

鍺半導體內受子受任意方向單軸應力作用 其能階及相對強度之變化

蕭 吉 源

I 前言：

在固態物理研究方面，第Ⅲ族及第Ⅴ族元素參雜於矽或鍺半導體是一種最常被用來作研究的對象。在這種含雜質的半導體內，電子或電洞 (hole) 運動於游離雜質的庫倫場而受鍺或矽半導體的介電常數 (static dielectric constant) 的影響，且含雜質的鍺或矽半導體內的能量分佈情形類似於氫原子的能階分佈，所以含雜質半導體內電子或電洞運動的情況可用氫原子模式來解釋。在實驗上常用分光術來分析這些含雜質半導體的光譜，且已被證明此為探討其能階分佈的有效方法之一。Burstein et al⁽¹⁾ 是最先用分光術來觀測含雜質半導體的激發光譜者。從那時候起，外加微擾 (external perturbation) 的效應，如磁場^(2,3)，單一軸應力 (uniaxial stress)^(4,8) 等，已被用來研究含雜質的矽或鍺半導體的對稱性及證明由理論導出的量子數 (quantum number)，標明含雜質半導體的量子態。如今我們要討論的是用群論來研究鍺內單一電洞受單一軸應力的情形。

對於鍺晶體內單一電洞受子 (single hole acceptor) 在激發光譜的研究，已有許多物理學者從事理論及實驗方面的探討^(9,10)。在理論上對此問題的研究工作多基於 effective-mass approximation 的方法^(11,12)。但基於對稱性的觀念，而利用群論理論的基礎來研究這個問題，也許會得到一些有價值的消息。因為由群論理論的觀點，則可利用少數參變數來表其結果，而且可以調整參變數以與實驗結果照合。在此，我們將以群論理論來討論在群Ⅳ半導體內單一電洞受子受單一軸應力的激發光譜。雖然在晶體的特殊方位如〔001〕，〔111〕及〔110〕等加一單軸應力的能階分裂及光譜躍遷的相對強度，已有人從事研究⁽¹³⁾。然而，在本篇裡我們將討論有關單一電洞受子受任意軸方向應力的能階變化及激發光譜的相對強度理論。在理論部份我們將先討論當一應力加

於任意方向時其能階的分裂及其裂矩的變化，然後再詳細地討論單一電洞的激發光譜 $\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_7$, $\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_6$ 的電偶極躍遷 (electric dipole transitions)，並且討論作用力沿晶體的特殊方位 [001]，[111] 及 [110] 等三種情形。

II 理論：

A. 能階變化

假設所加雜質的原子不致於改變鎘晶體的對稱性，則含有雜質的鎘半導體是屬於四面體群 (T_d)。在鎘晶體內的受子可視為自旋 (spin) 為 $\frac{1}{2}$ 的電洞運動於具有四面體對稱性的位能束縛態。這種對稱態可依其兩值 (double-valued) 四面體群 \bar{T}_d 表示之，此 \bar{T}_d 群可由 T_d 及 $D_{\frac{1}{2}}$ 的直接乘積得之，即 $\bar{T}_d = D_{\frac{1}{2}} \times T_d$ 。 T_d 群的不可再約的表示法 (irreducible representations) 請見附表 I。表中的 X, Y, Z 的性質與 x, y, z 相同，而 x, y, z 是極向量 (polar vector)。 \bar{T}_d 群的基本函數 (basis function) 為 X, Y, Z 與旋量 (spinor) $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ 的乘積。 \bar{T}_d 群的徵數表請見附表 II。

由群論理論我們可得到兩種型式的 Γ_6 函數，兩種型式的 Γ_7 函數，及三種型式的 Γ^8 函數。其函數型式請參閱附錄 I。

最一般化的波形函數 (wave function) Ψ_m^i 均是這些函數的線型組合 (linear combination)，即

$$\Psi_m^i = a^i \Phi_m^i + b^i \Lambda_m^i + c^i \chi_m^i, \quad (1)$$

在 Γ_6 及 Γ_7 態時， $c^6 = c^7 = 0$ 。

$\{\Phi_m\}$, $\{\Lambda_m\}$, $\{\chi_m\}$ 這三組函數彼此間互相垂直，且屬於同列的 Γ_i 。 $\{\Phi_m\}$ 這組函數是總角動量 \vec{J} 及 z 軸角動量 J_z 的本徵函數 (eigenfunction)，在此種表示法中，其 Γ_6 及 Γ_7 對應角動量的矩陣表示是：

$$J_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

對應 Γ_8 的矩陣表示是

$$J_x = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ -\sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix},$$

$$J_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \quad (3)$$

附表 I : T_d 群基本函數及徵數表 (characteristic tables and basis functions for group T_d)

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$	基本函數
Γ_1	1	1	1	1	1	$f : X^2 + Y^2 + Z^2$
Γ_2	1	1	1	1	-1	$g : X\xi + Y\eta + Z\zeta$
Γ_3	2	-1	2	2	0	$w_1 : 2Z^2 - X^2 - Y^2$ $w_2 : \sqrt{3}(X^2 - Y^2)$
Γ_4	3	0	-1	1	0	ξ, η, ζ
Γ_5	3	0	-1	-1	1	X, Y, Z

若在鎘晶體加一單軸應力以改變立方晶體的對稱性，則 Γ_6 價帶能階可分裂成兩個副能階(sublevel)。在這種 T_d 群的轉換下，罕米吞函數 (Hamiltonian) 是不變的，且可利用角動量算子 (operator) \vec{J} ($J = \frac{1}{2}$) 來表示。 Γ_6 態最一般化的罕米吞函數的形式可寫成⁽¹⁵⁾：

$$H_e = D'_d (e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) + \frac{2}{3} D_\mu \left[(J_x^2 - \frac{1}{3} J^2) e_{xx} + (J_y^2 - \frac{1}{3} J^2) e_{yy} + (J_z^2 - \frac{1}{3} J^2) e_{zz} \right] + \frac{2}{3} D'_\mu \{ \{J_x J_y\} e_{xy} + \{J_x J_z\} e_{xz} + \{J_y J_z\} e_{yz} \} \quad (4)$$

式中 $e_{xx}, \dots, e_{xy}, \dots$ 是應變張量的分向量 (strain tensor components)。且

$$e_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) & \text{當 } i = j \\ \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) & \text{當 } i \neq j \end{cases}$$

式中 $\vec{u}(\mathbf{r})$ 是表加應力後的位移。 D'_d , D_μ , 及 D'_μ 是價帶形變能 (valence band deformation potentials)。 D'_d 是指整個價帶重心的平移 (shift)。因此，它對能階的分裂沒有影響。故可忽略之。 D_μ 及 D'_μ 分別為單軸應力沿 $[001]$ 及 $[111]$ 方向的價帶分裂。 $\{J_x J_y\}$ 表示對稱性的乘積 (symmetrized product)。

$$\{J_x J_y\} = \frac{1}{2} (J_x J_y + J_y J_x)。$$

附表 II： \bar{T}_d 群的徵數表

\bar{T}_d	E	\bar{E}	$8C_3$	$8\bar{C}_3$	$3C_2, 3\bar{C}_2$	$6S_4$	$6\bar{S}_4$	$6\sigma_d, 6\bar{\sigma}_d$
Γ_6	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
Γ_7	2	-2	1	-1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
Γ_8	2	-4	-1	1	0	0	0	0

1. 立方晶格的張力分向量

當應力施於晶體時，其較為簡單的情形為應力作用於晶體而沿 $[001]$ ， $[111]$ 及 $[110]$ 等方向。因此，在這種情形下，立方晶格所受的張力分向量亦比較容易求得。現在我們將討論應力沿立方晶體的任意方向的普遍化情形。

首先我們考慮應力 T' 沿分號座標系統的 z' 軸，則應力張量可寫成：

$$\|T'\| = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ T \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

$\|T'\|$ 為一 6 向量表示法。為了轉換分號座標 (primed coordinate) x', y', z' 成晶體座標 (crystal coordinate) x, y, z 。其間

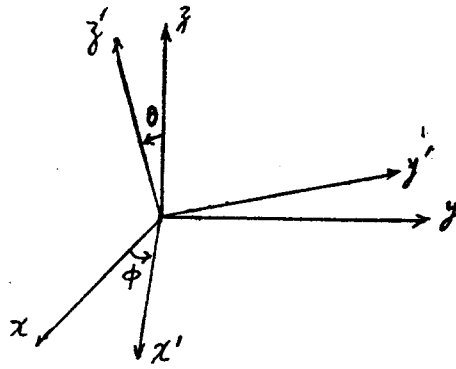
轉換關係為：

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \cos\phi\hat{x}' - \cos\theta\sin\phi\hat{y}' + \sin\theta\sin\phi\hat{z}' \\ \hat{y} &= \sin\phi\hat{x}' + \cos\theta\cos\phi\hat{y}' - \sin\theta\cos\phi\hat{z}' \\ \hat{z} &= \sin\theta\hat{y}' + \cos\theta\hat{z}' \end{aligned} \quad (6)$$

(6) 式中的 θ, ϕ 分別為 z 與 z' ， x 與 x' 之間的夾角。 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ 及 $\hat{x}', \hat{y}', \hat{z}'$ 分別為

