第21卷 第7期　　物 理 学 报　　Vol. 21, No. 7
1965 年 7 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　July, 1965

不稳定局域模及其对杂质中心吸收带宽的影响*

顧世杰　黃錫毅
(中国科学院)

提　　要

本文运用羣论方法，把不稳定局域模和含杂晶格的带內本征矢的散射部分都按格位羣的不可约表示分了类．具体地讨论了最近邻相互作用的简单立方晶格的情况，计算结果表明：可能产生同 $P(=\gamma'/\gamma)$ 和 $Q(=m'/m)$ 有关的 T_{1u} 型不稳定局域模和仅与 P 有关的简并的 A_{1g}, E_g, T_{1g}, T_{2g} 和简并的 T_{1u}, T_{2u} 型不稳定局域模，以及只有同一类型的对称性駐波[10]才能为杂质所散射．这里 m' 和 m 分别为杂质原子和基质原子的质量；γ' 和 γ 分别为杂质与近邻之间和一般近邻之间的力常数．以同样的模型计算了各种类型声子对杂质中心吸收带宽的贡献．指出，宽度很窄的 g 型不稳定局域模对带宽的贡献可能变得很大，而超过其余声子的总贡献．最后讨论了单有效频率近似可能有的微观理论基础的问题．

一、引　　言

如所周知，孤立杂质对晶格振动的影响主要有三方面：产生带外稳定局域模和带內不稳定局域模以及散射带內模．大量的工作主要集中于研究在各种情况下产生(稳定)局域模的条件和頻率[1,2]．由于后两方面的效果对許多物理現象，如声子热导[3]，Mössbauer 效应[4]以及电声子耦合[5]等有显著影响，因此，对它們的研究也已引起人們的注意．Takeno[6] 研究了在簡单立方晶格中，重同位素杂质产生共振散射的条件；Visscher[4] 討論了质量和力常数都改变时，不稳定局域模对 Mössbauer 譜的影响；Klein[7] 用 t 矩陣方法研究了形式散射的問題，等等．

在解含杂晶格的动力学方程时，場論方法[5]和格临函数方法[9]是完全等价的．前者可以直接引用許多在量子場論中行之有效的方法，获得了对許多含杂晶格振动的一般性质的了解．如文献[8]中，利用場論方法进行討論，从而揭示了稳定与不稳定局域模的內部联系，进一步阐明了不稳定局域模的基本性质．而格临函数方法，則便于在簡单模型中进行数值計算．在具体計算中，对称分析的引入往往可以使問題大为簡化．例如，理想晶格中的格波可按格位羣来分类[10]，以相应的点羣表示来标志，称之为对称性駐波．这样的分类在含杂晶体中是十分有用的，因为杂质破坏了晶体的平移对称性，而保持了杂质中心的格位对称．Ludwig[2] 已对局域模的对称分析作了詳細的討論．我們将把这种分析方法用于不稳定局域模，并且結合文献[10]中的方法，把带內本征矢的散射部分也按格位

* 1964 年 9 月 8 日收到．

羣来分类．这样的分类可使一些問題一目了然．例如，在散射波中，只有 g 型(偶表示)部分才对电声子耦合有貢献；对 Mössbauer 效应有貢献的只有杂质产生位移的振动模，如 T_{1u} 型模等等．

在文献[5]中，我們已經用一維模型，討論了局域模和带內散射模对杂质中心吸收寬带中电声子耦合的貢献．由于一維模型的特殊簡单性，許多表达式可以解析地得到，由此得到了許多有意义的結果．但也由于一維模型的特殊性(主要是其頻譜密度不同于三維情形)，它不存在对电声子耦合有貢献的不稳定局域模．不稳定局域模同局域模类似之处在于，它們的振幅也較集中于杂质附近．所以，直观地預料，它也将对电声子耦合有显著的貢献．为了估計这种貢献，我們只能借助于最簡单的三維模型，并做数值計算．結果証实了我們的預計：当电子晶格相互作用十分局域时，在带頂近处，g 型不稳定局域模确实对电声子耦合有显著的貢献．三維的其他結果都和一維的結論一致．

在第二节中，一般地求出含杂晶格的带內散射本征矢．对称分析的一般方法在第三节中給出．在第四节中，具体地計算了簡单立方最近邻相互作用情况中，各种对称型的不稳定局域模的頻率和寬度，以及同 P，Q 的关系．并且具体地用格临函数表示了散射波对称化了的带內本征矢．不稳定局域模对电声子耦合的影响及其数值例子在第五节中得到．最后，在第六节中作了有关問題的討論．

二、含杂晶格的本征矢量

为了考查各种类型声子对杂质吸收譜的影响，关鍵的一步是解出含杂晶格的本征矢量．由于問題的复杂性，这个步驟只在极簡单的情况下(如一維綫性鏈)才彻底地被完成了的．近年来，已积累了大量含杂晶体的电声子过程的实驗現象，因而，解决更接近于实际晶体的复杂模型的本征矢量問題急待进行．

下面一般地討論含杂晶格的本征矢量的計算．对于理想晶格，我們有

$$m\omega_j^2(\mathbf{k})u^0_{\mathbf{s},r}(\mathbf{k},j)=\sum_{\mathbf{s}',r'}H^0_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'}u^0_{\mathbf{s}',r'}(\mathbf{k},j),\tag{1}$$

其中 m 是原子質量；$u_{\mathbf{s},r}$ 为位于 $\mathbf{s}$ 上的格点在 $r(r=x,y,z)$ 方向上的位移；H^0 是理想晶格的力常数；$\omega_j^2(\mathbf{k})$ 是第 j 支声子的平方色散律．其本征矢量为

$$u^0_{\mathbf{s},r}(\mathbf{k},j)=\frac{1}{\sqrt{N}}e_r(\mathbf{k},j)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}},\tag{2}$$

$\mathbf{e}(\mathbf{k},j)$ 为极化矢量，滿足关系式

$$\sum_j e_r(\mathbf{k},j)e_{r'}(\mathbf{k},j)=\delta_{r,r'}\qquad\begin{pmatrix}r=x,y,z;\\ j=1,2,3.\end{pmatrix}\tag{3}$$

对于含一孤立杂质的晶格，其运动方程为

$$m\omega^2u_{\mathbf{s},r}=\sum_{\mathbf{s}',r'}(H^0_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'}+V_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'})u_{\mathbf{s}',r'},\tag{4}$$

$V_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'}$ 是由于杂质的掺入而引起的哈密頓量的修正項．

