, Savannah Garmon<sup>A</sup>, 神吉 一樹<sup>A</sup>, 田中 智<sup>A</sup>  
阪府大院理<sup>A</sup>, Butler Univ. Phys.<sup>B</sup>

<sup>A</sup>Dept. Phys. Osaka Pref. Univ. <sup>B</sup>Dept. Phys. Butler Univ.

## Variation of the Exceptional Manifold of One-dimensional Molecular Chain with the Spin-Orbit Coupling in terms of an External Local Magnetic Field

Yujin Dunham<sup>A</sup>, Gonzalo Ordonez<sup>B</sup>, Savannah Garmon<sup>A</sup>, Kazuki Kanki<sup>A</sup>, and Satoshi Tanaka<sup>A</sup>  
<sup>A</sup>Dept. Phys. Osaka Pref. Univ. <sup>B</sup>Dept. Phys. Butler Univ.<sup>A</sup>

We analyzed the complex energy structure of the non-Hermitian effective Hamiltonian in the magnetic field parameter space for a microscopic dissipative system in which a local external magnetic field is applied to the end of a semi-infinite long molecular chain with spin-orbit coupling. The symmetry of the system changes depending on the angle between the magnetic field and the orbital angular momentum determined by the molecular chain axis, and the manifold structure of the exceptional point changes characteristically. In particular, two kinds of qualitatively different exceptional points appear when the molecular axis and the magnetic field are orthogonal. We also propose Electron Spin Resonance (ESR) as a method to observe the exceptional singularity. We show how the shape of the absorption spectrum would be changed by the angle of the magnetic field.

## 1 はじめに

近年、量子力学の理論的基盤が広がり、散逸過程が理論の枠組みに含まれるようになってきた [1-4]。特に複素固有値問題における可逆・不可逆転移点は、固有値が縮退するだけでなく、固有状態も縮退する特異点 (例外点: Exceptional Point) として現れることが知られてきた [5]。量子系を特徴づけるパラメータ空間における固有エネルギー多様体の特異点の出現は、対称性に由来する系の普遍的な特徴を表している。例えば、系がパリティ・時間対称性を持っている場合には、EP 曲線、EP 曲面などの高次元の特異点多様体を示すことが明らかになってきた [6-9]。

このような特異点の研究のために、ゲインとロスが実験的に制御可能なフォトニック結晶を用いた研究が行われている [10, 11]。フォトニック系では、近軸近似されたマクスウェル方程式がシュレディンガー方程式の量子的アナロジーとみなされている。しかし、このスペクトル構造の類似にも関わらず、両者の間には量子場と古典電磁場という本質的な違いがある。この違いが顕著となるのは、古典的なアナロジーを持たない量子状態間の量子飛躍 (遷移) である。特異点の近傍では量子状態の変化がパラメータ変化に対して非線形的に振る舞うので、この変化は量子遷移に明瞭に現れるであろう。従って、特異点多様

体を持つ実際の量子系を探し、特異点近傍での量子遷移の非線形的な振る舞いを明らかにすることが重要になる。

本論文では、特異点多様体を示す量子系として、外部磁場下でのドーピングされたポリアセチレンを考える。外部磁場とスピン軌道相互作用の異方性に応じて特異点多様体の構造が質的に変化することを示す。この質的な変化は更にドナー電子に対する共鳴状態間の電子スピン共鳴 (ESR) 遷移に明瞭に反映されることを示す。

## 2 モデル

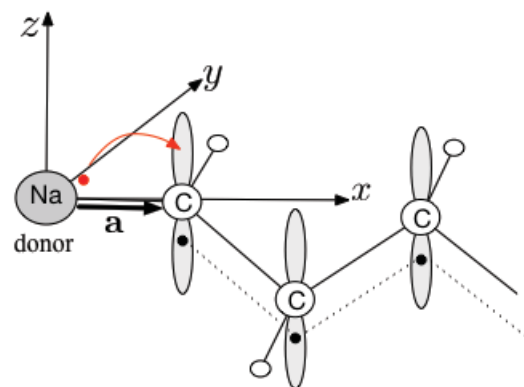


図1 アルカリドナー原子を有する一次元共役分子鎖

本研究では、1次元タイトバインディングモデルによって記述される分子鎖の端にドナー原子が結合したモデルを考える。電荷移動はドナー原子から分子鎖の  $\pi^*$  伝導帯に行われるとする。ここでドナー原子に働く局所的な外部磁場を考慮する。さらに、ドナー原子からの電荷移動においてスピン軌道相互作用を考慮する。外部磁場下での非相対論的ドナー電子の全ハミルトニアンは、次のように記述される。

$$H_{\text{tot}}(\mathbf{B}) = g_B \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) + \xi_{\text{SO}} \hat{\mathbf{s}} \cdot (\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}) + \sum_{\alpha} v \left( \hat{c}_{0,\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{1,\alpha} + \hat{c}_{1,\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{0,\alpha} \right) - J \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha} \left( \hat{c}_{n+1,\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{n,\alpha} + \hat{c}_{n,\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{n+1,\alpha} \right) \quad (1)$$