晶體座標及分號座標系統中的單位向量，若以簡式表之，則得：

$$\mathbf{x}_i = \lambda_{ij} \mathbf{x}_j' \quad (7)$$



因此，其應力張量轉換可寫成

$$T_{ik} = \lambda_{ij} \lambda_{kl} T_{jl}' , \quad (8)$$

即

$$\|T\| = \begin{pmatrix} T_{xx} \\ T_{yy} \\ T_{zz} \\ T_{xy} \\ T_{yz} \\ T_{zx} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \sin^2\theta \sin^2\phi \\ \sin^2\theta \cos^2\phi \\ \cos^2\theta \\ -\sin^2\theta \sin\phi \cos\phi \\ -\sin\theta \cos\theta \cos\phi \\ \sin\theta \cos\theta \sin\phi \end{pmatrix} , \quad (9)$$

而應變張量 (strain tensor)⁽¹⁵⁾ 可由

$$S_{ij} = s_{ijkl} T_{kl} \quad (10)$$

得之。(10)式中的 s_{ijkl} 是順性彈性張量 (elastic compliance tensor) 的分向量，其矩陣表示法為

$$\|S\| = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}s_{44} \end{pmatrix} . \quad (11)$$

因此，由(9)，(10)，(11)式得應變張量 $\|S\|$ 。然而，在尋常定義下的應變張量 e_{ij} 與張量 $\|S\|$ 在離對角線單元 (off-diagonal element) 相差一個因子 2，亦即：

$$\begin{aligned} e_{xx} &= T [s_{11} \sin^2\theta \sin^2\phi + s_{12}(\sin^2\theta \cos^2\phi + \cos^2\theta)] , \\ e_{yy} &= T [s_{11} \sin^2\theta \cos^2\phi + s_{12}(\sin^2\theta \sin^2\phi + \cos^2\theta)] , \\ e_{zz} &= T [s_{11} \cos^2\theta + s_{12} \sin^2\theta] , \\ e_{xy} &= -T [s_{44} \sin^2\theta \sin\phi \cos\phi] , \\ e_{yz} &= -T [s_{44} \sin\theta \cos\theta \cos\phi] , \\ e_{zx} &= T [s_{44} \sin\theta \cos\theta \sin\phi] , \end{aligned} \quad (12)$$

a. 作用力沿 [001] 方向：

若作用力沿 [001] 方向，則 $\theta = 0$ ， $\phi = 0$ ，由等式(12)可得其應變張量的分向量爲：

$$\begin{aligned} e_{xx} &= e_{yy} = s_{12}T, \\ e_{zz} &= s_{11}T, \\ e_{xy} &= e_{yz} = e_{zx} = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

b. 作用力沿 [111] 方向：

當作用力沿 [111] 方向， $\phi = -45^\circ$ ， $\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{3}}$ ， $\sin\theta = \frac{-\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$ 由等式(12)式得：

$$\begin{aligned} e_{xx} &= e_{yy} = e_{zz} = (s_{11} + 2s_{12}) \frac{T}{3}, \\ e_{xy} &= e_{yz} = e_{zx} = s_{44} \frac{T}{3}. \end{aligned} \quad (14)$$

c. 作用力沿 [110] 方向：

假若作用力沿 [110] 方向，即 $\theta = -90^\circ$ ， $\phi = 45^\circ$ ，而將 θ 的 ϕ 值代入(12)式化簡後得：

$$\begin{aligned} e_{xx} &= e_{yy} = (s_{11} + s_{12}) \frac{T}{2}, & e_{xy} &= s_{44} \frac{T}{2}, \\ e_{zz} &= s_{12}T, & e_{yz} &= e_{zx} = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

2. 能階的分裂 (splitting of energy level)

當應力施於晶體的任意方向，則此晶體對稱性是屬於 C_1 群，其徵數表請見附表 III。 $\Gamma_3(\bar{C}_1)$ 及 $\Gamma_4(C_1)$ 的能階在時間反轉算子下是屬於簡併性 (degenerated under time reversal operator)，因此，它們不因外加應力而分裂。 $\Gamma_6(\bar{T}_d)$ 及 $\Gamma_7(\bar{T}_d)$ 的能階亦不分裂，但 $\Gamma_8(\bar{T}_d)$ 的能階將分裂成兩個副能階 $\Gamma_3(\bar{C}_1) + \Gamma_4(\bar{C}_1)$ 。若將矩陣表示的 J_x ， J_y ， J_z 代入等式(4)中，可得 H_0 的矩陣形式爲：

$$H_0 = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & i\epsilon_2 e^{-i\phi} & i\epsilon_3 + \epsilon_4 & 0 \\ -i\epsilon_2 e^{i\phi} & -\epsilon_1 & 0 & i\epsilon_3 + \epsilon_4 \\ i\epsilon_3 & 0 & -\epsilon_1 & \epsilon_2 e^{-i\phi} \\ 0 & i\epsilon_3 & i\epsilon_2 e^{i\phi} & \epsilon_1 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

上式 H_0 矩陣中的各元素之值如下：

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= \frac{2}{3} D_{\mu} T (s_{11} - s_{12}) \left(\cos^2 \theta - \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right), \\ \epsilon_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} D_{\mu}' s_{44} \sin \theta \cos \theta, \\ \epsilon_3 &= -\frac{1}{\sqrt{3}} D_{\mu}' s_{44} \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi, \\ \epsilon_4 &= \frac{1}{\sqrt{3}} D_{\mu} (s_{11} - s_{12}) \sin^2 \theta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \circ\end{aligned}\tag{17}$$

附表 III：C₁ 群的徵數表

\bar{C}_1	E	\bar{E}	I	\bar{I}
Γ_3	1	-1	i	-i
Γ_4	1	-1	-i	i

以正變換矩陣 (unitary transformation matrix) S，可將 H_0 對角化

$$S = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\epsilon_2 e^{-i\phi}}{\epsilon_1 + \delta} & \frac{i(\epsilon_3 - i\epsilon_4)}{\epsilon_1 + \delta} & 0 \\ \frac{-\epsilon_2 e^{i\phi}}{\epsilon_1 + \delta} & 1 & 0 & \frac{-i(\epsilon_3 - i\epsilon_4)}{\epsilon_1 + \delta} \\ \frac{i(\epsilon_3 + i\epsilon_4)}{\epsilon_1 + \delta} & 0 & 1 & \frac{\epsilon_2 e^{-i\phi}}{\epsilon_1 + \delta} \\ 0 & \frac{-i(\epsilon_3 + i\epsilon_4)}{\epsilon_1 + \delta} & \frac{-\epsilon_2 e^{i\phi}}{\epsilon_1 + \delta} & 1 \end{pmatrix},\tag{18}$$

式中 $\delta = \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + \epsilon_3^2 + \epsilon_4^2}$

N 為歸一化常數 (normalized constant)，其值為：

$$N = \left(1 + \frac{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2 + \epsilon_4^2}{(\epsilon_1 + \delta)^2} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(1 + \frac{\delta - \epsilon_1}{\delta + \epsilon_1} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2\delta}{\delta + \epsilon_1} \right)^{\frac{1}{2}},$$

其本徵值 (eigenvalue) $E_{\pm} = \pm \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + \epsilon_3^2 + \epsilon_4^2}$ 。

換言之， $\Gamma_8(\bar{T}_d)$ 能階受任意方向的應力而分裂成兩個副能階，而此二副能階間的能階裂矩恰為 2δ 。然而，此任意方向的應力亦可簡化至晶體的特殊方向，茲分述如下：

a. 作用力沿 [001] 方向

當作用力沿 [001] 方向時，此含雜質的鎳半導體晶體的對稱性是屬於 D_{2d} 群。 $\Gamma_8(\bar{T}_d)$ 能階分裂為 $\Gamma_6(\bar{D}_{2d})$ 及 $\Gamma_7(\bar{D}_{2d})$ 。而這兩個副能階間的能階裂矩為

$$\Delta_{001} = \frac{4}{3} D_{\mu} (s_{11} - s_{12}) T \quad (19)$$

b. 作用力沿 [111] 方向

若將作用力施於 [111] 方向時，則此含雜質的鎢半導體是屬於 C_{3v} 群。且 $\Gamma_8(\bar{T}_d)$ 的能階分裂成 $\Gamma_4(C_{3v})$ 及 $\Gamma_5(C_{3v}) + \Gamma_6(C_{3v})$ 兩副能階。 $\Gamma_5(C_{3v})$ 與 $\Gamma_6(C_{3v})$ 彼此間的表示 (representation) 是共軛複數，且在時間反轉算子下是屬於簡併性的。換言之，其能階受應力不再分裂。而 $\Gamma_5(C_{3v})$ 與 $\Gamma_6(C_{3v})$ 間的能階裂矩為

$$\Delta_{111} = \frac{2}{3} s_{44} D_{\mu} T \quad (20)$$

c. 作用力沿 [110] 方向

當作用力沿 [110] 方向時，此含雜質晶體的對稱性是屬於 C_{2v} ， $\Gamma_8(\bar{T}_d)$ 分解為兩個 $\Gamma_5(C_{2v})$ 副能階。而其間的能階裂矩為

$$\Delta_{110} = \frac{1}{2} (\Delta_{001}^2 + \Delta_{111}^2)^{\frac{1}{2}} \quad (21)$$

