연구논문집 제 8 권 제 2 호 p.25~30 1977

半導體內의 1價이온不純物의 에너지準位에관한 硏究

趙 和 錫
材料工學科

〈要 約〉

Ⅳ族 半導體內에 있는 1價로 이온화된 不純物이 勵起狀態에서 外力을 받았을때 에너지分離와 相對强度를 理論的으로 硏究한다. 群論을 適用해서 주어진 吸收線의 應力에의한 相對强度를 求한다.

$\Gamma_8 \to \Gamma_8$ 遷移의 成分比는 두개의 實數 parameter에 관계됨을 안다. 하나는 〈111〉의 單一軸方向으로 壓縮되었을때의 量으로 結定되고, 다른하나는 〈100〉와 〈110〉로 壓縮되었을때 結定된다.

A Study on the Energy Level of Singly Ionized Zinc in Germanium

Cho, Hwa Suck
Dept. of Materials Science and Engineering

〈Abstract〉

This paper presents a theoretical Study of the relative intensities and energy splittings of the excitation lines of a single-hole acceptor in a group-Ⅳ Semiconductor. Group theoretical methods are used to give the relative intensities of the stress-induced components of a given absorption line. The theory reveals that the ratios of the intensities of the components of a $\Gamma_8 \to \Gamma_8$ transition depend upon two real parameters. One of these parameters may be determined unambiguously from a measurement with uniaxial compression along a 〈111〉 direction. The magnitude of the other may be found from measurements with compression parallel to 〈100〉 and 〈110〉.

Ⅰ. 序 論

最近 光의 스펙트럼을 硏究하는데, 單一軸應力을 利用하는것, 即 piezospectroscopic 效果가 silicon 이나 germanium 內의 donor나 acceptor의 에너지 상태를 理解하는데 큰 結實을 얻을수 있다.

Silicon이나 germanium에 V族 元素를 doping 했을때 應力効果는 Aggarwal과 Ramdas[1]와 Reuszer와 Fisher[2]등에 의해서 각각 연구되었다.

다른 donor 형태도 많은 硏究者들에 의해서 연구되었다. Silicon과 germanium 內의 lithium[3], silicon 內의 sulfur donor[7], Ⅲ-Ⅴ族 化合物內의 selenium과 tellurium등이 그것이다.

piezospectroscopic方法을 처음으로 acceptor 상태의 硏究에 適用한 사람은 Jones와 Fisher[4]이다. 그들은 germanium 內에 중성 zinc와 Ⅲ族 acceptor thallium[4]을 doping 했을때를 硏究했다. 最近 Barra와 Fisher가 germanium內에 1價로 이온화된 zinc에 대해서 연구했다.

또한 Fisher와 Ramdas[5]는 單一軸應力下에서 silicon 內의 boron의 spectrum을 硏究했다. 그 이테로 磁場이나 단일축힘과 같은 外部 攝動의 영향이 理論的이기는 하지만 不純物의 量子狀態를 표시하는 量子數를 確證하는데 사용되었다.

본 논문은 반도체(germanium) 內에 일가로 이온화된 불순물(zinc)의 에너지상태를 연구 할려고 한다. 여기에서는 단일 hole acceptor가 여기 상태일

때 應力에 의한 成分의 相對的 强度에 관한 理論 [7-8]을 一般化 한다.

Ⅱ절에서 이과정을 자세히 논한다. 여기서 계산된 모든 成分이 두개의 獨立된 실수 parameter에 의해서 對相 强度를 거의 結定할 수 있다는 것을 밝힌다.

이 두 parameter는 電氣双極子能率의 두 行列成分의 實數와 虛數部分에 관계 된다.

Ⅱ. 一般理論

Silicon이나 germanium과 같은 基本半導體内의 acceptor의 여기 스펙트럼을 생각한다. 勵起 스펙트럼의 해석은 doping시킨 acceptor原子에 붙어있는 hole의 狀態가 point group T_d의 既約表現에 따라 分類될 수 있다는 假定으로 부터 출발한다.