ここで  $\hat{c}_{i,\alpha}^{\dagger}$  ( $\hat{c}_{i,\alpha}$ ) は電子のフェルミオン演算子であり、 $i, \alpha$  はそれぞれ分子鎖サイト番号とスピンの向きを表している。 $v$  はドナー原子から分子鎖へのチャージトランスファーを、 $J$  は分子鎖内の  $\pi^*$  伝導体のトランスファーを表している。スピン演算子はパウリ行列を使い、 $\hat{\mathbf{s}} \equiv \hbar \hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$  のように表せられる。第一と第二項はそれぞれ外部磁場によるゼーマン効果とドナー原子から分子鎖へのチャージトランスファーに伴って起こるスピン軌道相互作用項である [12,13]。

### 3 複素固有値問題

共鳴特異性による散逸過程は、拡張ヒルベルト空間における全ハミルトニアンの複素固有値問題により定式化される [14]。実際の右 (左) 複素固有値問題は

$$\hat{H}_{\text{tot}}(\mathbf{B})|\phi_{\xi}(\mathbf{B})\rangle = z_{\xi}(\mathbf{B})|\phi_{\xi}(\mathbf{B})\rangle, \quad (2)$$

$$\langle \tilde{\phi}_{\xi}(\mathbf{B})|\hat{H}_{\text{tot}}(\mathbf{B}) = z_{\xi}(\mathbf{B})\langle \tilde{\phi}_{\xi}(\mathbf{B})|, \quad (3)$$

となる。ここで右固有状態  $|\phi_{\xi}\rangle$  と左固有状態  $\langle \tilde{\phi}_{\xi}|$  は同じ固有値  $z_{\xi}$  を持つ。この固有状態は双直交性と双完全性を成す。

$$\delta_{\xi,\xi'} = \langle \tilde{\phi}_{\xi}|\phi_{\xi'}\rangle, \quad 1 = \sum_{\xi} |\phi_{\xi}\rangle \langle \tilde{\phi}_{\xi}|. \quad (4)$$

全ハミルトニアン  $H_{\text{tot}}$  は、無限次元行列なので、この固有値問題を解くために Brillouin-Wigner-Feshbach の射影演算子法を用いる。射影演算子として  $\hat{P}_0 \equiv \sum_{\alpha} |0, \alpha\rangle \langle 0, \alpha|$  をとる。この補空間への射影は、 $\hat{Q}_0 = 1 - \hat{P}_0 = \sum_{\alpha} \int dk |k, \alpha\rangle \langle k, \alpha|$  である。この射影演算子を固有値問題 Eqs.(2)(3) に作用し、

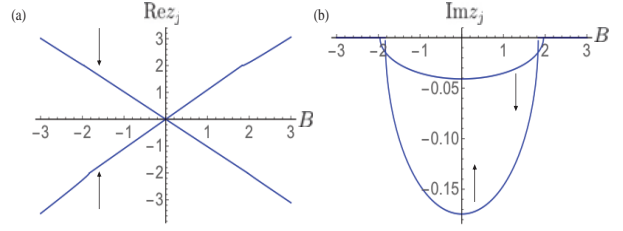


図2 有効ハミルトニアンの固有値、 $B > 0$  は  $\theta_B = 0$ 、 $B < 0$  は  $\theta_B = \pi$ ; (a) 固有値の実部 (b) 固有値の虚部. パラメーターはそれぞれ  $v = 0.3$ 、 $L = 0.1$ . 灰色の直線はドナースピン状態の無摂動エネルギーを表している。