(4) 式可写成 Schrödinger 方程的形式：

$$(m\omega^2-H^0)u=Vu.\tag{5}$$

按形式散射理論[11]，我們有

$$u = u_0 + \frac{1}{m\omega^2 - H^0 + i\epsilon} Vu; \tag{6}$$

写在坐标表象中为

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{s},r} &= u^0_{\mathbf{s},r} + \sum_{\mathbf{s}',r'} \left(\frac{1}{m\omega^2 - H^0 + i\epsilon} V\right)_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'} u_{\mathbf{s}',r'} = \\ &= u^0_{\mathbf{s},r} + \sum_{\substack{\mathbf{s}',r' \\ \mathbf{s}'',r''}} \left(\frac{1}{m\omega^2 - H^0 + i\epsilon}\right)_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'} V_{\mathbf{s}'r',\mathbf{s}''r''} u_{\mathbf{s}'',r''}, \end{aligned} \tag{7}$$

其中矩陣元

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{m\omega^2 - H^0 + i\epsilon}\right)_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'} &= \left\langle \mathbf{s}, r \left| \frac{1}{m\omega^2 - H^0 + i\epsilon} \right| \mathbf{s}', r' \right\rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},j} \frac{e_r(\mathbf{k}, j) e_{r'}(\mathbf{k}, j) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{s}-\mathbf{s}')}}{m\omega^2 - m\omega_j^2(\mathbf{k}) + i\epsilon} = \\ &= -\frac{1}{2\gamma} g_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'}(\omega^2). \end{aligned} \tag{8}$$

上式最后定义了格临函数 $g_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'}$，$\frac{1}{2\gamma}$ 的引入只是为了后面应用时的方便．于是(7)式可以写成

$$u_{\mathbf{s},r} = u^0_{\mathbf{s},r} - \frac{1}{2\gamma} \sum_{\substack{\mathbf{s}',r' \\ \mathbf{s}'',r''}} g_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'}(\omega^2) V_{\mathbf{s}'r',\mathbf{s}''r''} u_{\mathbf{s}'',r''} \tag{9}$$

或

$$\sum_{\mathbf{s}',r'} \left(\delta_{\mathbf{s},\mathbf{s}'}\delta_{r,r'} + \frac{1}{2\gamma} \sum_{\mathbf{s}'',r''} g_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}''r''}(\omega^2) V_{\mathbf{s}''r'',\mathbf{s}'r'}\right) u_{\mathbf{s}',r'} = u^0_{\mathbf{s},r}. \tag{10}$$

(10) 式是 $u_{\mathbf{s},r}$ 的 $3N$ 阶非齐次綫性方程組．但如果杂質的掺入只改变少数格点原子的質量和力常数，則 $V_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'}$ 只在杂質所影响到的 $\mathbf{s}, r$ 和 $\mathbf{s}'', r''$ 才不为零，因而，只有杂質影响到的 $u_{\mathbf{s}',r'}$ 出現在(10)式右端的求和号下．这样，实际上不必解整个 $3N$ 阶的方程組，而只要解出 $3(z+1)$ 阶的方程組就够了（$z+1$ 是杂質影响到的格点数目）．

因此，对于杂質所直接影响到的格点，有

$$u_{\mathbf{s},r} = \frac{1}{D(\omega^2)} \sum_{\mathbf{s}',r'} B_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'} u^0_{\mathbf{s}',r'}, \tag{11}$$

其中

$$D(\omega^2) = \left| \delta_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'} + \frac{1}{2\gamma} \sum_{\mathbf{s}'',r''} g_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}''r''}(\omega^2) V_{\mathbf{s}''r'',\mathbf{s}'r'} \right|, \tag{12}$$

求和只对杂質影响到的格点进行，因而 $D(\omega^2)$ 为 $3(z+1)$ 阶行列式．从文献[8]知道，正是行列式 $D(\omega^2)$ 决定了局域模和不稳定局域模的頻率和寬度．$B_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'}$ 是 $D(\omega^2)$ 的第 $\mathbf{s}r$，$\mathbf{s}'r'$ 元素的代数余子式．这样我們就求得了含杂晶格的带内本征矢为

$$u_{\mathbf{s},r}(\mathbf{k}, j) = \frac{e_r(\mathbf{k}, j)}{\sqrt{N}} \left\{ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}} - \frac{1}{2\gamma D(\omega^2)} \sum_{\substack{\mathbf{s}',r' \\ \mathbf{s}'',r'' \\ \mathbf{s}''',r'''}} g_{\mathbf{s}r,\mathbf{s}'r'}(\omega^2) V_{\mathbf{s}'r',\mathbf{s}''r''} B_{\mathbf{s}''r'',\mathbf{s}'''r'''} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}'''} \right\}. \tag{13}$$

这些不同 $(\mathbf{k}, j)$ 的本征矢量是正交归一的，并和带外局域模一起构成一組正交完备系[12]．

用同样的方法，可以求得局域模波函数，但在三維情况下，对 $\mathbf{s}$，r 求和无法解析地完成，其归一常数无法确定．这样，在第五节中就不能用它来估計局域模对电声子耦合的貢献，因此，这里不准备写出它的表示式．

三、对 称 分 析

一般来講，杂質的存在使杂質与邻近若干层原子的力常数发生改变．設这样被直接影响到的原子总数为 z，則可以形象地把包括杂質在內的 $z+1$ 个原子看成一个"分子集团"，并且可用羣論方法得到这个集团的 $3(z+1)$ 个对称坐标，它們分别属于杂質格位羣的不可約表示 $\Gamma_g(g=1, 2, \cdots, \nu)$．下面的計算显示出：只有对称类型为 Γ_g 中之一的理想晶格的对称性駐波才受到杂質散射，不属于 Γ_g 型中之一的对称性駐波将不受杂質的任何干扰．并且，这个杂質形成的局域模和不稳定局域模必須具有 Γ_g 中之一的对称性．从物理图象看，这些結論是极其容易理解的．

把"分子集团"的 $3(z+1)$ 个位移分量写成矢量形式，則(10)式变为

$$Du = u^0, \tag{14}$$

其中

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{3(z+1)} \end{pmatrix}, \quad u^0 = \begin{pmatrix} u_1^0 \\ u_2^0 \\ \vdots \\ u_{3(z+1)}^0 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

由么正变换 S 得出"分子集团"的对称坐标

$$\left.\begin{aligned} W &= S^+u, \\ W^0 &= S^+u^0. \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

