

안-텔러 효과와 베리 위상

방길현 · 민병일*

포항공과대학교 물리학과, 경북 포항시 남구 효자동, 790-784

(2006년 9월 28일 받음, 2006년 10월 9일 최종수정본 받음)

전자-포논 상호작용 때문에 생기는 안-텔러 효과를 팔면체 구조를 가진 분자의 예를 들어 설명하였다. 그리고 베리 위상의 물리적 의미를 살펴본 후, 동적 안-텔러 효과에서 나타나는 베리 위상에 대해 알아보았다.

주제어 : 안-텔러, 베리 위상, 동적 안-텔러 효과

I. 서 론

1936년 얀(Hermann Jahn)과 텔러(Edward Teller)는 비선형 분자에서 전자의 에너지 준위 겹침이 있을 때, 전자-포논 상호작용에 의해 분자의 대칭성이 파괴되면서 에너지 준위의 겹침이 깨지고 분자의 에너지가 낮아진다는 안-텔러 효과를 발표하였다[1]. 이 이론은 분자의 구조만이 아니라 고체의 결정구조 파악에도 많은 도움을 주고 있다. 그리고 안-텔러 효과가 나타나는 물질의 특성을 파악하는 데 있어 안-텔러 효과의 역할에 대한 많은 연구들이 진행되어 왔다.

베리 위상(Berry's phase)이란 양자 세계에서 어떤 변수가 단열 변화를 통해 한 바퀴 돌아 원래 위치로 왔을 때 얻어지는 기하학적 위상을 뜻한다. 이것은 1984년 베리에 의해 처음 도입되었으며[2], 이 이론을 통하여 많은 물리적 현상에 대한 새로운 이해가 정립되고 있다. 특히 자성을 가지는 물질들에서 나타나는 비정상 홀 효과(anomalous Hall effect)를 초거대자기저항(colossal magnetoresistance: CMR) 물질들의 경우 베리 위상으로 이해할 수 있다는 사실이 알려진 후[3], 다른 구조의 자성 물질에서 나타나는 비정상 홀 효과를 해석하기 위해 베리 위상이 적용되고 있다[4]. 이처럼 베리 위상에 대한 이해는 자성 물질에서 나타나는 다양한 현상들에 대한 해석에 많은 도움을 주리라 믿어지고 있다.

이 논문에서는 안-텔러 효과와 베리 위상에 대한 설명을 하고, 동적 안-텔러 효과에서 나타나는 베리 위상에 대해 알아보도록 한다.

II. 안-텔러 효과(Jahn-Teller Effect)

안-텔러 효과에 대한 이해를 위해 $\text{Cu}(\text{OH}_2)^{2+}$ 분자구조를 살펴보도록 하자. Fig. 1에서와 같이 이 이온은 중심에 Cu^{2+}

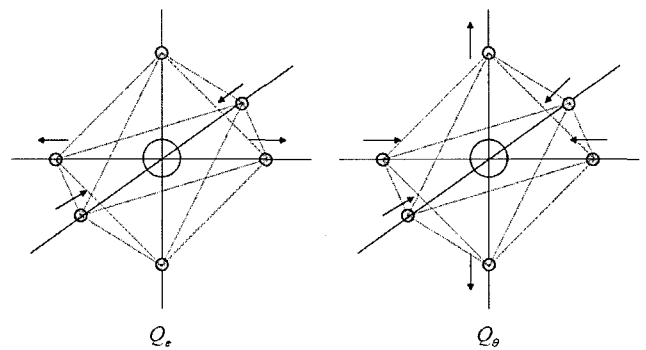


Fig. 1. Two normal modes Q_θ and Q_ϵ of an octahedral molecule.