由晶體受任意軸方向的應力而得到的能階分裂及其間的能階裂矩，均可簡化到晶體的特殊方向。如以上所提的 [001]，[111] 及 [110] 等特殊方向所求出的能階裂矩均與前人⁽¹⁸⁾ 所得的結果相同。

B. 光譜躍遷的相對強度 (relative intensities of optical transition)

1. 躍遷的對應矩陣元素

為了印證實驗在此方面所得的結果，我們必須將觀測的激發光譜的相對強度與理論所得的結果相比較。假若沒有外微擾，則電偶極可激發 Γ_8 與 Γ_7 之間的躍遷。因為電偶極的分向量是屬於四面體群 Γ_5 的一種表示，且由群論徵數表得之： $\Gamma_5 \times \Gamma_6 = \Gamma_7 + \Gamma_8$ ， $\Gamma_5 \times \Gamma_7 = \Gamma_6 + \Gamma_8$ ，所以由電偶極所激發 $\Gamma_8 \leftrightarrow \Gamma_7$ ， $\Gamma_8 \leftrightarrow \Gamma_6$ 之間的躍遷是可能的。然而，我們須注意 $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ ， $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ 間的躍遷 Γ_8 僅出現一次，其意義為 Γ_8 到 Γ_6 或 Γ_7 的躍遷，其電偶極矩算子 (dipole moment operator) 的矩陣元素只需要一個複數矩陣元素 (complex matrix element) 表示之。

因為躍遷機率是與躍遷矩陣元素絕對值的平方成正比，所以吸收光譜的強度是與 $|\langle \chi_m^k | \vec{Q}_k | \chi_m^i \rangle|^2$ 成正比。 χ_m^i 及 χ_m^k 分別是初態與終態的波形函數，且分別屬於 Γ_i

及 Γ_k 的不可再約表示。 \vec{Q}_k 是沿極化光的電偶極矩分向量。受應力微擾後的本徵態可以用原先簡併性本徵函數 (degenerate eigenfunction) 的線型組合來表示。我們引進躍遷矩陣概念，則其初態

$$\Psi_m^i = \sum_{\mu} S_{\mu m} \chi_{\mu}^i$$

而對應的終態以分號表示，定義為：

$$\langle \Psi_m^k, \vec{Q} | \Psi_m^i \rangle = (S'^* \vec{Q}_{i \rightarrow k} S)_{m'm} \quad (23)$$

式中的向量 \vec{Q} 代表 $[\langle \chi_m^k | \vec{Q} | \chi_m^i \rangle]$ 的向量矩陣。因此，我們必須決定矩陣 \vec{Q} 的分向量。

首先我們將討論 $[\langle \Phi_m^i | \vec{Q} | \Phi_m^s \rangle]$ 及 $[\langle \Phi_m^i | \vec{Q} | \Phi_m^s \rangle]$ 的矩陣， $\vec{Q} | \Phi_m^s \rangle$ 包括空間函數 (spatial function) $\vec{Q}X, \vec{Q}Y, \vec{Q}Z$ ；這九個函數可投影到 T_d 群的各種不可再約表示上。因電偶極矩分向量 Q_x, Q_y, Q_z 的性質與 X, Y, Z 相似，但並不相等。 $Q_i X_j$ ($i, j=1, 2, 3$) 的九個乘積形成了 T_d 群 $\Gamma_5 \times \Gamma_5$ 的基礎向量，因 $\Gamma_5 \times \Gamma_5$ 可分解為對稱部份 $\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_5$ 及逆對稱 (Antisymmetry) 部份 Γ_4 ，故 $\Gamma_5 \times \Gamma_5$ 的基礎向量經化簡後，依 T_d 群的表示可分為： $g_0, \{g_1, g_2\}, \{g_x, g_y, g_z\}, \{g_t, g_n, g_c\}$ ，其形式請見附錄II。

a. $\Gamma_5 \rightarrow \Gamma_6$ 躍遷的對應矩陣元素

在 $\Gamma_5 \rightarrow \Gamma_6$ 間的躍遷，其適當的矩陣元素是

$$\langle a^6 \Phi_m^6 + b^6 \Lambda_m^6 | \vec{Q} | a^5 \Phi_m^5 + b^5 \Lambda_m^5 + c^5 \chi_m^5 \rangle \quad (24)$$

式中的 $\Phi_m, \Lambda_m, \chi_m$ ，均為附錄I中的波形函數，而 a^6, b^6, a^5, b^5, c^5 等為其係數。因 $\Gamma_1 \times \Gamma_3, \Gamma_1 \times \Gamma_4$ 不包含 Γ_5 ，所以 $a^6 b^5, a^6 c^5$ 等須均消失。

Φ_m^6 函數的空間部份為 $f(\vec{r})$ ，是屬於 Γ_1 。它以 g_0 形成不為零的純量積 (scalar product)，此為唯一不為零的矩陣元素 $\langle \Phi_m^6 | \vec{Q} | \Phi_m^5 \rangle$ ，並與

$$\int f(\vec{r}) Q_x X d\vec{r} = \int f(\vec{r}) Q_y Y d\vec{r} = \int f(\vec{r}) Q_z Z d\vec{r} \quad (25)$$

成比例。在此我們用直接的方法來化簡 $\langle \Phi_m^6 | \vec{Q} | \Phi_m^5 \rangle$ ，以求得 $\vec{Q}_{5 \rightarrow 6}$ 電偶極的矩陣元素。例如

$$\langle \Phi_{1/2}^6 | \vec{Q} | \Phi_{3/2}^5 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \int f(\vec{r}) \vec{Q} (X + iY) d\vec{r} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{y}) \int f(\vec{r}) Q_x X d\vec{r}$$

$$\langle \Phi_{1/2}^0 | \vec{Q} | \Phi_{1/2}^0 \rangle = \frac{-2i}{\sqrt{6}} \int f(\vec{r}) \vec{Q} Z d\vec{r} = \frac{-2i}{\sqrt{6}} Z \int f(\vec{r}) Q_x Z d\vec{r}。$$

因此，由(24)式可得到

$$\vec{Q}^{0 \rightarrow 0} = D_0 \begin{pmatrix} \sqrt{3}(\hat{x} + i\hat{y}) & -2iZ & (\hat{x} - i\hat{y}) & 0 \\ 0 & i(\hat{x} + i\hat{y}) & 2Z & \sqrt{3}i(\hat{x} - i\hat{y}) \end{pmatrix}, \quad (26)$$

上式中均 D_0 表複數參變數 (complex parameter)，可由非微擾的波形函數求得。即

$$D_0 = \frac{a^{6*}a^6}{\sqrt{6}} \int f_0 Q_x X d\vec{r} - \frac{ib^{6*}a^6}{3\sqrt{2}} \int \zeta Q_x Y d\vec{r} + \frac{ib^{6*}b^6}{\sqrt{6}} \int Y Q_x Z d\vec{r} - \frac{b^{6*}c^6}{2} \int \zeta Q_x \omega_2 d\vec{r}。 \quad (27)$$

b. $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ 躍遷的對應矩陣元素

在 $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ 間的躍遷，對應的矩陣元素是

$$\langle a^7 \Phi_m^7 + b^7 \Lambda_m^7 | \vec{Q} | a^6 \Phi_m^6 + b^6 \Lambda_m^6 + c^6 \chi_m^6 \rangle, \quad (28)$$

因為 $\Gamma_2 \times \Gamma_4$, $\Gamma_2 \times \Gamma_5$ 不包含 Γ_5 ，所以 $b^{7*}a^6$ 與 $b^{7*}c^6$ 等項均消失。 Φ_m^7 的空間函數部份包含 X, Y, Z。而分別以 g_x, g_y, g_z 形成不為零的純量積，且其中唯一不為零的矩陣元素 $\langle \Phi_m^7 | \vec{Q} | \Phi_m^6 \rangle$ 是與

$$\int X Q_y Z d\vec{r} = \int X Q_z Y d\vec{r} = \int Y Q_z X d\vec{r} = \int Y Q_x Z d\vec{r} = \int Z Q_x Y d\vec{r} = \int Z Q_y X d\vec{r}$$

成比例。因此電偶極矩 $\vec{Q}^{6 \rightarrow 7}$ 的矩陣元素可直接求得。如：

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{1/2}^7 | \vec{Q} | \Phi_{-1/2}^6 \rangle &= \frac{1}{3\sqrt{2}} \left[\int (X - iY) \vec{Q} Z d\vec{r} + \int Z \vec{Q} (X - iY) d\vec{r} \right] \\ &= \frac{1}{3\sqrt{2}} \left[2(\hat{y} - i\hat{x}) \int X Q_y Z d\vec{r} + (\hat{y} - i\hat{x}) \int Z Q_y X d\vec{r} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{y} - i\hat{x}) \int X Q_y Z d\vec{r}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{-1/2}^7 | \vec{Q} | \Phi_{1/2}^6 \rangle &= \frac{i}{3\sqrt{2}} \left[\int (X + iY) \vec{Q} (-2Z) d\vec{r} + \int (-Z) \vec{Q} (X + iY) d\vec{r} \right] \\ &= \frac{i}{3\sqrt{2}} \left[-2(\hat{y} + i\hat{x}) \int X Q_y Z d\vec{r} - (\hat{y} + i\hat{x}) \int Z Q_y X d\vec{r} \right] \\ &= \frac{-i}{\sqrt{2}} (\hat{y} + i\hat{x}) \int X Q_y Z d\vec{r} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{y}) \int X Q_y Z d\vec{r}。 \end{aligned}$$