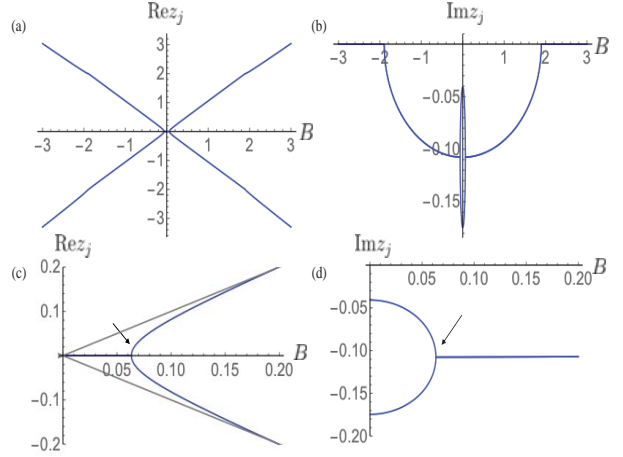


図3 有効ハミルトニアンの固有値、 $B > 0$  は  $\theta_B = \frac{\pi}{2}$ 、 $B < 0$  は  $\theta_B = \frac{2\pi}{3}$ ; パラメーターは図2と同じ。(c) と (d) はそれぞれ固有値の実部と虚部の拡大図。

有効ハミルトニアン

$$H_{\text{eff}}(z) = H_0 + \Sigma(z) = \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} + \Sigma^+(z) \begin{pmatrix} (v+L)^2 & 0 \\ 0 & (v-L)^2 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

を得る。ここで、自己エネルギー  $\Sigma^+(z)$  は、

$$\Sigma^+(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} dk \frac{\sin^2 k}{(z - \omega_k)^+} = \frac{1}{2} \left( z - \sqrt{z^2 - 4} \right). \quad (6)$$

で与えられ、連続極限では波数  $k$  が連続変数となりコーシー積分の形になることに注意する [14]。固有値は有効ハミルトニアンの固有値問題を解くことによって得られる。この固有値は外部磁場の大きさ ( $B$ ) と軌道角運動量と外部磁場とのなす角度 ( $\theta_B$ ) の2つの外部パラメーターに依存する。

図2は、軌道角運動量と外部磁場とのなす角度が平行の時 ( $\theta_B = 0$ ) の有効ハミルトニアンの固有値である。内部パラメーターは  $v = 0.3$  と  $L = 0.1$  である。またそれぞれ (a) 固有値の実部、(b) 固有値の虚部である。(a) より、ドナー電子のスピン状態がゼーマン

効果により、分裂しているのがわかる。また  $B = 0$  で2つの状態が交差していることが見られる。しかし (b) 虚部では交わっていないため、 $B = 0$  は縮退点ではないことがわかる。この2つの状態は虚部を持つために束縛状態ではなく、共鳴状態となっている [14]。また  $B = \pm 2$  では固有値の虚部が現れ、2つの実部が合体する例外点がある。この例外点の由来はエネルギー共鳴の特異性による可逆・不可逆転移であり、角度  $\theta_B$  に寄らずに現れ、 $(B_x, B_y, B_z)$  空間では EP 曲面を形成する。

軌道角運動量と外部磁場とのなす角度が垂直になると、図3のように分かれていた2つの虚部が合体し、連続状態の中にスピン軌道相互作用と外部磁場の対称性に由来する新しい例外点が現れる。この例外点は分散方程式が偶数の多項式になり、解が  $z_j$  と  $-z_j$  のペアで出てくるために現れる。 $\theta_B = \frac{\pi}{2}$  の時にもみ現れるこの例外点は  $(B_x, B_y)$  平面において EP リングを形成する。この値は  $B_{EP} \simeq 0.063$  となっている。また  $\theta_B = 0$  の時と同様に  $B = \pm 2$  ではエネルギー共鳴の特異性由来する EP 曲面が現れる。

固有値を求めたことにより、ハミルトニアン固有状態も求めることができる。実際の全ハミルトニアン固有状態は有効ハミルトニアンの固有状態に  $\hat{Q}_0$  成分を加えることにより求まる。

$$\begin{aligned} |\phi_\xi\rangle &= \hat{P}_0|\phi_\xi\rangle + \frac{1}{z_\xi - \hat{Q}_0\hat{H}_0\hat{Q}_0}\hat{Q}_0\hat{W}\hat{P}_0|\phi_\xi\rangle \\ &= \langle 0, +|\phi_\xi\rangle \left\{ |0, +\rangle + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int dk \frac{v+L}{z_\xi - \omega_k} |k, +\rangle \right\} \\ &+ \langle 0, -|\phi_\xi\rangle \left\{ |0, -\rangle + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int dk \frac{v-L}{z_\xi - \omega_k} |k, -\rangle \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