가 위치하고 그 주변을 6개의 물 분자가 둘러싸고 있는 팔면체 구조를 가진다. Cu^{2+} 의 최외곽 전자배치는 $3d^9$ 으로, 주변에 물 분자가 없다면 5개의 d -오비탈은 같은 에너지 준위를 가지게 된다. 하지만 물 분자와 결합하면 d -오비탈은 물 분자가 가지고 있는 비공유 전자쌍에 의한 결정장(crystal field)의 영향을 받아 낮은 에너지의 3개의 t_{2g} 준위와 높은 에너지의 2개의 e_g 준위로 갈라진다. 여기서 각 준위에 있는 전자들은 에너지 준위 겹침을 가지고 있다. 이 전자들의 에너지 준위는 Cu^{2+} 와 물 분자의 진동의 영향을 받아 에너지 준위 겹침이 깨지면서 서로 다른 에너지 준위로 갈라진다. 그리고 낮은 에너지 준위부터 전자가 채워져서 전체 에너지는 낮아지고 $\text{Cu}(\text{OH}_2)^{2+}$ 는 정팔면체 구조가 아닌 늘어난 팔면체 구조를 가지게 된다(Fig. 2 참조).

안-텔러 효과에서 에너지 겹침이 사라지는 것을 정량적으로 살펴보자. 팔면체 구조를 가진 분자의 안-텔러 효과에 대한 해밀토니안은 다음과 같다.

$$H = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial Q_\theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial Q_\epsilon^2} + Q_\theta^2 + Q_\epsilon^2 \right) + k \begin{bmatrix} -Q_\theta & Q_\epsilon \\ Q_\epsilon & Q_\theta \end{bmatrix} \quad (1)$$

이 해밀토니안의 첫째 항은 두 개의 진동모드 Q_θ , Q_ϵ 에 해당하는 단순조화진동자의 운동에너지와 위치에너지이고, 둘째

*Tel: (054) 279-3099, E-mail: biminn@postech.ac.kr

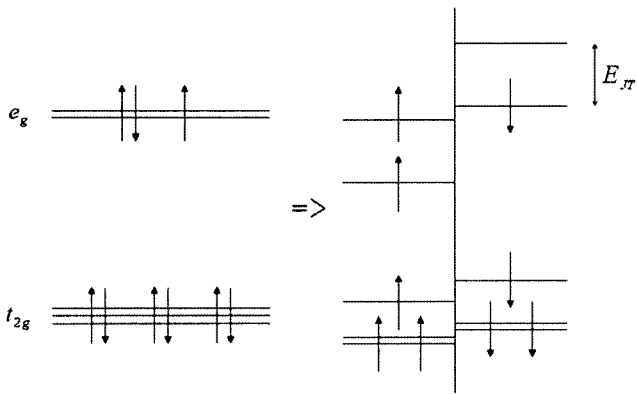


Fig. 2. *d*-Orbital energy levels of Cu^{2+} . Water molecules surrounding Cu^{2+} makes *d*-orbital energy levels of the ion be splitted into three t_{2g} levels and two e_g levels, and those levels are separated again by the Jahn-Teller effect. Energy levels of spin up (\uparrow) and down (\downarrow) electrons are split by the exchange interaction.

항은 진동모드와 에너지 준위 겹침이 있는 e_g 전자와의 선형 결합을 나타낸다. k 는 전자-포논 결합의 크기를 나타내는 결합상수이다. 두 개의 진동모드는 Fig. 1에 나타나 있는데, 굳이 따르면 많은 진동모드들 중에서 이 진동모드들만이 e_g 에너지 준위 겹침을 제거할 수 있다.

계산을 위해 $Q_\theta = R\cos\theta$, $Q_\epsilon = R\sin\theta$ 를 대입하여 해밀토니안의 좌표계를 아래와 같이 극좌표계로 바꾼다.

$$H = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial R}R\frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right) + \frac{1}{2}R^2 + kR \begin{bmatrix} -\cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \quad (2)$$

이 해밀토니안을 대각화하면 고유 에너지는 다음과 같이 구해진다.

$$E = K + \frac{1}{2}R^2 \pm kR \quad (3)$$

여기서 K 는 진동모드의 운동에너지이고, 이 계의 유효 퍼텐셜 $V = 1/2R^2 \pm kR$ 는 R 만의 함수이다. θ 를 0부터 1π 까지 한 바퀴 돌리면서 유효 퍼텐셜을 그리면 Fig. 3과 같은 멕시코 모자형(Mexican Hat) 퍼텐셜을 얻는다. 즉 전자-포논 결합이 해밀토니안에 추가되면서 에너지가 최소가 되는 점이 $R = k$ 로 옮겨졌으며 최소에너지 또한 $-k^2/2$ 만큼 낮아진 것을 알 수 있다. 또한 전자-포논 결합이 강할수록 에너지 갈라짐이 크고 팔면체 구조의 늘어나는 정도 역시 크다.