因此，由(28)式可得 $\vec{Q}^{6 \rightarrow 7}$ 的電偶極矩陣為

$$\vec{Q}_{s \rightarrow r} = D_0' \begin{pmatrix} -(\hat{x} - i\hat{y}) & 0 & \sqrt{3}(\hat{x} + i\hat{y}) & 2z \\ -2z & i\sqrt{3}(\hat{x} - i\hat{y}) & 0 & -i(\hat{x} + i\hat{y}) \end{pmatrix},$$

式中的 D_0' 是複數參變數，可由非微擾的波形函數得之，即

$$D_0' = \frac{-a^{7*}a^8i}{\sqrt{6}} \int Y Q_x Z d\vec{r} + \frac{a^{7*}b^8i}{3\sqrt{2}} \int \zeta Q_x Y d\vec{r} - a^{7*}c^8 \int \omega_1 Q_x X d\vec{r} + \frac{b^{7*}a^8}{\sqrt{6}} \int g Q_x f d\vec{r}. \quad (30)$$

2. $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ 躍遷強度分向量及相對強度

a. $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ 躍遷強度分向量

當作用力沿 $[001]$ 的方向是最簡單的情況，其躍遷矩陣的分向量分別以 $Q_x[001]$ ， $Q_y[001]$ 及 $Q_z[001]$ 表之，可由(26)式得：

$$\begin{aligned} Q_x[001] &= D_0 \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & i & 0 & i\sqrt{3} \end{pmatrix}, \\ Q_y[001] &= D_0 \begin{pmatrix} i\sqrt{3} & 0 & -i & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}, \\ Q_z[001] &= D_0 \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (31)$$

若將情況普遍化，即作用力施於任意方向，則轉換矩陣 S 可由(18)式得

$$S = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & -B^* & -A^* & 0 \\ B & 1 & 0 & A^* \\ A & 0 & 1 & -B^* \\ 0 & -A & B & 1 \end{pmatrix}, \quad (32)$$

在(32)式矩陣中

$$\begin{aligned} A &= \frac{i(\epsilon_3 + i\epsilon_4)}{\epsilon_1 + \delta}, \\ B &= \frac{-\epsilon_2 e^{i\phi}}{\epsilon_1 + \delta}, \\ N &= (1 + A^*A + B^*B)^{\frac{1}{2}}, \quad \text{爲歸一化常數} \end{aligned} \quad (33)$$

躍遷矩陣在(23)式中的 S' 是 2×2 的單位矩陣(unit matrix)。若作用力施於任意方向，我們需要求 \vec{Q} 的分向量沿 T' 的方向及兩個垂直於 T' 的方向。因此，我們考慮笛

卡兒分號座標系統 (Cartesian coordinate system) x', y', z' 。而 z' 為平行於 T 的單位向量，且 \hat{x}' ， \hat{y}' 是垂直於 z' 的兩正交單位向量。而此笛卡兒分號座標與晶體座標間的關係為：

$$\begin{aligned}\hat{x}' &= \hat{x}\cos\phi + \hat{y}\sin\phi, \\ \hat{y}' &= -\hat{x}\cos\theta\sin\phi + \hat{y}\cos\theta\cos\phi + \hat{z}\sin\theta, \\ \hat{z}' &= \hat{x}\sin\theta\sin\phi - \hat{y}\sin\theta\cos\phi + \hat{z}\cos\theta,\end{aligned}\quad (34)$$

而躍遷矩陣 $Q_{x'}$ ， $Q_{y'}$ ， $Q_{z'}$ 分別為沿 x' ， y' ， z' 方向的分向量。

$$\begin{aligned}Q_{x'}^{\delta \rightarrow \delta} &= \frac{D_0}{N} \begin{pmatrix} i\sqrt{3}e^{i\phi} - iAe^{-i\phi} & -i\sqrt{3}B^*e^{i\phi} & -i\sqrt{3}A^*e^{i\phi} - ie^{-i\phi} \\ -Be^{i\phi} & -e^{i\phi} - \sqrt{3}Ae^{-i\phi} & \sqrt{3}Be^{-i\phi} \\ iB^*e^{-i\phi} & -A^*e^{i\phi} + \sqrt{3}e^{-i\phi} & \end{pmatrix}, \\ Q_{y'}^{\delta \rightarrow \delta} &= \frac{D_0}{N} \begin{pmatrix} i(\sqrt{3}e^{i\phi} - Ae^{-i\phi})\cos\theta - 2iB\sin\theta & -i\sqrt{3}B^*e^{i\phi}\cos\theta - 2i\sin\theta \\ -Be^{i\phi}\cos\theta + 2A\sin\theta & -e^{i\phi}\cos\theta - \sqrt{3}e^{i\phi}\cos\theta \\ i(\sqrt{3}A^*e^{i\phi} + e^{-i\phi})\cos\theta & -iB^*e^{-i\phi}\cos\theta - 2iA^*\sin\theta \\ (-\sqrt{3}e^{-i\phi}\cos\theta + 2\sin\theta) & -A^*e^{i\phi} - \sqrt{3}e^{-i\phi}\cos\theta - 2B^*\sin\theta \end{pmatrix}, \\ Q_{z'}^{\delta \rightarrow \delta} &= \frac{D_0}{N} \begin{pmatrix} -i(\sqrt{3}e^{i\phi} - Ae^{-i\phi})\sin\theta - iB\cos\theta & i\sqrt{3}B^*e^{i\phi}\sin\theta - 2i\cos\theta \\ Be^{i\phi}\sin\theta + 2A\cos\theta & (e^{i\phi} + \sqrt{3}e^{-i\phi})\sin\theta \\ i(\sqrt{3}A^*e^{i\phi} + e^{-i\phi})\sin\theta & -iB^*e^{-i\phi}\sin\theta - 2iA^*\cos\theta \\ -\sqrt{3}Be^{-i\phi}\sin\theta + 2\cos\theta & (A^*e^{i\phi} - \sqrt{3}e^{-i\phi})\sin\theta - 2B^*\cos\theta \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

b. $\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_6$ 躍遷的相對強度

$\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_6$ 間的相對強度是依其傳播的方向而變，但其方向必需沿 x' ， y' ， z' 軸且與 $\vec{Q}^* \vec{Q}$ 成比例。即 $I_x \propto Q_{x'}^* Q_{x'}$ ， $I_y \propto Q_{y'}^* Q_{y'}$ ， $I_z \propto Q_{z'}^* Q_{z'}$ 。因此可得 $\Gamma_6(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{3}{2})$ 及 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的 I_x ， I_y 及 I_z 之值。

(1) $\Gamma_6(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{3}{2})$

$$\begin{aligned}I_x &= \frac{1}{4N^2} [(3 + AA^* + BB^*) + \sqrt{3}Ae^{-2i\phi} + \sqrt{3}A^*e^{2i\phi}], \\ I_y &= \frac{1}{4N^2} [\cos^2\theta(3 + AA^* + BB^* - \sqrt{3}A^*e^{2i\phi} - \sqrt{3}Ae^{-2i\phi}) \\ &\quad - 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta(B^*e^{i\phi} + Be^{-i\phi}) + 4(BB^* + AA^*)\sin^2\theta],\end{aligned}$$

$$I_z = \frac{1}{4N^2} [\cos^2\theta(4AA^*+4BB^*) + \sin^2\theta(3 + AA^* + BB^* - \sqrt{3}Ae^{-2i\phi} - \sqrt{3}A^*e^{2i\phi}) + 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta(Be^{-i\phi} + B^*e^{i\phi})] \circ$$

(2). $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$

$$I_x = \frac{1}{4N^2} [1 + 3AA^* + 3BB^* - \sqrt{3}A^*e^{-2i\phi} - \sqrt{3}Ae^{2i\phi}] ,$$

$$I_y = \frac{1}{4N^2} [\cos^2\theta(1 + 3AA^* + \sqrt{3}A^*e^{2i\phi} + \sqrt{3}Ae^{-2i\phi}) + 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta(B^*e^{i\phi} + Be^{-i\phi}) + 4\sin^2\theta] ,$$

$$I_z = \frac{1}{4N^2} [4\cos^2\theta + (1 + 3AA^* + 3BB^* + \sqrt{3}A^*e^{2i\phi} + Ae^{-2i\phi})\sin^2\theta - 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta(Be^{-i\phi} + B^*e^{i\phi})] \circ$$