W 成为格位羣不可約表示的基．这时(14)变为

$$MW = W^0, \tag{17}$$

其中

$$M = S^+DS. \tag{18}$$

M 一般为准对角化的

$$\begin{pmatrix} \boxed{M_1} & & & \\ & \boxed{M_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \boxed{M_\nu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ \vdots \\ W_{3(z+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_1^0 \\ W_2^0 \\ \vdots \\ W_{3(z+1)}^0 \end{pmatrix}, \tag{19}$$

每一 M_i 与格位羣的一个不可約表示相对应．这时，(19)分解为

$$M_iW^i = W^{0i} \qquad i = 1, 2, \cdots, \nu. \tag{20}$$

解(20)，得到

$$W_l^i = \frac{\sum\limits_{l'} K_{ll'}^i W_{l'}^{0i}}{M_i}, \tag{21}$$

W_l^i 是第 i 个不可約表示的基中的第 l 个分量；$K_{ll'}^i$ 是 M_i 的第 ll' 元素的代数余子式．把

(21)代入(16),再把 u 代入(9),得到散射波已被对称化了的本征矢量为

$$u_{s,r} = u^0_{s,r} - \frac{1}{2\gamma}\sum_i \frac{1}{M_i}\sum_l \Big[\sum_{\substack{s',r'\\ s'',r''}} g_{sr,s'r'}(\omega^2) \times$$

$$\times V_{s'r',s''r''} S_{s''r''(il)} \sum_{l'} K^i_{ll'} W^{0i}_{l'}\Big], \tag{22}$$

i 求和号下的部分即为按格位羣的第 i 个不可約表示变换的散射波,方括号中的部分为其第 l 个分量. 在把 $u_{s,r}$ 組合成对称性駐波的同时, i 求和号下的部分就相应地組成各种对称类型的散射波.

对称化手續自动地使 D 准对角化:

$$D = \prod_i D_i. \tag{23}$$

这样, 每一因子 $\frac{1}{D_i(z)}$ 的极点(实的或复的)都对应于杂質的相应对称类型的局域模(稳定或不稳定),决定各种类型局域模頻率的方程即为[8]

$$D_i(\omega^2) = 0 \qquad i = 1, \cdots, \nu. \tag{24}$$

而决定各种类型不稳定局域模的頻率和寬度的方程为

$$\mathrm{Re}\, D_i(\omega_i^2 + i\epsilon) = 0 \qquad i = 1, \cdots, \nu, \tag{25}$$

$$\frac{\Gamma}{2} = \left.\frac{\mathrm{Im}\, D_i(\omega^2 + i\epsilon)}{\dfrac{\partial}{\partial\omega^2}\mathrm{Re}\, D_i(\omega^2 + i\epsilon)}\right|_{\omega^2=\omega_i^2} \qquad i = 1, \cdots, \nu. \tag{26}$$

立方晶格中杂質的"分子集团"具有 O_h 对称性, 用 $\{O\}$ 代表这一集团的对称振动的全体(按 O_h 羣的不可約表示标出). 对于簡单立方格子及只考虑最近邻作用的情况,对称分析手續将进一步簡化. 首先, 由于在运动方程中, 格点位移的 x, y, z 三个分量是独立无关的,因此, $3(z+1)$ 阶行列式 $D(\omega^2)$ 在一开始就分解为三个 $z+1$ 阶的子行列式. 由于每一个 $(z+1)$ 阶子行列式都对应于某一平行于坐标軸的运动, 它們的进一步分解自然应按 O_h 羣的子羣 D_{4h} 进行1), 我們用 $\{D\}$ 代表按照 D_{4h} 不可約表示变换的对称振动的全体. 利用 O_h 羣和 D_{4h} 羣表示間的相容关系,就可能很好地判断 $\{D\}$ 中每一个对称振动是属于格位羣 O_h 的那一类型对称振动. 并且, 如果把 $\{D\}$ 中相应的 x, y, z 方向的对称振动作适当的綫性組合, 就可以获得格位羣 O_h 的对称振动的全体 $\{O\}$. 因而, 对于簡单立方、近邻作用的晶格,关鍵的一步是对沿某一坐标軸方向的运动用 D_{4h} 羣加以对称化. 下一节将詳細討論.

四、簡单立方晶格

在这一节中,我們把上面几节的一般理論应用于一个最为簡单的模型,算出所有不稳定局域模的頻率和带內散射态的本征矢. 一个簡单立方晶格,只考虑最近邻相互作用,并設力常数为 γ ($=\gamma_1=\gamma_2=\gamma_3$). 理想晶格的色散关系为

1) 我们注意到,格点位移是向量,用 O_h 羣分类的对称性坐标是位移的三个分量之线性组合. Takeno[18] 最近把位移看成标量函数,竟类似于自旋波局域模而用 O_h 羣来分类平行于某一坐标軸的振动, 其方法和结论是错误的.

$$m\omega^2(\mathbf{k}) = 2\gamma \sum_i (1 - \cos k_i) \qquad i = x, y, z. \tag{27}$$

最大頻率(平方)为

$$\omega_L^2 = 12\gamma/m. \tag{28}$$

在这种情况下，极化矢量 $\mathbf{e}(\mathbf{k}, j)$ 是任意的[1)]，只要是相互正交的单位矢量即可．为明确起見，令 $\mathbf{e}(\mathbf{k}, 1)$ 平行 $\mathbf{k}$，$\mathbf{e}(\mathbf{k}, 2)$ 和 $\mathbf{e}(\mathbf{k}, 3)$ 垂直于 $\mathbf{k}$，因此

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{e}(\mathbf{k}, 1) &= \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta), \\ \mathbf{e}(\mathbf{k}, 2) &= (-\cos\theta\cos\phi, -\cos\theta\sin\phi, \sin\theta), \\ \mathbf{e}(\mathbf{k}, 3) &= (-\sin\phi, \cos\phi, 0), \end{aligned}\right\} \tag{29}$$

θ, ϕ 是 $\mathbf{k}$ 的极角．第一个是縱波，而后两个为横波．

若原点原子被一質量为 m' 的杂質所替代，它同最近邻之間的力常数为 γ'，那么，在我們的情况下，运动方程(4)簡化为

$$m\omega^2 u_{\mathbf{s}} = \sum_{\mathbf{s}} (H^0_{\mathbf{s},\mathbf{s}'} + V_{\mathbf{s},\mathbf{s}'}) u_{\mathbf{s}'}, \tag{30}$$