1. 應力이 없을때

Spin-orbit 相互作用이 포함될때 valance band edge는 4重과 2重縮退로 分離된다. 이들 두 最大値는 原子의 角運動量 量子數 $J=\frac{3}{2}$과 $J=\frac{1}{2}$에 의해서 각각 特性化 된다. 이 系의 Hamiltonian H_0는 double point group $\bar{T}_d=\bar{E}xT_d$로 분류된다.

$\bar{E}$는 2π의 긴연산자이다.

이들 狀態의 波動函數는 $\bar{T}_d$의 既約表現Γ_8와Γ_7에 대한 bases를형성한다[8]. 여기서 우리는 外部原子가 삽입되었을때도 對稱性은 흔들리지 않는다고 假定한다. 陰으로 荷電된 acceptor 이온에 묶여있는 한개의 hole에 국한 시켜서 생각한다. 특히 1價로 이온화된 Ⅱ族 acceptor를 勵起시켰을때의 스펙트럼을 생각한다. 이것을 boron과 같은 中性 Ⅲ族 acceptor의 여기 스펙트럼에 應用할 수 있다. 예를 들면 Ge 内에 Zn을 삽입시킨 것이다. 中性 Zn acceptor는 두개의 hole를 갖는 Zn^{--}로 생각할수 있다. 만약 物質이 Zn과 같이 Sb도 포함한다면 그 물질 내부에 중성 Zn가 있을 뿐만 아니라 1가로 이온화된 Zn^{-}도 있을 수 있다. Zn^{-} acceptor는 Zn^{--}에 한개의 hole이 붙어있는 것으로 생각할 수도 있다.

T_d의 Single-valued representation 대한 character table과 basis function는 표I[12]과 같다. 여기서 $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$는 直交座標에서 極性 vector의 성분 x, y, z와 같은 역할을 하고, ξ, η, ζ는 $yz(y^2-z^2)$, $zx(z^2-x^2)$과 $xy(x^2-y^2)$과 같은 것이다.

표 Ⅰ. point group T_d의 character표와 basis함수

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$	Basis 함수
Γ_1	1	1	1	1	1	$X^2+Y^2+Z^2$
Γ_2	1	1	1	-1	-1	$X\xi+Y\eta+Z\zeta$
Γ_3	2	-1	2	0	0	$2Z^2-X^2-Y^2$ $\sqrt{3}(X^2-Y^2)$
Γ_4	3	0	-1	1	-1	$\xi,\ \eta,\ \zeta$
Γ_5	3	0	-1	-1	1	$X,\ Y,\ Z$

그리고 $\bar{T}_d$의 double-valued 表現은 표Ⅱ[12]와 같다.

표 Ⅱ. $\bar{T}_d$의 double-valued 기약표현에 대한 character 표

$\bar{T}_d$	E	$\bar{E}$	$8C_3$	$8\bar{C}_3$	$3C_2$	$3\bar{C}_3$	$6S_4$	$6\bar{S}_4$	$6\sigma_d$	$6\bar{\sigma}_d$
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	4	-4	-1	1	0		0	0	0	

Γ_6의 basis 함수는 α와 β이다. 여기서 β는 Γ_1에 속하는 함수 φ_0를 곱한 spin $\frac{1}{2}$ 상태이다. Γ_7의 basis 함수는 α와 Γ_2에 속하는 함수 φ_0'에 곱해진 β이다. Γ_8의 표현은 얻기위해서 아래와 같이 정의된 두조의 함수 ϕ_μ와 $\varphi_\mu\left(\mu=\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)$을 사용한다.

$$\left.\begin{aligned} &\phi_{\frac{3}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(X+iY)\alpha, \quad \phi_{\frac{1}{2}}=\frac{i}{\sqrt{6}}[(X+iY)\beta-2Z\alpha] \\ &\phi_{-\frac{3}{2}}=\frac{i}{\sqrt{2}}(X-iY)\beta, \quad \phi_{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{6}}(X-iY)\alpha+2Z\beta] \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

과

$$\left.\begin{aligned} &\varphi_{\frac{3}{2}}=-\frac{1}{\sqrt{6}}[(\xi-i\eta)\alpha+2\zeta\beta], \quad \varphi_{\frac{1}{2}}=\frac{i}{\sqrt{2}}(\xi-i\eta)\beta \\ &\varphi_{-\frac{3}{2}}=-\frac{i}{\sqrt{6}}[\xi+i\eta)\beta-2\zeta\alpha], \quad \varphi_{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+i\eta)\alpha \end{aligned}\right\} \quad (2)$$

(1)과 (2)의 두조가 필요한 이유는 다음에 설명하겠다. 함수 $X, Y, Z, \xi, \eta, \zeta$가 實數이고 規格化 되었다고 가정한다. 두조 $\{\phi_\mu\}$와 $\{\varphi_\mu\}$는 規格直交이고, ϕ는 φ에 直交이다.