Fig. 3의 멕시코 모자형 퍼텐셜은 특정 값에서 최소에너지를 가지는 대신 $R = k$ 인 모든 지점에서 최소에너지를 가진다. 이것은 아직 분자는 대칭성을 가지고 있다는 것을 뜻하므로, 안-텔러 효과에 의한 대칭성 파괴를 살펴보기 위해 전자-포논 결합의 2차 혹은 그 보다 높은 차수를 고려해야 한다. 식 (1)의 해밀토니안에 보다 높은 차수의 상호작용

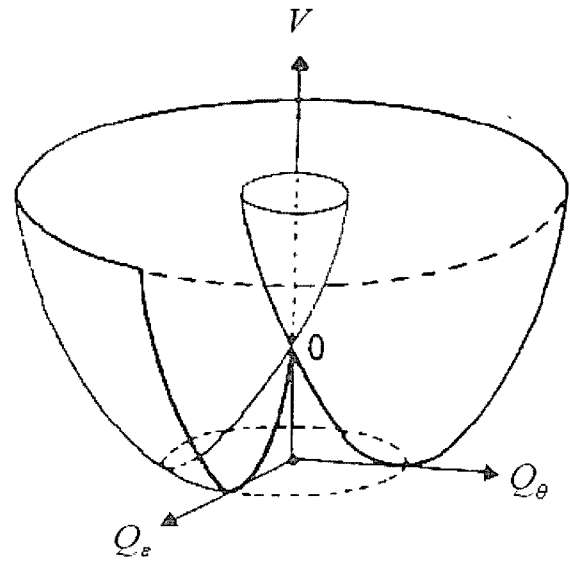


Fig. 3. Mexican hat potential.

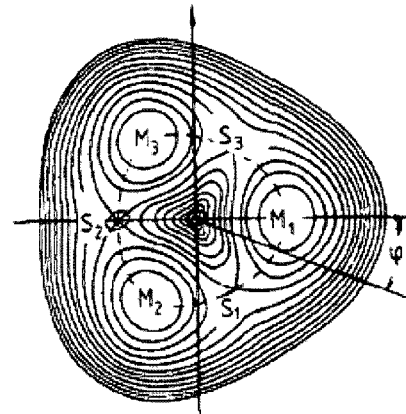


Fig. 4. Warped Mexican hat potential (Reference [17]).

$$A_3R^3(-\cos 3\theta\sigma_z + \sin 3\theta\sigma_x) \quad (4)$$

을 고려하여 계산하면 Fig. 4와 같은 왜곡된 멕시코 모자형 퍼텐셜을 얻을 수 있다. 왜곡된 멕시코 모자형 퍼텐셜은 세 개의 에너지 최소점(M1, M2, M3)과 세 개의 안장점(saddle point; S1, S2, S3)을 가지고 있어, 실제 분자는 세 개의 에너지 최소점 중 한 점에 해당하는 대칭성 파괴가 일어난다. 각각의 에너지 최소점은 x, y, z 축 중 어느 한 축을 따라 늘어난 팔면체 구조를 가짐을 뜻하고, 분자가 에너지 최소점 중 한 곳에 위치할 확률은 같다.

절대 0도 근처에서 전자-포논 결합이 매우 강한 경우, 에너지 최소점 사이의 장벽이 높고 열적 요동이 약하기 때문에 분자의 바닥상태에 해당하는 파동함수는 하나의 에너지 최소점에서 다른 최소점으로 전이가 일어나지 않는다. 그러나 온도가 증가하면 각 바닥상태의 파동함수들간에 겹침이 생기면

서 다른 최소에너지로의 전이가 가능하게 된다. 이러한 전이는 매우 빠른 속도로 일어나므로 스핀 공명 실험을 통해 스펙트럼을 측정하면, 절대 0도 근처에서는 세 개의 에너지 최소점에 해당하는 스펙트럼이 각각 동시에 나타나지만 온도가 증가하면 세 개의 스펙트럼의 열적 평균값으로 측정된다[5]. 이렇게 열적 활성화에 의해 여러 가지의 대칭성 파괴 현상들 간에 전이가 가능한 현상을 “동적 안-텔러 효과(Dynamical Jahn-Teller Effect)”라 한다.