$u_{\mathbf{s}}$ 是位于格点 $\mathbf{s}$ 沿任一坐标軸方向的位移，下面常常以 x 方向的位移为例进行討論．这时 $V_{\mathbf{s},\mathbf{s}'}$ 的形式为

$$\left.\begin{aligned} &V_{0,0} = (\gamma' - \gamma) + (m - m')\omega^2, \\ &V_{0,\boldsymbol{\delta}} = V_{\boldsymbol{\delta},0} = -V_{\boldsymbol{\delta},\boldsymbol{\delta}} = (\gamma - \gamma'), \\ &V_{\mathbf{s},\mathbf{s}'} = 0 \qquad \text{对于 } \mathbf{s} \neq 0, \boldsymbol{\delta} \text{ 和 } \mathbf{s}' \neq 0, \boldsymbol{\delta}, \end{aligned}\right\} \tag{31}$$

其中 $\boldsymbol{\delta}$ 是最近邻六个格点的位置矢量．

令 $N \to \infty$，把求和化为积分后，格临函数 $g_{\mathbf{s},\mathbf{s}'}(\omega^2)$ 可以写成便于数值計算的形式[14]：

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{s},\mathbf{s}'}(\omega^2) &= -\frac{2\gamma}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{s}-\mathbf{s}')}}{m\omega^2 - m\omega^2(\mathbf{k}) + i\epsilon} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{s}-\mathbf{s}')} d\mathbf{k}}{E - (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) - i\epsilon} = \\ &= i^{(m+n+l+1)} \int_0^\infty dt\, e^{-iEt} J_m(t) J_n(t) J_l(t), \end{aligned} \tag{32}$$

其中已經用到色散关系(27)，并令

$$E = 3 - 6\omega^2/\omega_L^2, \tag{33}$$

m, n, l 是矢量差 $(\mathbf{s} - \mathbf{s}')$ 的三个坐标分量；$J_m(t)$ 是实变量 Bessel 函数：

$$J_m(t) = \frac{i^{-m}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp(mu + t\cos u) du. \tag{34}$$

按前节所述方法，杂質同其最近邻六个原子組成的“分子集团”可能有的对称振动 $\{O\}$ 是 $\{A_{1g}, E_g, T_{1g}, T_{2g}, T_{2u}$ 和 3 个 $T_{1u}\}$．沿任一立方軸的振动具有 D_{4h} 对称性，其可能有的对称振动 $\{D\}$ 是 $\{A_{1g}, E_g, B_{2u}$ 和 3 个 $A_{2u}\}$，即解是三重簡并的．作出 O_h 的不可約表示同 D_{4h} 的不可約表示間的相容关系(只包括 $\{O\}$ 中有的表示)：

1) 当 $\gamma_1 \neq \gamma_2 \neq \gamma_3$ 时，$\mathbf{e}(\mathbf{k}, 1)$，$\mathbf{e}(\mathbf{k}, 2)$，$\mathbf{e}(\mathbf{k}, 3)$ 只能分别取三个坐标軸的方向 $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$.

O_h 羣	A_{1g}	E_g	T_{1g}	T_{2g}	T_{1u}	T_{2u}
D_{4h} 羣	A_{1g}	A_{1g}; B_{1g}	E_g; A_{2g}	E_g; B_{2g}	A_{2u}; E_u	B_{2u}; E_{2u}

(35)

所以 $\{O\}$ 中的不可約表示同 $\{D\}$ 中的不可約表示的对应关系是

$\{O\}$	A_{1g}	E_g	T_{1g}	T_{2g}	T_{1u}	T_{2u}
$\{D\}$	A_{1g}	A_{1g}	E_g	E_g	A_{2u}	B_{2u}

(36)

在作了这种分析后，很易找到把 u_δ, u_0 变成按 $\{D\}$ 变换的对称坐标 W 的么正变换 S[23]：

$$S=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & -c & 0 & 0 & e \\ 0 & a & 0 & -c & 0 & 0 & -e \\ 0 & a & -b & d & 0 & e & 0 \\ 0 & a & -b & d & 0 & -e & 0 \\ 0 & a & b & d & e & 0 & 0 \\ 0 & a & b & d & -e & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{37}$$

其中 $a=\frac{1}{\sqrt{6}}$, $b=\frac{1}{2}$, $c=\frac{1}{\sqrt{3}}$, $d=\frac{1}{2\sqrt{3}}$, $e=\frac{1}{\sqrt{2}}$. 这样就能把七阶的 $D(\omega^2)$ 变成准对角化，它的各个因子是

$$\left.\begin{aligned} D_{1,2}(A_{2u}) &= \begin{vmatrix} 1+g_{000}(6\alpha+\beta)-6\alpha g_{100} & \sqrt{6}\ \alpha(g_{100}-g_{000}) \\ \sqrt{6}\,\alpha(6g_{100}-g_{000}-g_{200}-4g_{110}) & 1+\alpha(g_{000}+g_{200}+4g_{110}-6g_{100}) \end{vmatrix}, \\ D(B_{2u}) &= D_3(A_{2u}) = 1+\alpha(g_{000}+g_{200}-2g_{110}), \\ D(A_{1g}) &= 1+\alpha(g_{000}-g_{200}), \\ D(E_g) &= [1+\alpha(g_{000}-g_{200})]^2, \end{aligned}\right\} \tag{38}$$

其中三个 A_{2u} 型的振动分别用下标 1, 2, 3 来区分.

$$\left.\begin{aligned} \alpha &= \frac{\gamma'-\gamma}{2\gamma}, \\ \beta &= (m-m')\frac{\omega^2}{2\gamma}. \end{aligned}\right\} \tag{39}$$

从(38)看出，只有在 $D_{1,2}(A_{2u})$ 中含有杂质质量 m'，根据对应关系 (36) 可知，在簡单立方晶格中，同位素杂质只能产生 T_{1u} 型的局域模和不稳定局域模. 在下面可看到，它也只能散射 T_{1u} 型的对称性駐波. 所以，同位素杂质不影响产生带宽的电声子耦合(一維結論)[5].

从(38)式和对应关系(36)可以判断：在簡单立方、最近邻作用的情况下，所有 g 型的 (A_{1g}, E_g, T_{1g} 和 T_{2g}) 不稳定局域模或(稳定)局域模都是簡并的(偶然簡并)，而且，T_{2u} 同第三个 T_{1u} 型模，第一和第二个 T_{1u} 型模也都是簡并的.