2. 應力에 의한 狀態의 分離

一次元近似範圍에서 stress에 의한 hole의 위치에너지의 변화는 다음과 같다.

$$V=\sum_{i,j} V_{ij}\epsilon_{ij} \quad \cdots\cdots(3)$$

여기서

$$\epsilon_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \cdots\cdots\cdots\cdots(4)$$

인 변형 tensor 이다. $\vec{u}(\vec{r})$는 stress 때문에 생긴 $\vec{r}$에 있던 점의 변위이다.

V_{ij}는 hole의 위치와 spin에 관계되는 演算子이다. spin 座標를 무시하면, V는 다음과 같다.

$$V=V_{xx}\epsilon_{xx}+V_{yy}\epsilon_{yy}+V_{zz}\epsilon_{zz}+(V_{yz}+V_{zy})\epsilon_{yz}+(V_{zx}+V_{xz})\epsilon_{zx}+(V_{xy}+V_{yx})\epsilon_{xy} \cdots\cdots(5)$$

혹은

$$\begin{aligned}V=&\frac{1}{3}(V_{xx}+V_{yy}+V_{zz})(\epsilon_{xx}+\epsilon_{yy}+\epsilon_{zz})\\&+\frac{1}{6}(2V_{zz}-V_{xx}-V_{yy})\ (2\epsilon_{zz}-\epsilon_{xx}-\epsilon_{yy})\\&+\frac{1}{2}(V_{xx}-V_{yy})\ (\epsilon_{xx}-\epsilon_{yy})+(V_{yz}+V_{zy})\epsilon_{yz}\\&+(V_{zx}+V_{xz})\epsilon_{zx}+(V_{xy}+V_{yx})\epsilon_{xy} \cdots\cdots(6)\end{aligned}$$

ϵ_{ij}가 對稱 tensor이고, V_{ij}의 대칭부분만이 V에 기여한다.

(5)보다 (6)이 $\frac{1}{3}(V_{xx}+V_{yy}+V_{zz})$가 Γ_1에 속하고, $2V_{zz}-V_{xx}-V_{yy}$와 $V_{xx}-V_{yy}$가 Γ_3에 속하고, $V_{zy}+V_{yz}$, $V_{zx}+V_{xz}$, $V_{xy}+V_{yx}$가 Γ_5에 속함을 더 잘 나타낸다. 이 분해는 6개의 성분 ϵ_{ij}로 생성되는 表現을 정리함으로서 유도할 수 있다.

卽 Γ_5을 대칭으로 direct product[13]하면

$$[\Gamma_5\times\Gamma_5]=\Gamma_1+\Gamma_3+\Gamma_5 \cdots\cdots\cdots\cdots(7)$$

반 대칭 direct product[13]는

$$\{\Gamma_5\times\Gamma_5\}=\Gamma_4 \cdots\cdots\cdots\cdots(8)$$

이다.

변형으로 인해서 생긴 V의 영향으로 acceptor의 準位가 變移되거나 分離될 수 있다. Γ_6와 Γ_7상태일때는 Kramers의 定理[14]에 의해서 變移만이 일어나고 分離는 일어나지 않는다.

Stress에 의한 Γ_8 상태의 分離는 다음의 狀態函數에 대한 V의 行列要素를 구함을 필요로 한다.

$$\Psi_\mu=a\phi_\mu+b\varphi_\mu \cdots\cdots\cdots\cdots(9)$$

여기서 $|a|^2+|b|^2=1$이다.