안-텔러 효과는 고체의 결정구조에도 큰 영향을 끼친다. 안-텔러 효과가 나타나는 대표적인 고체로는 $(La_{1-x}M_x)_2CuO_4$ 나 $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ 와 같은 고온 초전도체와 $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ 등의 초거대자기저항 물질들이 있다. La_2CuO_4 의 경우 Cu^{2+} 의 주위를 6개의 산소원자가 둘러싸고 있는데, 안-텔러 효과에 의해 한쪽 방향으로 늘어난 팔면체 구조를 가진다. 이 때 늘어난 축 상의 Cu-O 결합길이는 2.40 Å이고, 늘어나지 않은 축의 Cu-O 결합길이는 1.90 Å으로 안-텔러 효과에 의해 대칭성 파괴가 일어났음을 알 수 있다[6].

최근에는 안-텔러 효과가 고온 초전도체의 구조에 기여하는 것 외에 다른 역할을 하는지에 대한 관심이 증가하고 있다. 특히 고온 초전도체의 경우 전자-포논 상호작용과 초전도 현상과의 강한 상관관계가 실험과 이론 연구를 통해 밝혀졌다[7]. 그 결과 많은 사람들이 안-텔러 상호작용이 초전도 현상에 영향을 미칠 수 있는 모델을 제안하고 있는데, 대표적인 것으로 잉글맨(R. Englman)[8]과 웨버(W. Weber)[9]의 모델이 있다.

초거대자기저항(CMR) 물질들은 특정 온도 이하에서 외부 자기장이 증가함에 따라 저항이 급격하게 감소하는 특징을 가지고 있다. $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ 등의 망간 산화물에서 나타나는 이 현상은 1994년 처음 발견된 이후[10], 많은 연구가 진행되고 있다. 초거대자기저항이 나타나는 망간 산화물 물질들은 망간과 산소 사이에서의 안-텔러 효과에 의하여 작음체 구조를 가진다. 초거대자기저항은 이중교환(double-exchange) 상호작용과 안-텔러 상호작용이 서로 경쟁하면서 나타나는 현상으로 설명되고 있는데[11], 여기에서도 안-텔러 효과는 물질의 구조뿐만 아니라 초거대자기저항의 현상 자체에도 큰 역할을 한다고 믿어지고 있다.

III. 베리 위상(Berry's Phase)

시간에 따라 변수 \mathbf{R} 이 변하고, 계의 해밀토니안이 변수 \mathbf{R} 의 함수라 하자($H(\mathbf{R}(t))$). 베리의 논문[2]에 따르면, 초기 시간 $t=0$ 에서부터 \mathbf{R} 이 경로 C 를 따라 단열 변화하여 T 만큼의 시간이 경과한 후에 원래 값으로 돌아왔을 때의 상태를 $|n(\mathbf{R}_0), t_0=0; T\rangle$ 라 하면 이것은 다음과 같이 표시된다.

$$|n(\mathbf{R}_0), t_0=0; T\rangle = \exp(i\gamma_n(t)) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^T E_n(\mathbf{R}(t')) dt'\right) |n(\mathbf{R}_0)\rangle$$

$$\gamma_n(C) = - \iint_{S(C)} \mathbf{V}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} \tag{5}$$

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) = \text{Im} \nabla_{\mathbf{R}} \times \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle$$

$$= \text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) | m(\mathbf{R}) \rangle \times \langle m(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) | n(\mathbf{R}) \rangle}{(E_n - E_m)^2}$$

여기서 $|n(\mathbf{R}_0)\rangle$ 은 $t=0$ 일 때 해밀토니안의 n 번째 고유상태이고, $\gamma_n(C)$ 을 베리 위상이라 한다. 식 (5)의 첫째 줄 $|n(\mathbf{R}_0), t_0=0; T\rangle$ 의 시간 의존성을 보면 우리가 보통 접하는 에너지의 시간 적분으로 표현되는 동적 위상 외에 추가로 베리 위상이 존재한다. 베리 위상은 시간에 의존하는 해밀토니안으로부터 유래한 물리량인데 \mathbf{R} 이 움직이는 경로와 관계가 있기 때문에 기하학적 성질이 있음을 예상할 수 있다.