## 4 共鳴状態間電子スピン共鳴 (ESR)

ここでは電子スピン共鳴のスペクトルが、特異点多様体の構造を観測する有力な検出方法であることを示す。前節で求めた共鳴状態の固有値と固有状態を用いて、ドナーサイトに交流プローブ磁場が働いた場合の ESR スペクトルを計算した。ESR スペクトルはプローブ磁場に関する一次摂動によって以下のように表される [15]。

$$F(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+z_j)t - \epsilon t} \langle \psi_j | \hat{T}^\dagger e^{-i\hat{H}_{\text{tot}}t} \hat{T} | \psi_j \rangle \quad (8)$$

ここで  $|\psi_j\rangle$  は  $\hat{H}_{\text{tot}}$  の固有状態であり、 $z_j$  は固有値、 $\omega$  はプローブ磁場の振動数である。電子スピン

共鳴の遷移演算子は

$$\hat{T} = 2\mu\mathbf{T} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \sum_i \mu T_i \hat{\sigma}_i, \quad (9)$$

であり、 $T_i$  プローブ磁場の振幅、 $\mu$  は結合定数である。

ここでは電子スピン共鳴遷移として2つの共鳴状態  $|\phi_\xi\rangle$  と  $|\phi_{\xi'}\rangle$  間の遷移を考える。より安定な共鳴状態を初期状態とする。すなわち  $|\text{Im}z_\xi| < |\text{Im}z_{\xi'}|$  の時、 $|\psi_j\rangle = |\phi_\xi\rangle$  と取る。よってスペクトルは外部磁場パラメーター  $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$  とプローブ磁場パラメーター  $\mathbf{T} = (T_x, T_y, T_z)$  によって

$$F(\omega) = -\text{Im} \sum_{i=x,y,z} \frac{\mu^2 T_i^2}{\pi} \frac{\langle \tilde{\phi}_\xi(\mathbf{B}) | \hat{\sigma}_i^\dagger | \phi_{\xi'}(\mathbf{B}) \rangle \langle \tilde{\phi}_{\xi'}(\mathbf{B}) | \hat{\sigma}_i | \phi_\xi(\mathbf{B}) \rangle}{\omega + z_\xi(\mathbf{B}) - z_{\xi'}(\mathbf{B}) + i\epsilon} \quad (10)$$

と表される。

図2の軌道角運動量と外部磁場とのなす角度が平行の時に対する ESR スペクトルを図4に示した。スペクトルはピーク強度で規格化している。磁場の大きさを (a)  $B = 0.045$  から (h)  $B = 0.07$  まで単調に変えた時のスペクトルを示している。ESR のスペクトルのピークの位置と幅はそれぞれ図2の実部のエネルギー差と虚部のエネルギー差に対応している。図2から分かるようにこの磁場の値ではドナー電子のエネルギー準位は連続状態と共鳴しており、固有状態は共鳴状態となっている。外部磁場  $B$  の増大に伴い、ピークは単調に高周波数側に移動する。また  $B$  の増大とともに、次第に固有値虚部の差が小さくなるため、幅は小さくなる。

次に図3の軌道角運動量と外部磁場とのなす角度が垂直の時に対する ESR スペクトルを図5に示した。ESR のスペクトルのピークの位置と幅はそれぞれ図3の実部のエネルギー差と虚部のエネルギー差に対応している。先ほどと同じように (a)-(h) はそれぞれ磁場の大きさを単調に変化させた時の ESR スペクトルである。磁場の値が EP リング  $B_{EP} \simeq 0.063$  の前後で ESR スペクトルは劇的に変化することが見られる。(a)(b)(c)(d) の ESR スペクトルは  $\omega = 0$  に最大値を持ち、緩やかに幅が減少する。 $B$  が  $B_{EP}$  を超えた途端、(e) ピークは鋭くなり、ピーク位置が急激に移動する。その後 (e)(f)(g)(h) の ESR スペクトルは、鋭いピークを保ったまま外部磁場の増大とともにピーク位置が高周波数側に単調に移動する。これは例外点 (EP リング) の出現により2つの共鳴状態が、異なる実部の値を持つようになる一方、虚部が同じ値を持つようになり、虚部の差が0になるためである。

このように、軌道角運動量と外部磁場とのなす角度が垂直の時にもみ現れる例外点の影響により、ESR スペクトルの描像が大きく変わることがわかる。この変化を捉えることで特異点多様体の存在を観測できる。