우리가 필요한 行列要素는

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{\mu'}|V|\Psi_\mu\rangle=&|a|^2\langle\phi_{\mu'}|V|\phi_\mu\rangle+|b|^2\langle\varphi_{\mu'}|V|\varphi_\mu\rangle\\&+a^*b\langle\phi_{\mu'}|V|\varphi_\mu\rangle+ab^*\langle\varphi_{\mu'}|V|\phi_\mu\rangle \cdots\cdots(10)\end{aligned}$$

$\langle\phi_{\mu'}|V|\phi_\mu\rangle$를 먼저 계산하자. 이것은 $\phi^{\mu'+}\phi_\mu$의 전개를 필요로 한다. 이 16개의 량은 표 Ⅲ에 있다. 표Ⅲ에서는 더 일반적이다. 卽 $\phi_{\mu'}'^+\phi_\mu$로 구성되어 있다. 여기서 $\phi_{\mu'}'$은 함수 (1)과 같은 방법으로 형성된다. X,Y,Z 대신에 이들과 같을 필요는 없지만 같은 역할을 하는 X',Y',Z'을 갖는다. 9개의 곱 $X_i'X_j(i,j=1,2,3)$은 식(7)과 (8)에서 분리된 T_d의 9次元 表現 $\Gamma_5\times\Gamma_5$에 대한 basis를 형성한다.

$\Gamma_5\times\Gamma_5$의 9개의 basis vecter를 정리하면 다음과 같다.

$$f_0=X'X+Y'Y+Z'Z \cdots\cdots\cdots\cdots(11)$$

$$\left.\begin{aligned}f_1&=2Z'Z-X'X-Y'Y=3Z'Z-f_0 \cdots\cdots\\f_2&=\sqrt{3}(X'X-Y'Y)\cdots\cdots\end{aligned}\right\}(12)$$

$$\left.\begin{aligned}f_x&=\frac{1}{2}(Y'Z+Z'Y) \cdots\cdots\\f_y&=\frac{1}{2}(Z'X+X'Z) \cdots\cdots\\f_z&=\frac{1}{2}(X'Y+Y'X) \cdots\cdots\end{aligned}\right\}(13)$$

$$\left.\begin{aligned}f_\xi&=\frac{1}{2}(Y'Z-Z'Y) \cdots\cdots\\f_\eta&=\frac{1}{2}(Z'X-X'Z) \cdots\cdots\\f_\zeta&=\frac{1}{2}(X'Y-Y'X) \cdots\cdots\end{aligned}\right\}(14)$$

표 Ⅲ. $\phi_{\mu'}'^+\phi_\mu$의 곱

$\phi_{\mu'}'^+\phi_\mu$	$\phi_{\frac{3}{2}}$	$\phi_{\frac{1}{2}}$	$\phi_{-\frac{1}{2}}$	$\phi_{-\frac{3}{2}}$
$\phi'_{\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{3}f_0-\frac{1}{6}f_1+if_\zeta$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(f_X+if_Y)-\frac{1}{\sqrt{3}}(f_\xi-if_\eta)$	$\frac{1}{6}f_2-\frac{i}{\sqrt{3}}f_z$	0
$\phi'_{\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(f_X-if_Y)+\frac{1}{\sqrt{3}}(f_\xi+if_\eta)$	$\frac{1}{3}f_0+\frac{1}{6}f_1+\frac{i}{3}f_\zeta$	$-\frac{3}{2}(f_\xi-if_\eta)$	$\frac{1}{6}f_2-\frac{i}{\sqrt{3}}f_z$
$\phi'_{-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{6}f_2+\frac{i}{\sqrt{3}}f_z$	$\frac{2}{3}(f_\xi+if_\eta)$	$\frac{1}{3}f^0+\frac{1}{6}f_1-\frac{i}{3}f_\zeta$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(f_X+if_Y)-\frac{1}{\sqrt{3}}(f_\xi-if_\zeta)$
$\phi'_{-\frac{3}{2}}$	0	$\frac{1}{6}f_2+\frac{i}{\sqrt{3}}f_z$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(f_X-if_Y)+\frac{1}{\sqrt{3}}(f_\xi+if_\eta)$	$\frac{1}{3}f_0-\frac{1}{6}f_1-if_\zeta$

여기서 (11)는 Γ_1의 basis이고, (12)는 Γ_3에, (13)은 Γ_5에, (14)는 Γ_4에 각각 속하는 basis vector 이다.