베리 위상의 기하학적 특성을 살펴보기 위해 시간에 따라 변하는 자기장 $\mathbf{B}(t)$ 속에 놓인 스핀계를 생각해 보자. 스핀의 크기는 S 이고, 자기장은 단열 정리를 만족하기 위해 그 크기는 일정하고 방향만 아주 천천히 바뀐다고 가정한다. 편의상 자기장과 같은 방향을 z' 축으로 하는 좌표계를 잡으면, z' 방향의 스핀의 크기는 $S_z = m\hbar$ ($m = -S, \dots, +S$)로 표시된다. 만약 자기장이 없다면 $2S+1$ 개의 스핀 상태는 모두 같은 에너지를 가질 것이고, 자기장 변수 공간에서 에너지 꺾임점은 $\mathbf{B}=0$, 즉 원점이다. 자기장이 있을 때 이 스핀계의 해밀토니안은 다음과 같다.

$$H(\mathbf{B}) = -g\mu_S \cdot \mathbf{B}(t)/\hbar \tag{6}$$

이 해밀토니안을 식 (5)에 대입하면 $\mathbf{V}_m(\mathbf{R})$ 은

$$\mathbf{V}_m(\mathbf{R}) = \text{Im} \sum_{m' \neq n} \frac{\langle m(\mathbf{B}) | S/\hbar | m'(\mathbf{B}) \rangle \times \langle m'(\mathbf{B}) | S/\hbar | m(\mathbf{B}) \rangle}{B^2 (m' - m)^2}$$

이고, 사다리 연산자(ladder operator)를 사용하여 계산하면 $\mathbf{V}_m(\mathbf{R})$ 은 다음과 같이 간단하게 표시된다.

$$\mathbf{V}_m(\mathbf{B}) = \frac{m}{B^2} \hat{z}' = \frac{m}{B^2} \hat{\mathbf{B}}$$

이 때 베리 위상 $\gamma_m(C)$ 은 식 (5)로부터 구할 수 있다.

$$\gamma_m(C) = - \iint_{S(C)} \frac{\hat{\mathbf{B}}}{B^2} \cdot d\mathbf{B} - m\Omega(C) \tag{7}$$

(자기장 내에 위치한 스핀의 경우 자기양자수 m 에 따라 고유 상태를 구분하므로 식 (5)의 n 을 m 으로 바꾸었다). 여기서 $\Omega(C)$ 는 Fig. 5에서와 같이 에너지 꺾임점과 변수 \mathbf{R} 이 움직인 경로 C 로 이루어진 입체각 (solid angle)이다. 식 (7)에서 주목할 사실은, 베리 위상이 자기장이나 스핀과는 관계없이

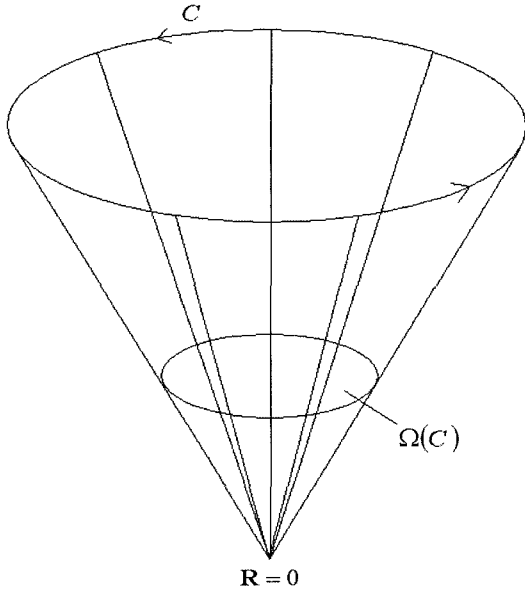


Fig. 5. Degeneracy point ($R = 0$) and solid angle $\Omega(C)$.