3. $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ 躍遷強度分向量及相對強度

a. $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ 躍遷強度分向量

當作用力沿 [001] 方向，則其矩陣分向量為 $Q_x[001]$ ， $Q_y[001]$ 及 $Q_z[001]$ ，

可由(29)式分別得之：

$$Q_x[001] = D_0' \begin{pmatrix} -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & i\sqrt{3} & 0 & -i \end{pmatrix} ,$$

$$Q_y[001] = D_0' \begin{pmatrix} i & 0 & i\sqrt{3} & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 1 \end{pmatrix} ,$$

$$Q_z[001] = 2D_0' \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \circ$$

然而，若將情況普遍化，即作用力施於任意方向，而座標的選擇亦與(34)式同，則沿 x' ， y' ， z' 方向的躍遷矩陣分向量 $Q_{x'}$ ， $Q_{y'}$ ， $Q_{z'}$ 可類似於求 $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ 的躍遷矩陣法中求得。因此，其躍遷矩陣分向量分別為

$$Q_{x'}^{\delta \rightarrow \gamma} = D_0' \begin{pmatrix} \sqrt{3}Ae^{i\phi} - e^{-i\phi} & B^*e^{-i\phi} & A^*e^{-i\phi} + \sqrt{3}e^{i\phi} \\ \sqrt{3}iBe^{-i\phi} & \sqrt{3}ie^{-i\phi} + iAe^{i\phi} & -iBe^{i\phi} \\ -\sqrt{3}B^*e^{i\phi} & \sqrt{3}iA^*e^{-i\phi} - ie^{i\phi} & \end{pmatrix} ,$$

$$Q_{y'}^{\delta \rightarrow \gamma} = D_0' \begin{pmatrix} i(e^{-i\phi} + \sqrt{3}Ae^{i\phi})\cos\theta & -i(B^*e^{-i\phi}\cos\theta + 2A\sin\theta) \\ \sqrt{3}Be^{-i\phi}\cos\theta - 2\sin\theta & \sqrt{3}e^{-i\phi} - Ae^{i\phi}\cos\theta + 2B^*\sin\theta \end{pmatrix}$$

$$Q_{z, 8 \rightarrow 7} = D_0' \begin{pmatrix} i(\sqrt{3}e^{i\phi} - A^*e^{-i\phi})\cos\theta + 2iB\sin\theta & 2i\sin\theta - \sqrt{3}iB^*e^{i\phi}\cos\theta \\ Be^{i\phi}\cos\theta + 2A^*\sin\theta & (\sqrt{3}A^*e^{i\phi} + e^{i\phi})\cos\theta \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} -i(e^{-i\phi} + \sqrt{3}Ae^{i\phi})\sin\theta & iB^*e^{-i\phi}\sin\theta - 2iA\cos\theta \\ -\sqrt{3}Be^{-i\phi}\sin\theta - 2\cos\theta & 2B^*\cos\theta - (\sqrt{3}e^{-i\phi} - Ae^{i\phi})\sin\theta \\ 2iB\cos\theta + i(A^*e^{-i\phi} - \sqrt{3}e^{i\phi})\sin\theta & \sqrt{3}iB^*e^{i\phi}\sin\theta + 2i\cos\theta \\ 2A^*\cos\theta - Be^{i\phi}\sin\theta & -(\sqrt{3}A^*e^{-i\phi} + e^{i\phi})\sin\theta \end{pmatrix}.$$

b. 躍遷的相對強度

$\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ 間的躍遷，其相對強度隨作用力的方向及躍遷矩陣分向量的絕對值成正比。在 x' ， y' ， z' 方向的相對強度 I_x ， I_y ， I_z 分述如下。

(1). $\Gamma_8(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$

$$I_x = \frac{1}{4N^2} [1 + 3AA^* + 3BB^* - \sqrt{3}A^*e^{-2i\phi} - \sqrt{3}Ae^{2i\phi}],$$

$$I_y = \frac{1}{4N^2} [(1 + 3AA^* + 3BB^*)\cos^2\theta + \sqrt{3}Ae^{2i\phi} + \sqrt{3}A^*e^{-2i\phi} - 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta(Be^{-i\phi} + B^*e^{i\phi}) + 4\sin^2\theta],$$

$$I_z = \frac{1}{4N^2} [1 + 3AA^* + 3BB^* + \sqrt{3}Ae^{2i\phi} + \sqrt{3}A^*e^{-2i\phi})\sin^2\theta + 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta(Be^{-i\phi} + B^*e^{i\phi}) + 4\cos^2\theta].$$

(2). $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{3}{2})$

$$I_x = \frac{1}{4N^2} [3 + AA^* + BB^* + \sqrt{3}Ae^{2i\phi} + \sqrt{3}A^*e^{-2i\phi}],$$

$$I_y = \frac{1}{4N^2} [(3 + AA^* + BB^*)\cos^2\theta - \sqrt{3}Ae^{2i\phi} - \sqrt{3}A^*e^{-2i\phi} + 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta(B^*e^{-i\phi} + B^*e^{i\phi}) + (4AA^* + 4BB^*)\sin^2\theta],$$

$$I_z = \frac{1}{4N^2} [3 + AA^* + BB^* - \sqrt{3}(Ae^{2i\phi} + A^*e^{-2i\phi})\sin^2\theta - 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta(B^*e^{i\phi} + Be^{-i\phi}) + 4AA^* + 4BB^*)\cos^2\theta].$$

由作用力沿任意方向而得的相對跳躍強度，亦可適用於晶體的特別方向。如 $[001]$ ， $[111]$ 等特殊方向。

當作用力沿 $[001]$ 方向， $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ 及 $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ 間的躍遷機率及相對強度 I_x ， I_y ， I_z

分述如下表。

零應力躍遷	受應力後躍遷	躍遷機率		相對強度 I_z	相對強度 I_x, I_y
		$ Q_z' ^2$	$ Q_x' ^2, Q_y' ^2$		
$\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$	$\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_6$	0	$6 D_0 ^2$	0	$\frac{3}{4}$
	$\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$	$8 D_0 ^2$	$2 D_0 ^2$	1	$\frac{1}{4}$
$\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$	$\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_7$	$8 D_0' ^2$	$2 D_0' ^2$	1	$\frac{1}{4}$
	$\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_7$	0	$6 D_0' ^2$	0	$\frac{3}{4}$

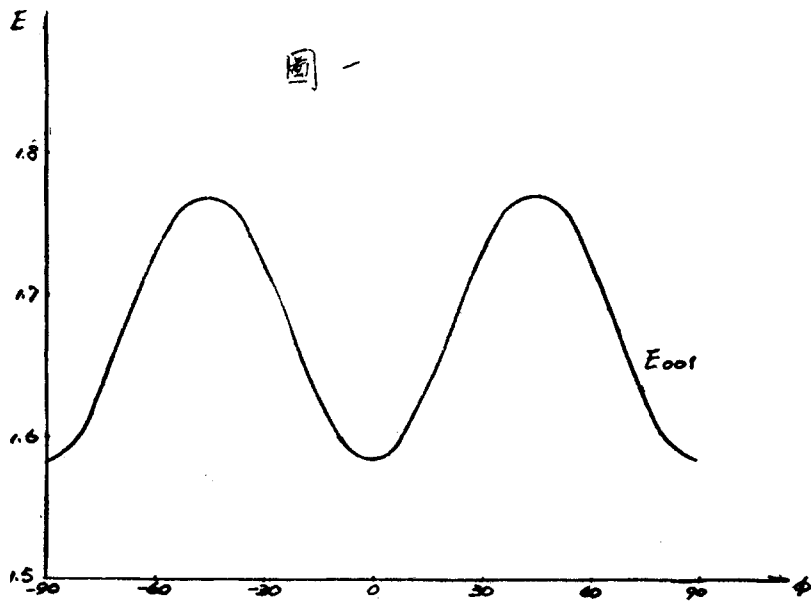
當作用力沿 $[111]$ 方向， $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ 及 $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ 的相對強度及躍遷強度分別為：

零應力躍遷	受應力後躍遷	躍遷機率		相對強度 I_z	相對強度 I_x, I_y
		$ Q_z' ^2$	$ Q_x' ^2, Q_y' ^2$		
$\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$	$\Gamma_4 \rightarrow \Gamma_4$	$8 D_0 ^2$	$2 D_0 ^2$	1	$\frac{1}{4}$
	$\Gamma_{5+6} \rightarrow \Gamma_4$	0	$6 D_0 ^2$	0	$\frac{3}{4}$
$\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$	$\Gamma_4 \rightarrow \Gamma_4$	$8 D_0' ^2$	$2 D_0' ^2$	1	$\frac{1}{4}$
	$\Gamma_{5+6} \rightarrow \Gamma_4$	0	$6 D_0' ^2$	0	$\frac{3}{4}$