把(38)代入(25),(26)，利用文献[14]中的格临函数数值，我們計算了各种对称类型

的局域模和不稳定局域模的頻率及其寬度与杂質参量 $P=\gamma'/\gamma$ 和 $Q=m'/m$ 的关系(見图 1). 图中 $\frac{\omega_0^2}{\omega_L^2}>1$ 和 $\frac{\omega_0^2}{\omega_L^2}<1$ 的諸曲綫分别属于局域模和不稳定局域模. 下半部分的諸曲綫表示各种不稳定局域模的寬度与杂質参量(γ'/γ 和 m'/m)的关系. 对于局域模, 显然, 寬度为零. 由图 1 可以看出:

(i) 对于 $m'\lesssim\frac{2}{3}m$ 的輕同位素杂質, 产生两个 T_{1u} 型的局域模. 而 $m'\geq 2m$ 的重同位素杂質引起二个 T_{1u} 型的不稳定局域模. m' 越大, 其位置越靠近带底, 其寬度越小.

(ii) 当 $m'=m$, $\gamma'\lesssim 0.56\gamma$ 时, 杂質在带底也产生 T_{1u} 型的不稳定局域模.

(iii) 不管杂質質量怎么样, 当 $\gamma'\gtrsim 2.7\gamma$ 时, 在带頂近处同时产生 T_{1u} 和 T_{2u} 型的不稳定局域模, γ' 变大时, 它向带頂移动并变窄; 在 $\gamma'\gtrsim 4\gamma$ 时, 又出現所有 g 型的不稳定局域模; 直到 $\gamma'\gtrsim 5.8\gamma$ 时, g 型不稳定局域模移出带外而形成 g 型局域模. 当 $\gamma'\gtrsim 6.4\gamma$ 时, 在带頂近处, T_{1u} 和 T_{2u} 型不稳定局域模亦移出带外而形成同一类型的局域模.

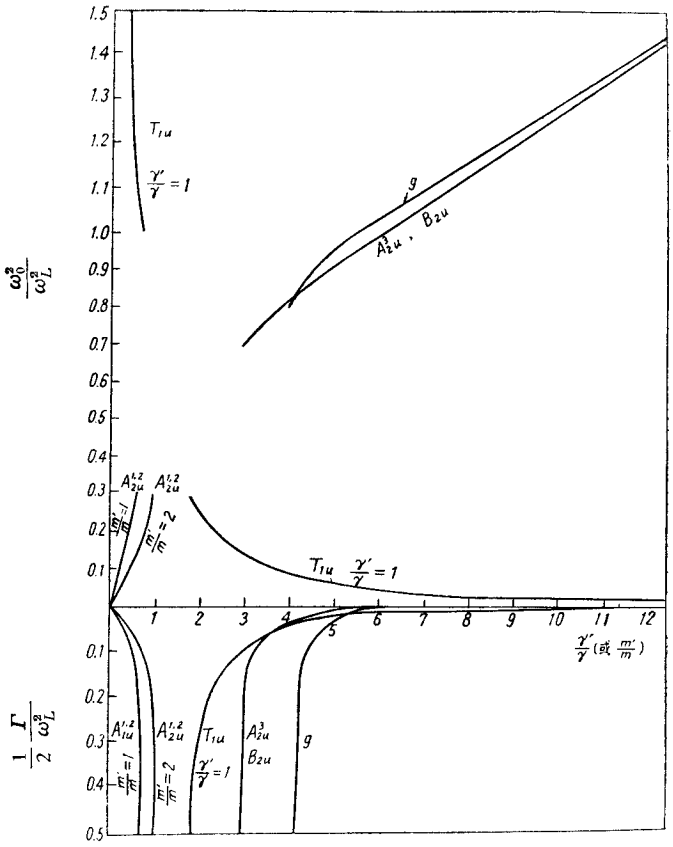

图 1　各种类型局域模与不稳定局域模的頻率及寬度与杂質参量 γ'/γ 和 m'/m 的关系曲綫(图上未画出 $A_{2u}^{1,2}$ 型的局域模曲綫)

我們感兴趣的是 g 型不稳定局域模, 因为唯有它們才对引起带寬的电声子耦合有貢献.

把(2)和(37)代入(16)的第二式, 算出 W_l^{0j}, 把它和(31), (37)以及(38)一起代入(22)式, 立刻得到已对称化了的散射波的带內本征矢为

$$u_s(\mathbf{k},j)=\frac{e_x(\mathbf{k},j)}{\sqrt{N}}\left\{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}}-\frac{1}{D_1(A_{2u})}\Phi_s(\mathbf{k})-\frac{1}{D_2(A_{2u})}\psi_s(\mathbf{k})-\right.$$
$$-\frac{1}{D(B_{2u})}\frac{\alpha}{2}(g_{s4}+g_{s5}-g_{s6}-g_{s7})(\cos k_y-\cos k_z)-$$
$$-\frac{1}{D_3(A_{2u})}\frac{\alpha}{6}(g_{s2}+g_{s3}+g_{s4}+g_{s5}+g_{s6}+g_{s7})(\cos k_z+\cos k_y-$$

$$
\begin{aligned}
&-2\cos k_x) - \frac{i\alpha}{D(A_{1g})}(g_{s2} - g_{s3})\sin k_x - \\
&-\frac{i\alpha}{D(E_g)}[1 + \alpha(g_{000} - g_{200})][(g_{s4} - g_{s5})\sin k_y + \\
&+ (g_{s6} - g_{s7})\sin k_z]\Big\},
\end{aligned} \tag{40}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
\Phi_s(\mathbf{k}) = {} & [g_{s1}(6\alpha + \beta) - \alpha(g_{s2} + g_{s3} + g_{s4} + g_{s5} + \\
& + g_{s6} + g_{s7})][1 + \alpha(g_{000} + g_{200} + 4g_{110} - 6g_{100}) - \\
& - 2\alpha(g_{100} - g_{000})(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)],
\end{aligned} \tag{41}
$$

$$
\begin{aligned}
\psi_s(\mathbf{k}) = {} & \alpha[g_{s2} + g_{s3} + g_{s4} + g_{s5} + g_{s6} + g_{s7} - \\
& - 6g_{s1}]\Big\{\frac{1}{3}[1 + g_{000}(6\alpha + \beta) - 6\alpha g_{000}](\cos k_x + \\
& + \cos k_y + \cos k_z) - \alpha(6g_{100} - g_{000} - g_{200} - 4g_{110})\Big\},
\end{aligned} \tag{42}
$$