오직 자기양자수 m 과 입체각만으로 표현 된다는 점이다. 단 열 변화를 통해 생기는 베리 위상은 변수공간에서 변수 \mathbf{R} 이 움직인 경로에 따라 결정되기 때문에 베리 위상을 기하학적 위상이라고도 한다. 식 (7)에서 만약 $m\Omega = \pm\pi$ 라면 단열 과정을 통해 변수가 한바퀴 돌아 제자리로 돌아온 후에 상태 함수의 부호가 바뀔 것이다. 이러한 사실은 스핀을 가진 입자가 페르미온 뿐만 아니라 보손인 경우에도 동일하게 적용된다.

비터(T. Bitter)와 뒤베르(D. Dubbers)는 자기장 속의 스핀

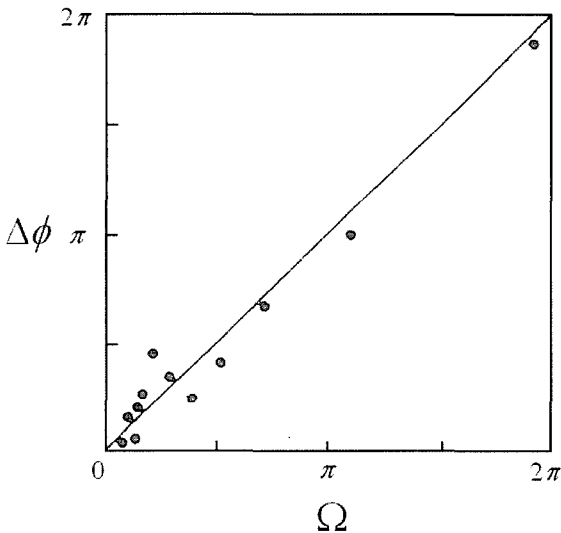


Fig. 6. Experimental evidence which shows the existence of the Berry's phase. Ω is the solid angle which the closed contour of the magnetic field subtends at the degeneracy point $\mathbf{B} = 0$, and $\Delta\phi$ is the shift in rotation angle of spin (Reference [12, 13]).

계에서 식 (7)과 같은 베리 위상이 존재하는 것을 실험을 통해 증명하였다[12]. 이들은 주기 T 로 회전하는 자기장 속에 중성자를 넣고 실험하여 중성자의 스핀이 돌아간 각도 ϕ 를 중성자 편광을 통해 측정하였다. 만약 베리 위상이 존재한다면 ϕ 는 다음과 같이 표시된다[13].

$$\phi = \frac{g\mu_B T}{\hbar} + \Omega \tag{8}$$

첫번째 항은 라모 진동수(Larmor frequency)로부터 측정되는 위상으로, 고정된 자기장 속에서도 존재한다. Fig. 6은 $\Delta\phi = \phi - g\mu_B T/\hbar$ 의 측정값과 자기장이 움직인 경로에 대한 입체각이 거의 일치하는 것을 보여주고 있고, 이 실험사실로부터 베리 위상이 실제로 존재함을 알 수 있다.

IV. 동적 안-텔러 효과와 베리 위상

동적 안-텔러 효과가 있는 계에서 베리의 위상이 나타나는 것을 살펴보기 위해 Fig. 2와 같은 팔면체 구조를 다시 생각해 보자. 중심원자가 Cu^{2+} 와 같이 최외곽 전자배치가 $3d^9$ 인 원자라면 이 분자는 안-텔러 효과에 의해 늘어진 팔면체 구조를 가진다. 이 분자가 특정 온도 이상에 놓이게 되면 동적 안-텔러 효과가 나타난다. 이 때 원자들간의 진동은 전자의 움직임에 비해 매우 느리기 때문에 전자는 원자의 진동을 단열 변화로 인식할 수 있다. 그리고 분자의 진동모드를 시간에 따라 변화는 좌표로 생각하면, 진동모드가 한 주기를 지나 처음 상태로 돌아오면 전자의 상태에 베리 위상이 추가될 수 있음을 짐작할 수 있다.

Fig. 2의 진동 모드를 가진 분자의 해밀토니안은 식 (2)와 같다. 이 해밀토니안의 고유상태를 각 진동모드에 대한 전자의 고유상태 $|\psi_\theta\rangle, |\psi_\pi\rangle$ 의 선형 결합으로 표시하면

$$|+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\psi_\theta\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|\psi_\pi\rangle \quad |-\rangle = \sin\frac{\theta}{2}|\psi_\theta\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|\psi_\pi\rangle \tag{9}$$

와 같다. 여기서 고유상태의 \pm 는 에너지 고유값의 부호와 일치한다. $\theta = 0$ 에서 시작해서 $\theta = 2\pi$ 가 되면 분자의 진동모드가 원래 상태로 왔음을 뜻한다. 이 때,

$$|\pm(\theta = 2\pi)\rangle = (-1)|\pm(\theta = 0)\rangle \tag{10}$$

가 되어 전자의 고유상태의 부호가 바뀐다.