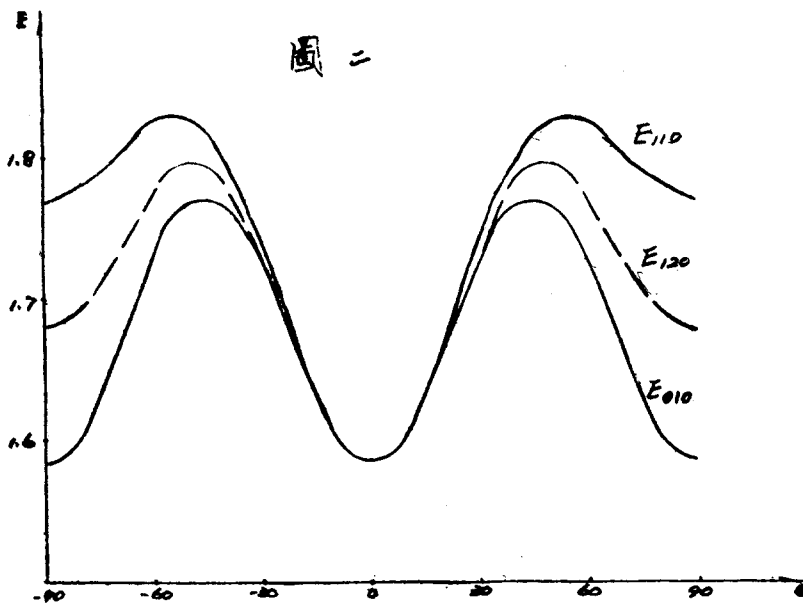
III 結果與討論

A. 光譜躍遷的能階變化

當作用力作用於 $[001]$ 平面時，其能階裂距的變化為 2ϕ 角的函數，請見圖一。若作用力在 $[110]$ ， $[120]$ ， $[010]$ 等平面時，則晶體的對稱性是屬於 C_1 群，在這種情況下，其能階分裂的變化均類似於 $[001]$ 平面，請見附圖二，但其能階裂距的變化均是 2θ 角的函數。當 $\theta = 0$ 時，其對應的能階裂距為 Δ_{001} ；換言之，當 $\theta = 0$ 度時，其能階裂距最小。若作用力施於其他方向，則在所有 θ 值中的對應能階裂距均較作用力施於 $[001]$ 方向為大些，惟當作用力在 $[010]$ 平面時的能階裂距變化約略等於作用力在 $[001]$ 平面時的能階裂距變化。在相同的 θ 值情況下，作用力在 $[110]$ 平面時的能階裂距均大於作用力在 $[010]$ 平面時的能階裂距，而當作用力施於 $[120]$ 平面上時，其能階裂距介於 $[010]$ 平面及 $[110]$ 平面之間。即當作用力施於 $[110]$ 平面時，其相對的能階裂距最大。但在 $[110]$ 平面上的最大能階裂距約在 $\theta = \pm 54$ 度附近。而在 $[010]$ 平面的最大能階裂距約於 $\theta = \pm 45$ 度，在 $[001]$ 平面的最大能階裂距約在 $\phi = \pm 45$ 度。



圖一、 E_{001} 為當作用力在 $[001]$ 平面時的能階裂距變化。



圖二、 E_{110} ， E_{120} ， E_{010} 分別為當作用力在 $[110]$ ， $[120]$ ， $[010]$ 平面時的能階裂距變化。

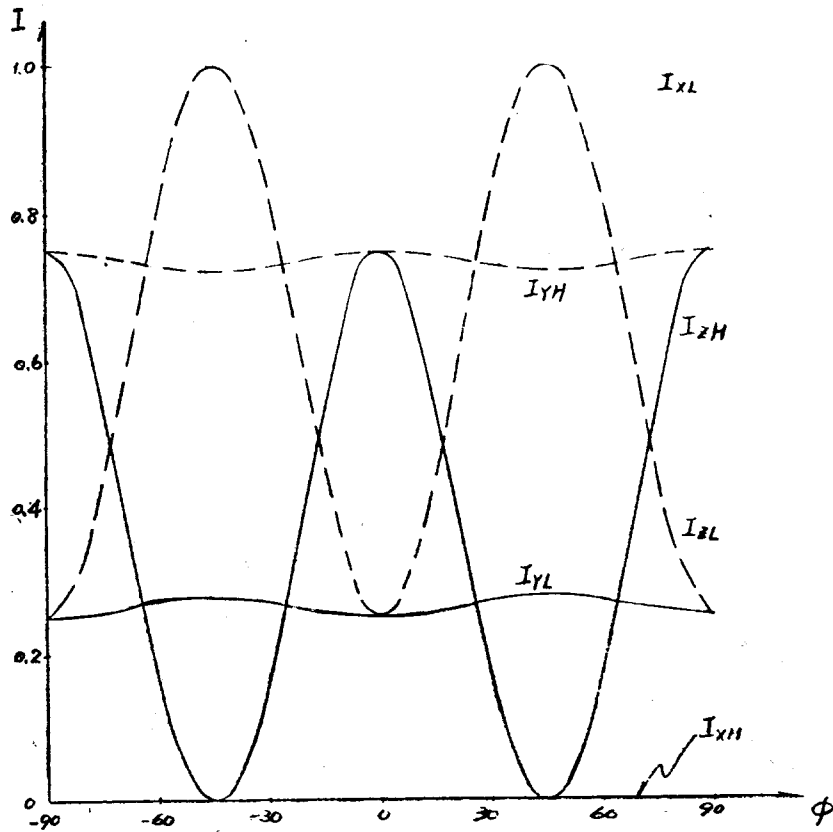


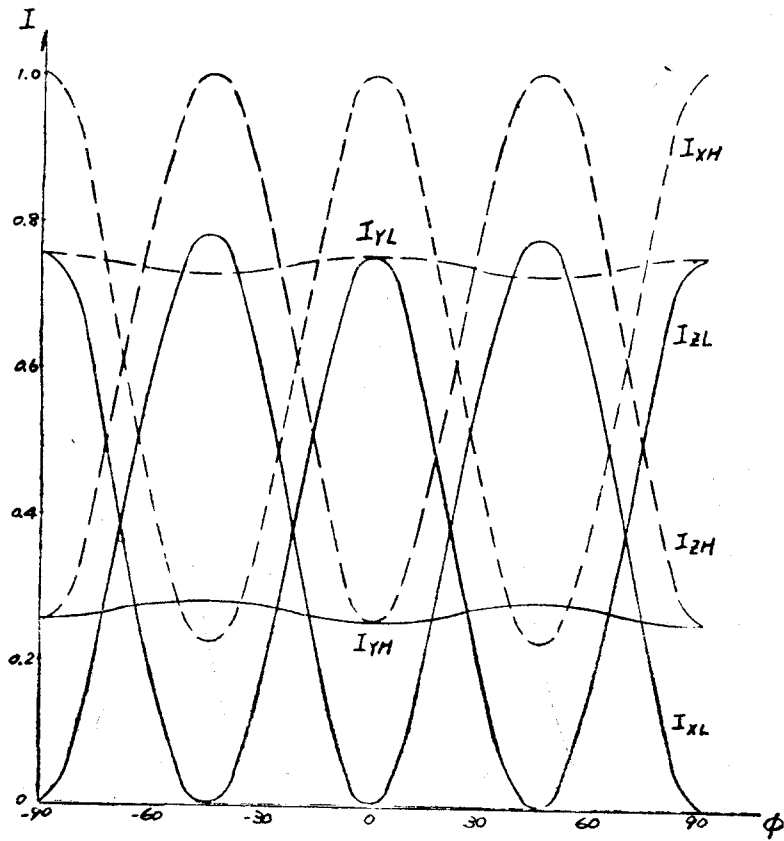
圖 三

圖三、作用力施於〔001〕平面其相對強度之變化。 I_{xL} , I_{yL} , I_{zL} 分別表 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 間的 I_x , I_y , I_z 。而 I_{xH} , I_{yH} , I_{zH} 分別表 $\Gamma_6(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{3}{2})$ 間的 I_x , I_y , I_z 。

B. 光譜躍遷相對強度之變化

嚴格地說，我們所求的相對跳躍強度，並非真正的相對跳躍強度，因為此處我們所求的相對跳躍強度是假設初態的能階裂距為零。若是初態均有相同的密數 (population)，則我們所求的相對跳躍強度機率才與真正的相對跳躍強度一致。以下我們均假設初態的能階裂距為零且均具有相同的密數來討論之。

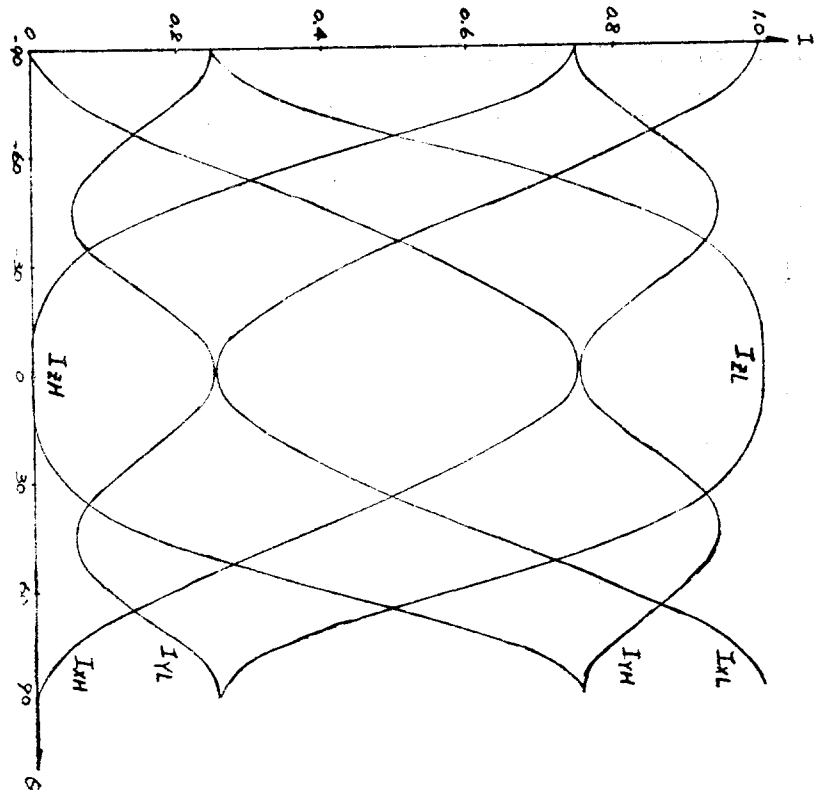
當作用力在〔001〕平面時，請見圖三及圖四，則在 x 方向 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度的趨近於 1， $\Gamma_6(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{3}{2})$ 的相對跳躍強度略趨近於零。而 $\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_7$ 間的