1 至 7 代替杂质和最近邻格点的位置矢量: 1:(0 0 0); 2:(1 0 0); 3:(−1 0 0); 4:(0 1 0); 5:(0 −1 0); 6:(0 0 1); 7:(0 0 −1). 只要作輪換 $e_x \to e_y \to e_z$; $x \to y \to z$; 2, 3 → 4, 5 → 6, 7, 就能得到 y 和 z 方向的本征矢量. 在 (40) 中,大括号里第一項是理想晶格的格波 (入射波), 其余的散射部分都已按它們的对称类型分开了. 当把平面波組合成对称性駐波时[10],只有对称性与之相应的散射部分留下,而其余部分自动抵消.例如,用在坐标軸方向的一組 $\mathbf{k}$ 的縱波組成 A_{1g} 型对称性駐波为

$$
\begin{aligned}
&\frac{2}{\sqrt{6N}}[\sin m|k| + \sin n|k| + \sin l|k| - \\
&\qquad - \frac{\alpha\sin|k|}{D(A_{1g})}(g_{s2} - g_{s3} + g_{s4} - g_{s5} + g_{s6} - g_{s7})],
\end{aligned} \tag{43}
$$

只要利用关系

$$
g_{m,n,l} = g_{-m,n,l} = g_{m,-n,l} = g_{m,n,-l} \tag{44}
$$

和(34)的对称性,就可知(43)是属于 A_{1g} 型的. 按同样方法,可組成所有其他对称性的駐波.当我們組成 A_{2g} 型駐波时,将看到只有理想部分而沒有散射部分, 因为在 $\{O\}$ 中沒有 A_{2g} 型的对称振动. 在簡单立方最近邻作用的情况下,还有 A_{1u}, A_{2u} 和 E_u 的对称性駐波不被散射. 当考虑到次近邻相互作用时,只有剩下 A_{1u} 型不被散射. 当然,当作用范围更大时,所有对称駐波都被散射,因为这时 $\{O\}$ 将包含 O_h 羣的所有不可約表示.

五、不稳定局域模对电声子耦合的影响

現在用上节的結果来討論一个更有兴趣的問題, 即杂质中心引起的不稳定局域模对电声子耦合的影响. 按照文献[5],我們从带寬(二次矩)的表示式

$$
m^2 = \sum_{\mathbf{k},j} \epsilon^2_{\mathbf{k},j} \frac{\hbar}{2\omega}\coth\frac{\beta_k}{2} \tag{45}
$$

出发,其中

$$
\beta_k = \frac{\hbar\omega(\mathbf{k})}{kT},
$$

$$\epsilon^2_{\mathbf{k},j} = \left| \sum_{\mathbf{s}\neq 0} (\boldsymbol{\varepsilon}'_{\mathbf{s}} - \boldsymbol{\varepsilon}''_{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{s}}(\mathbf{k}, j) \right|^2, \tag{46}$$

$\boldsymbol{\varepsilon}'_{\mathbf{s}}$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}''_{\mathbf{s}}$ 是杂质中心上电子在初态和末态时作用在第 $\mathbf{s}$ 格点上的力；$\mathbf{V}_{\mathbf{s}}(\mathbf{k}, j)$ 在 x 方向的分量就是(2)式(理想格子)或(40)式(含杂晶格).

同文献[5]一样，把 $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{s}}$ 取成球对称的(径向力)，由于在三維情况中的格临函数 $g_{\mathbf{s},\mathbf{s}'}$ 只能用数值来表示，所以在(46)中，对 $\mathbf{s}$ 求和一般是无法进行的，因而不能象一維情况那样，得到一个以表示相互作用范围的参量的解析式，只能把討論局限于十分局域的相互作用情况，即在(46)中只对最近邻的 $\mathbf{s}$ 求和，而假定 $(\boldsymbol{\varepsilon}'_{\mathbf{s}} - \boldsymbol{\varepsilon}''_{\mathbf{s}})$ 很快地衰減，以致在最近邻以外就可近似地被略去. 这相当于在离子晶体中的情况[5].

在作了上述假定后，(46)式变成

$$\epsilon^2_{\mathbf{k},j} = \left| \sum_{\boldsymbol{\delta}} \frac{a\boldsymbol{\delta}}{|\boldsymbol{\delta}|} \cdot \mathbf{V}_{\boldsymbol{\delta}}(\mathbf{k}, j) \right|^2, \tag{47}$$

a 是电子在初、末态时，作用在最近邻格点上的力之差值，我們把它看成一待定常数. 把(2)式和(29)式代入(47)式，得到理想情况的电声子耦合強度

$$\left.\begin{aligned}
\epsilon^2_{\mathbf{k},1} &= \frac{4a^2}{N}(\sin\theta\cos\phi\sin k_x + \sin\theta\sin\phi\sin k_y + \cos\theta\sin k_z)^2,\\
\epsilon^2_{\mathbf{k},2} &= \frac{4a^2}{N}(\cos\theta\cos\phi\sin k_x + \cos\theta\sin\phi\sin k_y - \sin\theta\sin k_z)^2,\\
\epsilon^2_{\mathbf{k},3} &= \frac{4a^2}{N}(\cos\phi\sin k_y - \sin\phi\sin k_x)^2.
\end{aligned}\right\} \tag{48}$$

从(40)式可以看出，对于十分局域的电声子相互作用，长、短波声子的耦合強度是同等重要的(一維結論)，并且，縱、横波的作用也是相等的. 把(48)式的三个式子相加，得到同 θ, ϕ 无关的表式

$$\epsilon^2_{\mathbf{k}} = \sum_j \epsilon^2_{\mathbf{k},j} = \frac{4a^2}{N}(\sin^2 k_x + \sin^2 k_y + \sin^2 k_z). \tag{49}$$

由于我們主要的目的是考察不稳定局域模与一般模的相对重要性，所以取低温极限 $\left(T = 0,\ \coth\frac{\beta_k}{2} = 1\right)$ 作为討論的对象：

$$\begin{aligned}
m^2(0) &= \sum_{\mathbf{k},j} \frac{\hbar\epsilon^2_{\mathbf{k},j}}{2\omega_k} = \frac{N}{(2\pi)^3}\int \frac{\hbar\epsilon^2_k}{2\omega_k} d\mathbf{k} =\\
&= N\hbar\int G(\omega^2)\epsilon^2_k\, d\omega = 4a^2\hbar\int f(\omega^2)d\omega,
\end{aligned} \tag{50}$$

其中 $G(\omega^2)$ 是平方頻率譜密度：

$$f(\omega^2) = G(\omega^2)\,\overline{(\sin^2 k_x + \sin^2 k_y + \sin^2 k_z)}, \tag{51}$$

(51)中的平均是对所有 $\omega^2(\mathbf{k})$ 相等的 $\mathbf{k}$ 进行的. $f(\omega^2)$ 就是不計杂质对格波的影响(理想情况)和 $T = 0°\mathrm{K}$ 时頻率为 ω 的声子对带寬的貢献.