식 (7)을 통해 전자의 고유상태의 부호 변화가 베리 위상에 의한 것임을 확인해보자. e_g 전자는 이중 에너지 준위 결합이 있기 때문에 $S_z = \pm 1/2$ 인 스핀계에 대응시킬 수 있다. 그러므로 팔면체 분자에서 동적 안-텔러 효과가 일어날 때 베리 위상은 $\gamma_m(C) = \mp\Omega(C)/2$ 만큼 생긴다. 이 경우 2차원

운동이므로 진동모드가 원래 위치로 돌아오면 입체각은 2π 이고, 베리 위상은 $\gamma_m(C) = \mp\pi$ 이므로 식 (10)의 부호의 변화는 베리 위상임을 확인할 수 있다.

팔면체 분자의 전체 파동함수를 $\Psi(R, \theta)$ 라 하면, 이 파동함수는 다음 슈뢰딩거 방정식의 해가 된다.

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} R \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{2} R^2 \pm kR \right\} \Psi(R, \theta) = E \Psi(R, \theta) \quad (11)$$

식 (11)은 식 (2)를 대각화한 것이다. $\Psi(R, \theta)$ 는 전자의 고유함수와 원자의 고유함수 $\phi_{\pm}(R, \theta)$ 의 곱으로 나타낼 수 있다.

$$\Psi(R, \theta) = \phi_{+}(R, \theta) | + (\theta) \rangle + \phi_{-}(R, \theta) | - (\theta) \rangle \quad (12)$$

식 (11)은 변수 분리가 가능하므로 $\phi_{\pm}(R, \theta)$ 는 각 변수들만의 함수로 분리된다.

$$\phi_{\pm}(R, \theta) = f_{\pm}(R) e^{ij\theta} \quad (13)$$

여기서 주의해야 할 사실은 $\Psi(R, \theta)$ 는 특정 위치에서 단 하나의 값을 가진다는 점이다. 즉, $\theta = 0$ 에서 $\theta = 2\pi$ 로 진동모드가 한 바퀴 돌아 원래 위치로 왔을 때 $\Psi(R, \theta)$ 의 값은 변하지 않아야 한다. 이 경우 전자의 고유함수는 부호가 반대로 변하기 때문에 원자의 고유함수 역시 부호가 바뀌어야 한다. 그 결과 $\exp(ij2\pi) = -1$, 즉

$$j = \left(l + \frac{1}{2} \right) = \text{half integer} \quad (14)$$

가 되어, 분자의 진동을 결정하는 양자수가 정수에서 반정수로 변한다. 동적 안-텔러 효과가 있는 분자의 회전 운동에너지가 반정수 양자수를 가지는 사실은 웨튼(Robert L. Whetten)과 그랜트(Edward R. Grant)가 분광학적인 방법을 통해 처음으로 직접 측정하였다[14].

이 밖에 베리 위상을 통해 안-텔러 효과가 나타나는 분자에서 궤도 함수의 순서를 파악할 수도 있는 등[15], 베리 위상에 대한 이해는 안-텔러 효과가 나타나는 계에 대한 이해를 더욱 깊게 해 준다.

V. 결 론

안-텔러 효과는 전자-포논 상호작용에 의해 일어나는 현상이며, 비대칭 분자의 전자에 에너지 준위 겹침이 있는 경우에 일어난다. 안-텔러 효과는 분자 구조와 고체의 결정구조를 이해하는 데 도움을 줄 뿐만 아니라 고온 초전도체의 메커니즘과 관련된 안-텔러 효과에 대한 연구도 활발히 진행되고 있다. 그리고 안-텔러 효과는 최근 많이 연구되는 망간 산화물에서의 초거대자기저항의 특성파도 연관이 있는 것으로 알려

져 있어 이 분야 역시 활발한 연구가 이루어지고 있다[16].