圖四

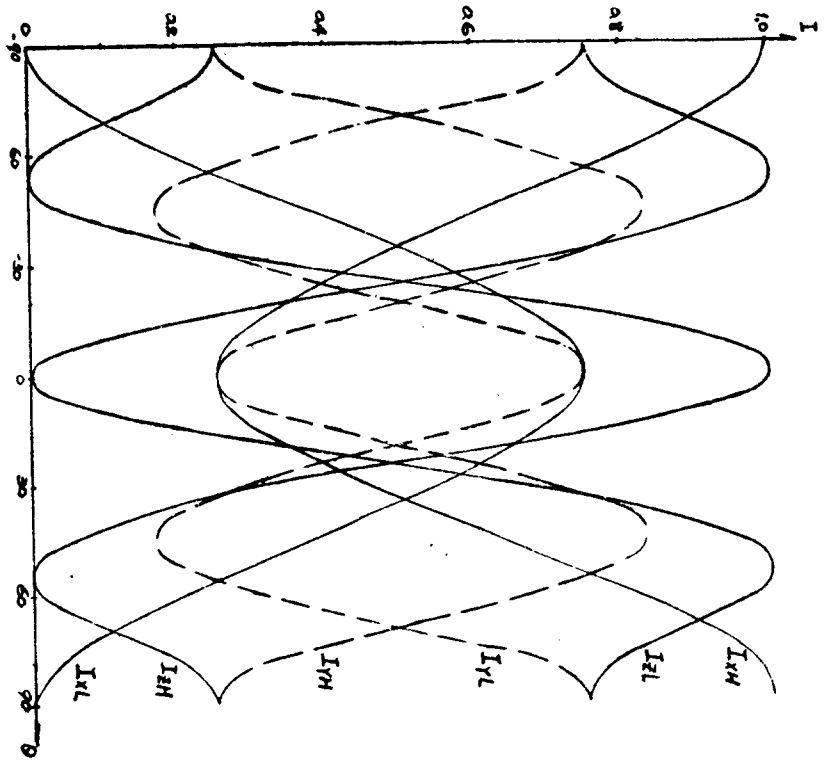
圖四、作用力施於〔001〕平面其相對強度之變化。 I_{xL} , I_{yL} , I_{zL} 分別表 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 間的 I_x , I_y , I_z 。而 I_{xH} , I_{yH} , I_{zH} 分別表 $\Gamma_8(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 間的 I_x , I_y , I_z 。

相對跳躍強度為 2ϕ 的函數，且 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 間的相對跳躍強度類似於 $\sin 2\phi$ 函數， $\Gamma_8(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 間的相對跳躍強度類似於 $\cos 2\phi$ 函數。然而，在y方向 $\Gamma_8(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_8(\pm\frac{1}{2})$ 間的相對強度均大於 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 間的相對強度，但相反地， $\Gamma_8(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度卻小於 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度。 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度等於 $\Gamma_8(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度，而 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 與 $\Gamma_8(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度相等。在z方向 $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ 與 $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ 均是 2ϕ 的函數，且 $\Gamma_8(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 與 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度類似於 $\cos 2\phi$ 的函數，而 $\Gamma_8(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 且 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow$



圖五

圖五、作用力在〔010〕平面時相對強度之變化。IxL, IyL, IzL 分別表 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 間的 Ix, Iy, Iz, IxH, IyH, IzH 分別表 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 間的 Ix, Iy, Iz。



圖六

圖六、作用力在〔010〕平面時相對強度之變化。IxL, IyL, IzL 分別表 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 間的 Ix, Iy, Iz, IxH, IyH, IzH 分別表 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 間的 Ix, Iy, Iz。

$\Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度類似於 $\sin 2\theta$ 的函。

當作用力施於 $[010]$ 平面時，請見圖五及圖六，在 x 軸方向的 $\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_6$ 及 $\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_7$ 的相對跳躍強度均是 θ 的函數，而 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度等於 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度，且類似於 $\cos\theta$ 的函數。 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度等於 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度，且類似於 $\sin\theta$ 的函數。在 y 方向的極化 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度均小於 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度，而 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 及 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度時隨 2θ 而改變，且類似於 $\cos 2\theta$ 的函數。而 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 與 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度類似於 $\sin 2\theta$ 的函數。在 z 方向的相對強度當 $\theta = 0$ 度時

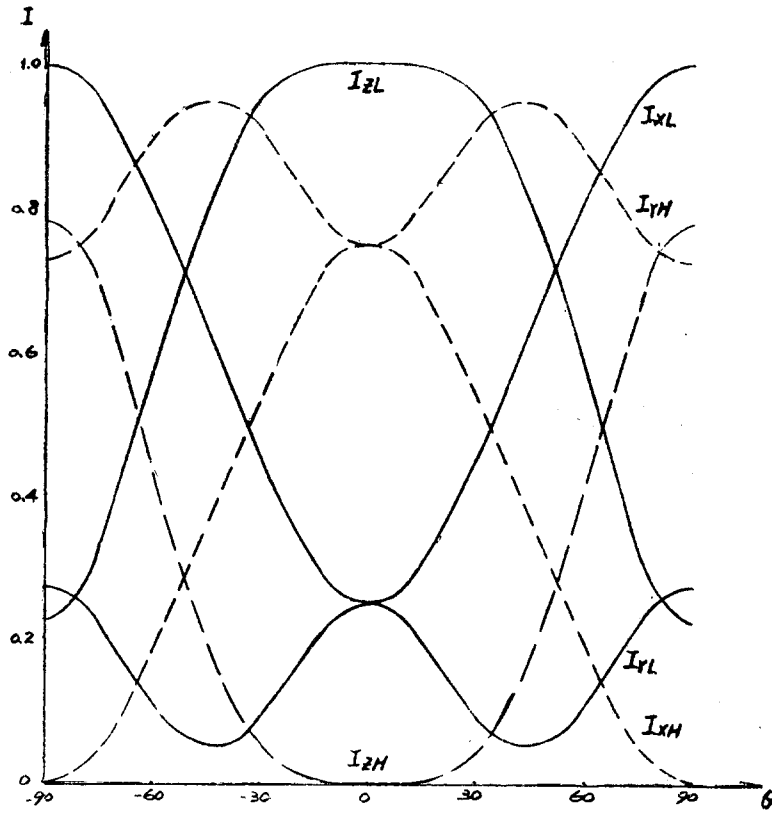
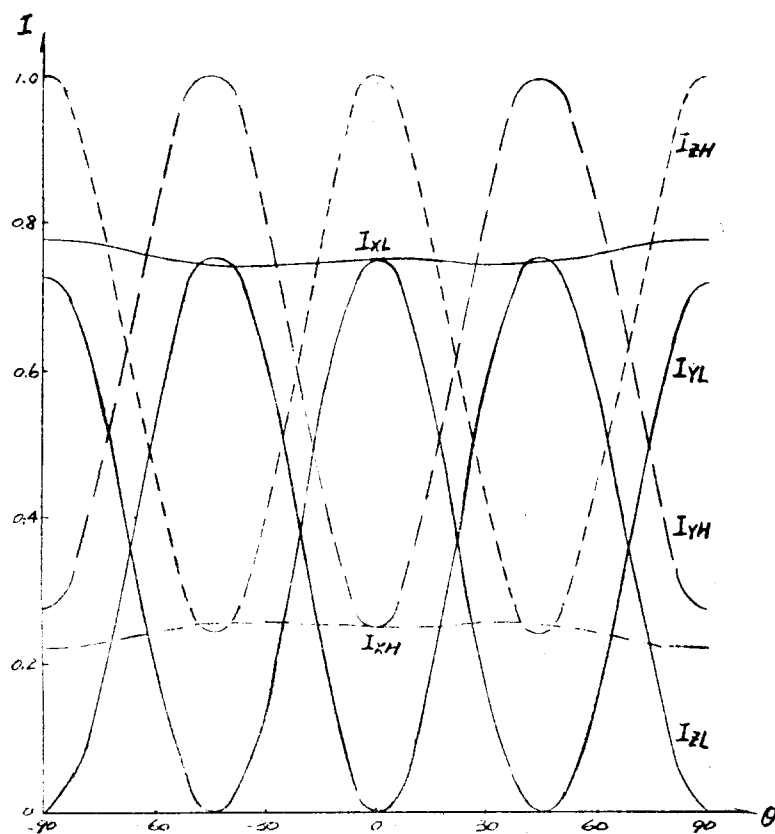