当考虑到杂质中心对格波的影响后，电声子耦合就有很大的变化. 把(29)和(40)代入(47)，經过同理想情况类似的計算，得到

$$m^2(0) = 4a^2\hbar\int I_a(\omega^2)d\omega, \tag{52}$$

其中

$$I_a(\omega^2)=\frac{f(\omega^2)}{[1+\alpha\mathrm{Re}(g_{000}-g_{200})]^2+\alpha^2[\mathrm{Im}(g_{000}-g_{200})]^2} \tag{53}$$

是 $T=0$, $P=\gamma'/\gamma=1+2\alpha$ 时，频率为 ω 的声子对带寬的貢献. 計算中沒有考慮杂質引起 $G(\omega^2)$ 的改变.

从計算过程中看到，只有 g 型的模有貢献，而 g 型散射波只同力常数的改变有关，同杂質質量无关. (53)式同理想情况的差别仅在于多了一个分母因子. 当有一寬度很窄的不稳定局域模（頻率为 ω_0）存在时，$I_a(\omega_0^2)$ 将有一很銳的极大，这就是說，不稳定局域模对电声子耦合的貢献，使得在 ω_0^2 近处、范围为 Γ 之內的声子对带寬的貢献变得很大.

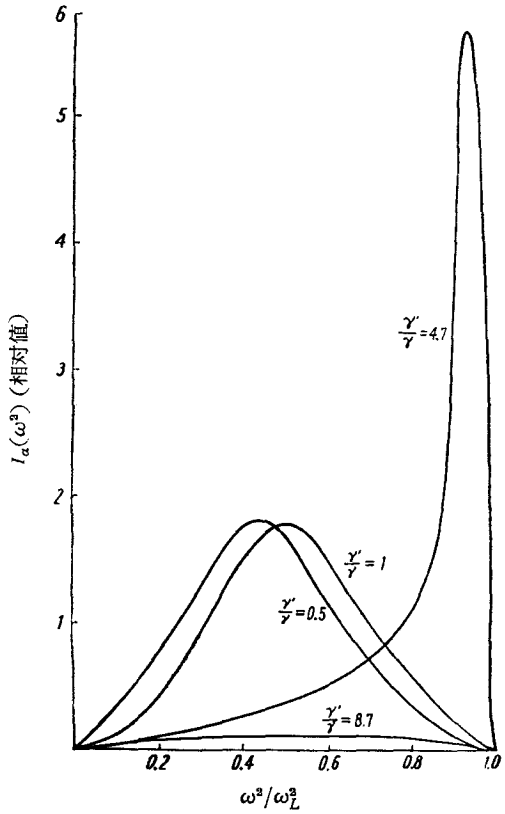

图 2 各个頻段声子对带寬的貢献 ($T=0°K$ 的相对值)

在图 2 中，作出了 $P=0.5, 1, 4.7$ 和 8.7 的 $I_a(\omega^2)$ 曲綫，縱軸的标度只有相对意义，横軸是 ω^2/ω_L^2. 从图中看出，$\gamma'<\gamma$ 时，低頻声子的貢献增大；$\gamma'>\gamma$ 时，高頻貢献增大（一維結論）. $\gamma'>4\gamma$ 后，出現 g 型不稳定局域模，这时頻率在 ω_0 附近的声子貢献突然变得很大（如图 2 中 $P=4.3$ 的曲綫，在 $\omega_0^2=0.93\omega_L^2$ 处有一很銳的峯）. 当 $\gamma'>5.8\gamma$ 后出現局域模，这时对带寬的貢献大部分来自局域模. 尽管由于三維的局域模波函数的归一化无法得到，因而在图上沒有画出它对带寬貢献的大小，但从出現局域模后，带內模的貢献变得很小这一事实（参看图 2 的 $P=8.7$ 的曲綫）可看出，声子对带寬的貢献主要来自局域模（参考一維討論[5]）.

从上述討論可得出：在电子晶格相互作用十分局域时，如果杂質引起的力常数变化导至 g 型局域模的出現，那么，对带寬的主要貢献来自頻率为 ω_l 的局域模；若出現导至寬度很窄的 g 型不稳定局域模，那么对带寬的主要貢献来自 ω_0 近处 $\Delta\omega(=\sqrt{\omega_0^2+\Gamma/2}-\sqrt{\omega_0^2-\Gamma/2})$ 內的声子. 因而在某些問題中，可以近似地用 $\Delta\omega$ 內的一小段頻譜来代替整个連續譜.

在(53)中，我們沒有考慮杂質对頻譜 $G(\omega^2)$ 的影响. 一个孤立杂質引起 $G(\omega^2)$ 的变化約为 $1/N$ 的数量級. 当有 n 个杂質存在时，这种变化也只有 n/N. 一般这种变化是不大的（假定杂質浓度不大），但当出現不稳定局域模时，在頻率 ω_0 近处，$\Delta\omega_0$ 寬度內的頻譜变化 $\Delta G(\omega^2)$ (>0) 是相当大的[15]，而在另外其他地方，$\Delta G(\omega^2)$ 为負值[14]，或为很小的正值. 因此，如果計及 $G(\omega^2)$ 的改变，不稳定局域模对于带寬的影响比(53)的計算值还要大.

六、討　　論

李蔭远等[10]曾对位形坐标模型(单模、单频近似)[16,17]的微观根据作了較詳細的評論，他們指出：这个单一振动模的近似，只有当杂質所形成的一个 g 型局域模在电声子耦合效应中，貢献远大于全部带內模的情况下[5]，才是合理的．但是，在所有卤化碱晶体的 F 中心，按位形坐标模型，从实驗数据算得的頻率 $\omega_{\rm eff}$ 都小于 ω_L[18]，而带外局域模的頻率 ω_l 大于 ω_L，因此，位形坐标模型中的振动模不可能是局域模．这就說明，位形坐标模型微观理論方面相当缺乏根据．

在文献[5]中，我們曾提及文献上常用的单有效頻率近似[19]的問題，这个近似用一个有效頻率 $\omega_{\rm eff}$ 的声子对带寬的貢献来代替全部声子的貢献，这时带寬公式变为

$$m^2 = \varepsilon^2 \frac{\hbar}{2\omega_{\rm eff}} \coth \frac{1}{2}\beta \qquad \beta = \frac{\hbar\omega_{\rm eff}}{kT}. \tag{54}$$