베리 위상은 해밀토니안의 변수가 단일 변화할 때 생기는 양자적 위상이다. 이 위상은 변수가 움직인 경로에 대한 입체각에 대한 함수로 주어지기 때문에 기하학적 위상이라고도 한다. 베리 위상은 새로운 현상을 발견하기 보다는 기존의 현상을 다른 시각으로 이해하는 데 도움을 주며, 동적 안-텔러 효과 역시 베리 위상을 통해 이해할 수 있다.

감사의 글

본 연구는 포항공대 스핀물성 사업단을 통한 과학재단 지원에 의한 것이며 이에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] H. A. Jahn and E. Teller, Proc. Roy. Soc. (London) A, **161**, 220 (1937).
- [2] M. V. Berry, Proc. R. Soc. London Ser. A, **392**, 45 (1984).
- [3] J. Ye, Y. B. Kim, A. J. Millis, B. I. Shraiman, P. Majumdar, and Z. Tešanović, Phys. Rev. Lett., **83**, 3737 (1999).
- [4] Y. Taguchi, Y. Oohara, H. Yoshizawa, N. Nagaosa, and Y. Tokura, Science, **291**, 2573 (2001).
- [5] D. K. De, R. S. Rubins, and T. D. Black, Phys. Rev. B, **29**, 71 (1984).
- [6] J. M. Longe and P. M. Raccach, J. Solid State Chem., **6**, 526 (1973).
- [7] M. Arai, K. Tamada, Y. Hidaka, S. Ith, Z. A. Bowden, A. D. Taylor, and Y. Endoh, Phys. Rev. Lett., **69**, 359 (1992); A. Lanzara, P. V. Bogdanov, X. J. Zhou, S. A. Kellar, D. L. Feng, E. D. Lu, T. Yoshida, H. Eisaki, A. Fujimori, K. Kishio, J.-I. Shimoyama, T. Noda, S. Uchida, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, Nature, **412**, 510 (2001); J. Lee, K. Fujita, K. McElroy, J. A. Slezak, M. Wang, Y. Aiura, H. Bando, M. Ishikado, T. Masui, J.-X. Zhu, A. V. Balatsky, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, Nature, **442**, 546 (2006).
- [8] R. Englman, B. Halperin, and M. Weger, Physica C, **169**, 314 (1990).
- [9] W. Weber, A. L. Shelankov, and X. Zotos, Physica C, **162/164**, 1475 (1989).
- [10] S. Jin, T. H. Tiefel, M. McCormack, R. A. Fastnacht, R. Ramesh, and L. H. Chen, Science, **264**, 413 (1994); P. Schiffer, A. P. Ramirez, W. Bao, and S-W. Cheong, Phys. Rev. Lett., **75**, 3336 (1995).
- [11] A. J. Millis, Boris I. Shraiman, and R. Mueller, Phys. Rev. Lett., **77**, 175 (1996); J. D. Lee and B. I. Min, Phys. Rev., **B55**, 12454 (1997).
- [12] T. Bitter and D. Dubbers, Phys. Rev. Lett., **59**, 251 (1987).
- [13] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Massachusetts, 1994, pp. 464-480.
- [14] R. L. Whetten and E. R. Grant, J. Chem. Phys., **81**, 691 (1984).

[15] F. S. Ham, Phys. Rev. Lett., **58**, 725 (1987).

[16] A. J. Millis, Nature, **392**, 147 (1998).

[17] B. Beagley, A. Eriksson, J. Lindgren, I. Persson, L. G. M. Pet-

tersson, M. Sandstrom, U. Wahlgren, and EW White, J. Phys
Condens. Matter, **1**, 2395 (1989).

Jahn-Teller Effect and Berry's Phase

K. H. Bang and B. I. Min*

Department of Physics, POSTECH, Pohang 790-784, Korea

(Received 28 September 2006, in final form 9 October 2006)

The Jahn-Teller effect caused by the electron-phonon interaction is explained with an example of an octahedral molecule. The physical meaning of the Berry's phase is discussed. The Berry's phase which appears due to the dynamical Jahn-Teller effect is also discussed.

Key words : Jahn-Teller, Berry's phase, dynamical Jahn-Teller effect