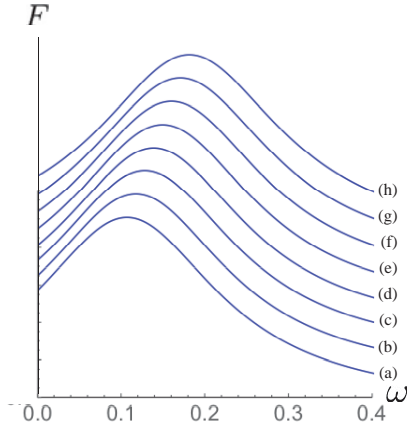


図4 磁場  $B_z$  に対しての ESR スペクトラム, i. e.  $\theta_B = 0$ ; (a)  $B_z = 0.045$  (b)  $B_z = 0.05$  (c)  $B_z = 0.055$  (d)  $B_z = 0.06$  (e)  $B_z = 0.065$  (f)  $B_z = 0.06$  (g)  $B_z = 0.065$  (h)  $B_z = 0.07$ . パラメーターはそれぞれ  $\nu = 0.3$ ,  $L = 0.1$ . スペクトルはピーク強度で規格化している.

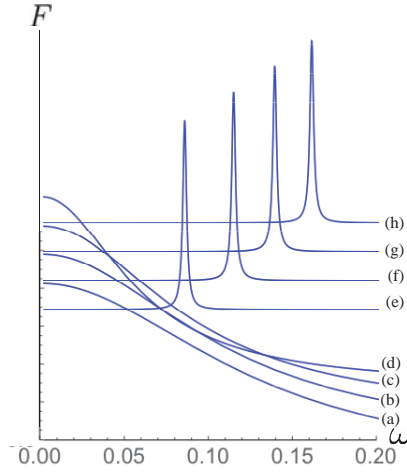


図5 磁場  $B_x$  に対しての ESR スペクトラム, i. e.  $\theta_B = \frac{\pi}{2}$ ; (a)  $B_x = 0.045$  (b)  $B_x = 0.05$  (c)  $B_x = 0.055$  (d)  $B_x = 0.06$  (e)  $B_x = 0.065$  (f)  $B_x = 0.06$  (g)  $B_x = 0.065$  (h)  $B_x = 0.07$ . パラメーターはそれぞれ  $\nu = 0.3$ ,  $L = 0.1$ . スペクトルはピーク強度で規格化している.

## 5 おわりに

本研究では、特異点多様体を示す実際の量子系として、外部磁場下でのドーピングされたポリアセチレンを考えた。外部磁場パラメータ空間において、軌道角運動量と外部磁場とのなす角度を変化させることにより特異点多様体の構造が質的に変化することを示した。

また共鳴状態の固有関数を起源とするこの特異点多様体に関連した量子遷移として孤立したドナー電子の共鳴状態間の電子スピン共鳴 (ESR) を示した。軌道角運動量と外部磁場とのなす角度が平行の時はあまり変化がなかった ESR のスペクトルの描像が、角度が垂直の時には劇的に変化する事を示した。この変化を捉えることができる ESR は、例外点の存在の観測方法として有効な方法であることがわかった。

## 参考文献

- [1] N. Hatano and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **77**, 570 (1996).
- [2] C. M. Bender and S. Boettcher, Physical Review Letters **80**, 5243 (1998).
- [3] C. M. Bender, S. Boettcher, and P. N. Meisinger, Journal of Mathematical Physics **40**, 2201 (1999).
- [4] C. M. Bender et al., PT Symmetry (WORLD Scientific (EUROPE), 2019).
- [5] T. Kato, A Short Introduction to Perturbation Theory for Linear Operators (Springer New York, 2012).
- [6] K. Esaki, M. Sato, K. Hasebe, and M. Kohmoto, Phys. Rev. B **84**, 205128 (2011).
- [7] V. Dwivedi and V. Chua, Physical Review B **93** 1510, (2016).
- [8] Y. X. Zhao, A. P. Schnyder, and Z. D. Wang, Physical Review Letters **116**, 1 (2016).
- [9] Y. X. Zhao and Y. Lu, Physical Review Letters **118**, 1 (2017).
- [10] Z. Lin et al., Physical Review Letters **106**, 1 (2011).
- [11] L. Feng, Z. J. Wong, R.-M. Ma, Y. Wang, and X. Zhang, Science **346**, 972 (2014).
- [12] S. Konschuh, M. Gmitra, and J. Fabian, Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics **82**, 1 (2010).
- [13] A. H. Castro Neto and F. Guinea, Phys. Rev. Lett. **103**, 1 (2009).
- [14] T. Petrosky, I. Prigogine, and S. Tasaki, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **173**, 175 (1991).
- [15] T. Fukuta, S. Garmon, K. Kanki, K. Noba, and S. Tanaka, Phys. Rev. A **96**, 52511 (2017).