黄昆的連續介質模型[20]必然导致单頻多模的結果，这时 $\varepsilon^2 = \sum_{\mathbf{k},j} \epsilon_{\mathbf{k},j}$．但在卤化碱晶体的 F 心实驗中得到的 $\omega_{\rm eff}$，都小于連續介質模型中的长波縱光学声子的頻率．这是因为在离子晶体中，連續介質模型本身的适用性是有問題的，并且在計算中沒有考虑杂質的影响．根据計算結果，我們認为，只有在下面两种情况下，采用单有效頻率的近似才具有微观根据：i) 杂質导至 g 型局域模出現．这时声子引起的带寬主要来自局域模，因而 $\varepsilon^2 \simeq \varepsilon_l^2$，$\omega_{\rm eff} \simeq \omega_l$．一般 ω_l 在带外[1)]．ii) 杂質引起足够銳的 g 型不稳定局域模出現．这时声子对带寬的貢献主要来自于不稳定局域模，因而 $\varepsilon^2 \simeq \Sigma' \varepsilon_{\mathbf{k},j}$ [求和只对 $\omega(\mathbf{k}, j)$ 在 $\omega_0 - \frac{1}{2}\Delta\omega_0$ 与 $\omega_0 + \frac{1}{2}\Delta\omega_0$ 之間的 $\mathbf{k}$, j 进行]，$\omega_{\rm eff} \simeq \omega_0$．在本文討論的簡单模型中，对于带寬有优势貢献的不稳定局域模，其寬度要求为 $\Delta\omega_0 \lesssim 0.1\omega_L$，它們只出現在带底和带頂．但是值得指出的是，不稳定局域模的寬度 $\Delta\omega_0$ 同理想晶格的平方譜密度 $G(\omega^2)$ 的大小直接有关，只有在 $G(\omega^2)$ 較小的区域，才有可能出現寬度較窄的不稳定局域模．我們的模型，由于用了簡化假定 $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3$，而使 $G(\omega^2)$ 只在 $\omega^2 < 0.3\omega_L^2$ 和 $\omega^2 > 0.7\omega_L^2$ 区域內数值較小，因此限制了不稳定局域模只可能在这些区域出現．但对于稍为复杂一些的晶格模型(如取 $\gamma_1 > \gamma_2 = \gamma_3$ 的簡单立方[1])，以及实际晶体[22]，它們的 $G(\omega^2)$ 可以不仅在带底和带頂，而且往往在带中間(声頻区和光頻区的衔接处)也出現較小的数值，因此，在这些区域中，也有可能出現不稳定局域模．例如：KI, LiF 的 F 心实驗[18]和 KCl 的 U 心实驗[24]中，$\omega_{\rm eff}$ 都在带边上；而 KCl[25], KBr[18] 和 NaCl[18] 的 F 心实驗中，$\omega_{\rm eff}$ 大致都落在带間 $G(\omega^2)$ 的凹区之中[2)]．因此，引起实驗上单有效頻率現象的原因之一，可能是不稳定局域模的出現，但是，只有对实际晶体作了可靠的計算之后，并且証实了 $\omega_{\rm eff} = \omega_0$ 才能認为单有效頻率近似是有微观基础的．

在工作过程中，从选題一直到文稿的修改，李蔭远先生始終給予亲切的关怀和热情的指导，特此致謝．

1) 有少数晶体(其原胞內各原子质量差别较大)的頻譜中间可以出現能隙(如 NaI[21])，这时在能隙內也可能出現局域模(稳定)，因而 $\omega_l < \omega_L$．

2) 这些晶体的頻譜可以参看文献 [21, 22]．

参 考 文 献

[1] Maradudin, A. A., Montroll, E. W. and Weiss, G. H., Solid State Physics, Suppl. **3** (1963).
[2] Ludwig, W., *Ergebnisse der Exakten Naturwissenschaften*, Bd **35** (1964), 1.
[3] Walker, C. T. and Pohl, R. O., *Phys. Rev.*, **131** (1963), 1473.
[4] Visscher, W., *Phys. Rev.*, **129** (1963), 28.
[5] 顾世杰，物理学报，**21** (1965)，787.
[6] Takeno, S., *Progr. Theor. Phys.*, **29** (1963), 191.
[7] Klein, M. V., *Phys. Rev.*, **131** (1963), 1500.
[8] 方励之、顾世杰（尚未发表）.
[9] Montroll, E. W. and Potts, R. B., *Phys. Rev.*, **100** (1955), 525.
[10] 李荫远、褚克弘，物理学报，**21** (1965)，481.
[11] Wu T. Y. (吳大猷) and Ohmura, T., The Quantum Theory of Scattering (1962).
[12] 方励之、顾世杰，物理学报，**19** (1963)，673.
[13] Takeno, S., *Progr. Theor. Phys.*, **28** (1962), 33.
[14] Wolfram, T. and Callaway, J., *Phys. Rev.*, **130** (1963), 2207.
[15] Takeno, S., *Progr. Theor. Phys.*, **29** (1963), 328.
[16] William, F. E., *J. Chem. Phys.*, **19** (1951), 457; *J. Phys. Chem.*, **57** (1953), 780.
[17] Klick, C. C., *Phys. Rev.*, **85** (1952), 154.
[18] Russel, G. A. and Klick, C. C., *Phys. Rev.*, **101** (1956), 1473.
[19] Markham, J. J., *Rev. Mod. Phys.*, **31** (1959), 956.
[20] Huang K. (黄昆) and Rhys, A., *Proc. Roy. Soc.*, **A204** (1950), 406.
[21] Cowley, R. A., et al., *Phys. Rev.*, **131** (1963), 1030.
[22] Born, M. and Huang K. (黄昆), Dynamical Theory of Crystal Lattices (1954).
[23] 李荫远、朱砚磬，物理学报，**19** (1963)，753.
[24] Martienssen, W., *Z. Phys.*, **131** (1952), 488.
[25] Konitzer, J. D. and Markham, J. J., *J. Chem. Phys.*, **32** (1960),843.

UNSTABLE LOCAL MODES OF LATTICE VIBRATION AND THE WIDTH OF ABSORPTION BAND OF IMPURITY CENTRE

GU SHI-JIE HUANG HSI-YI
(*Academia Sinica*)

ABSTRACT

As a continuation of our previous work on the (stable) local modes and their effect on the absorption band width of isolated impurity centres, the problem of unstable local modes is considered in this article. By means of the method of group theory, both the unstable local modes and the scattered wave are classified according to the irreducible representations of relevant site group. The case of a simple cubic lattice with nearest neighbour interaction is discussed in detail and the related calculations are carried out. The results show that when a *g*-type unstable local mode has a rather narrow width, its contribution to the absorption band width may become so large that it exceeds the total contribution of all other lattice vibration waves. Finally, a brief discussion is given on the microscopic basis of the empirical formula of a "single effective frequency" of the electron-phonon coupling.