圖 七

圖七、作用力沿 $[110]$ 平面時相對跳躍強度之變化。 I_{XL}, I_{YL}, I_{ZL} 分別表 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 間的 I_x, I_y, I_z 。而 I_{XH}, I_{YH}, I_{ZH} 分別表 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 間的 I_x, I_y, I_z 。

， $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 與 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度最大，其值為 1。相反地， $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 與 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度最小，其值為零。

當作用力作用在 $[110]$ 平面時， $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ 之間的相對跳躍強度之變化均類似作用力作用在 $[010]$ 平面時的 $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_6$ 間的相對跳躍強度變化，請見圖七與圖五。 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的 I_x 類似於 $\cos\theta$ 的函數，而 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的 I_x 類似於 $\sin\theta$ 的函數。在 y 方向的 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度均大於 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度。而 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度類似於 $\cos 2\theta$ 的函數， $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的相對強度則類似於 $\sin 2\theta$ 的函數。當 $\theta = 0$ 度時， $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 的 I_x 值為 1， $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$



圖八

圖八、作用力沿 $[110]$ 平面時相對跳躍強度之變化。 I_{xL} ， I_{yL} ， I_{zL} 分別表 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 間的 I_x ， I_y ， I_z 。而 I_{xH} ， I_{yH} ， I_{zH} 分別表 $\Gamma_8(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_6(\pm\frac{1}{2})$ 間的 I_x ， I_y ， I_z 。

的 I_z 值爲零。然而，在 $\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_7$ 之間的躍遷，其相對強度的變化情形請見圖八。在 x 方向的 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度均大於 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 的相對跳躍強度。在 y 及 z 方向極化的相對強度 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 及 $\Gamma_6(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 均是 2θ 的函數。且在 y 方向的 $\Gamma_6(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 及 z 方向的 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{1}{2})$ 之相對強度均類似於 $\sin 2\theta$ 函數，而在 y 方向的 $\Gamma_6(\pm\frac{1}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{3}{2})$ 及 z 方向的 $\Gamma_6(\pm\frac{3}{2}) \rightarrow \Gamma_7(\pm\frac{3}{2})$ 之相對強度均類似於 $\cos 2\theta$ 函數。

附錄 I

由群論理論得知波形函數 $\{\Psi_\mu^i\}$ ($i = 6 - 8$)，可由旋量 $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$ 與空間函數 $f, g, \{\omega_1, \omega_2\}, \{\xi, \eta, \zeta\}$ 及 $\{x, y, z\}$ 的乘積得到 $\{\Phi, \Lambda, \chi\}$ 等三組波形函數。其中 $\{\xi, \eta, \zeta\}$ 是軸向量(axial vector)， $\{x, y, z\}$ 是極向量(polar vector)。而 $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ 的波形函數分別爲：

$$\Phi_{1/2}^6 = f|\alpha\rangle, \quad \Phi_{-1/2}^6 = f|\beta\rangle;$$

$$\Lambda_{1/2}^6 = \frac{1}{\sqrt{3}} [(\xi + i\eta)|\beta\rangle + \zeta|\alpha\rangle],$$

$$\Lambda_{-1/2}^6 = \frac{1}{\sqrt{3}} [(\xi - i\eta)|\alpha\rangle - \zeta|\beta\rangle];$$

$$\Phi_{1/2}^7 = \frac{1}{\sqrt{3}} [(X + iY)|\beta\rangle + Z|\alpha\rangle],$$

$$\Phi_{-1/2}^7 = \frac{1}{\sqrt{3}} [(X - iY)|\alpha\rangle - Z|\beta\rangle];$$

$$\Lambda_{1/2}^7 = g|\alpha\rangle, \quad \Lambda_{-1/2}^7 = g|\beta\rangle;$$

$$\Phi_{3/2}^8 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)|\alpha\rangle,$$

$$\Phi_{1/2}^8 = \frac{i}{\sqrt{6}} [(X + iY)|\beta\rangle - 2Z|\alpha\rangle],$$

$$\Phi_{-1/2}^8 = \frac{1}{\sqrt{6}} [(X - iY)|\alpha\rangle + 2Z|\beta\rangle],$$

$$\Phi_{-3/2}^8 = \frac{i}{\sqrt{2}}(X - iY)|\beta\rangle;$$

$$\Lambda_{3/2}^8 = -\frac{1}{\sqrt{6}} [(\xi - i\eta)|\alpha\rangle + 2\zeta|\beta\rangle],$$

$$\Lambda_{1/2}^{\beta} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\xi - i\eta) |\beta\rangle,$$

$$\Lambda_{-1/2}^{\beta} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + i\eta) |\alpha\rangle,$$

$$\Lambda_{-3/2}^{\beta} = -\frac{i}{\sqrt{6}} [(\xi + i\eta) |\beta\rangle - 2\xi |\alpha\rangle];$$

$$\chi_{3/2}^{\beta} = \omega_1 |\beta\rangle, \quad \chi_{1/2}^{\beta} = -i\omega_2 |\alpha\rangle,$$

$$\chi_{-1/2}^{\beta} = \omega_2 |\beta\rangle, \quad \chi_{-3/2}^{\beta} = -i\omega_1 |\alpha\rangle.$$

附錄 II

$\Gamma_5 \times \Gamma_5$ 的基礎向量可化簡分解成對稱部份 $\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_5$ 及逆對稱部份 Γ_4 ，依 T_d 群的表示法可寫成：

$$\Gamma_1: \quad g_0 = Q_x X + Q_y Y + Q_z Z$$

$$\Gamma_3: \quad g_1 = 2Q_z Z - Q_x X - Q_y Y = 3Q_z Z - g_0$$

$$g_2 = \sqrt{3}(Q_x X - Q_y Y)$$

$$\Gamma_5: \quad g_x = \frac{1}{2}(Q_y Z + Q_z Y)$$

$$g_y = \frac{1}{2}(Q_x X + Q_z Z)$$

$$g_z = \frac{1}{2}(Q_x Y + Q_y X)$$

$$\Gamma_4: \quad g_{\xi} = \frac{1}{2}(Q_y Z - Q_z Y)$$

$$g_{\eta} = \frac{1}{2}(Q_x X - Q_z Z)$$

$$g_{\zeta} = \frac{1}{2}(Q_x Y - Q_y X)$$

上述括弧內的基礎向量是屬於 T_d 羣的不可再約表示。並且 g_1 及 g_2 分別為附表 I 中 Γ_3 表示的第一及第二列，且這些向量彼此互相垂直。同理， g_x, g_y, g_z 分別為由 x, y, z 而產生的 Γ_5 表示的第一，第二及第三列。 $g_{\xi}, g_{\eta}, g_{\zeta}$ 是對應 Γ_4 表示而具有與上相同的關係。

感 謝

本文能順利完成，承蒙政治大學數學系薛昭雄主任及前系主任鄧靜華教授的諄諄教誨與鼓勵，以及中央研究院物理所戴嵩山先生的指導與多次討論及修訂，本人由衷地統此敬表謝忱！對於政大公企中心電腦館供給 I. B. M. system 3 CTU 5410 型電子計算的使用，以致能順利算出特殊方向的能階裂距及相對跳躍強度而劃出各圖形，在此亦表謝意！

REFERENCE

1. Burstein. J. J. Oberly, J. W. Davisson, and B. W. Henvis, *Phys. Rev.* 82, 746 (1951).
2. R. L. Jones and P. Fisher, *Phys. Rev. B* 2, 2016 (1970).
3. S. Zwerdling, K. J. Button, and Lax, *Phys. Rev.* 118, 975 (1960).
4. J. H. Reuszer, and P. Fisher *Phys. Rev.* 135, A1125 (1964).
5. R. L. Jone and P. Fisher, *J. Phys. Chem. Solids*, 26, 1125 (1965).
6. R. L. Aggarwal and A. K. Ramdas *Phys. Rev.* 137 A620 (1965).
7. D. H. Diskey and J. O. Dimmock, *J. Phys. Chem. Solids*, 28, 529(1967).
8. J. J. White, *Can. J. Phys.* 45, 2695 (1967).
9. D. Schechter, *J. Phys. Chem. Solids* 23, 237 (1962).
10. A. Onton, P. Fisher and A. K. Ramdas *Phys. Rev.* 163, 686 (1967).
11. J. M. Luttinger and W. Kohn *Phys. Rev.* 96, 802 (1954).
12. C. Kittel and A. H. Mitchell *Phys. Rev.* 96, 1488 (1954).
13. S. Rodriguez, P. Fisher and F. Barra, *Phys. Rev. B* 5, 2219 (1972).
14. J. M. Luttinger *Phys. Rev.* 102, 1030 (1956).
15. C. Kittel, *Introduction to solid state physics, Fourth Fdition*, (John. Wiley & Sons, Inc.) P. 142.
16. G. L. Bir, E. I. Butikov and G. E. Pikus, *J. Phys. Chem. Solids* 24, 1475 (1963).