(12)의 f_1과 f_2는 표 I의 끝열의 basis function에서 表現 Γ_3의 첫행과 둘째 행에 속한다. 規格直交한 그들은 T_d의 既約表現의 unitary를 이룬다.

같은 이치로 f_X, f_Y, f_Z는 X, Y, Z에 의한 표현 Γ_5의 첫째, 둘째, 셋째 행이 되며, f_ξ, f_η, f_ζ도 Γ_4의 같은 관계 임을 준다.

만약 $X'=X$, $Y'=Y$, $Z'=Z$ 이면 (14)식은 영이 되고 $\varphi_{\mu'}'^{+}\varphi_\mu$ 곱의 결과를 준다. 같은 방법으로 $\varphi_{\mu'}'^{+}\phi_\mu$와 $\varphi_{\mu'}'^{+}\phi_\mu$를 계산한다. $\phi_{\mu'}'^{+}\varphi_\mu$는 表現

$$\Gamma_4\times\Gamma_5=\Gamma_2+\Gamma_3+\Gamma_4+\Gamma_5 \quad\cdots\cdots(15)$$

을 이루는 집합 $X'\xi$, $X'\eta$, $X'\zeta$, $Y'\xi$, $Y'\eta$, $Y'\zeta$, $Z'\xi$ $Z'\eta$, $Z'\zeta$의 선형조합으로 이루어진다.

$\varphi_{\mu'}'^{+}\phi_\mu$는 $\phi_{\mu'}'^{+}\varphi_\mu$의 Hermitian conjugate이다. 식 (10)을 行列형으로 쓰기위해서 각운동량 $J=\frac{3}{2}$인 角運動量의 行列成分 4×4行列 J_x, J_y, J_z를 이용한다.

J_x, J_y, J_z가 $\Gamma_4(\overline{T}_d)$에 속한다.

$$[\Gamma_4\times\Gamma_4]=\Gamma_1+\Gamma_3+\Gamma_5 \quad\cdots\cdots(16)$$

이므로

$$J^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2=\frac{15}{4}I \quad (\Gamma_1)\quad\cdots\cdots(17)$$

$$\left.\begin{array}{l} 2J_z^2-J_x^2-J_y^2=3J_z^2-\frac{15}{4}I \\ \sqrt{3}(J_x^2-J_y^2) \end{array}\right\} (\Gamma_3)\quad\cdots\cdots(18)$$

$$\left.\begin{array}{l} \{J_y\ J_z\}=\frac{1}{2}(J_yJ_z+J_zJ_y) \\ \{J_z\ J_x\}=\frac{1}{2}(J_zJ_x+J_xJ_z) \\ \{J_x\ J_y\}=\frac{1}{2}(J_xJ_y+J_yJ_x) \end{array}\right\} (\Gamma_5)\quad\cdots\cdots(19)$$

이다. 여기서 I는 4×4單位行列이고, J_x, J_y, J_z는 $J=\frac{3}{2}$을 갖는 角運動量演算子 $\vec{J}$의 성분에 對應하는 다음과 같은 行列演算子[15]이다.

$$J_x=\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}i/2 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}i/2 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & \sqrt{3}i/2 \\ 0 & 0 & -\sqrt{3}i/2 & 0 \end{bmatrix}$$

$$J_y=\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \end{bmatrix} \quad (20)$$

$$J_z=\begin{bmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{bmatrix}$$

따라서 V의 行列 $[V]$는 Scalar 量으로 $(\epsilon_{xx}+\epsilon_{yy}+\epsilon_{zz})J^2$, $(2\epsilon_{zz}-\epsilon_{xx}-\epsilon_{yy})\times(3J_z^2-J^2)+3(\epsilon_{xx}-\epsilon_{yy})(J_x^2-J_y^2)$과 $\{J_yJ_z\}\epsilon_{yz}+\{J_zJ_x\}\epsilon_{zx}+\{J_xJ_y\}\epsilon_{xy}$의 線型組合으로 쓸수있다.

그래서 우리는 V의 行列을 다음과 같이 표시할 수 있다.

$$\begin{aligned}[V]=&a'I(\epsilon_{xx}+\epsilon_{yy}+\epsilon_{zz}) \\ &+b'\left\{\epsilon_{xx}\left(J_x^2-\frac{5}{4}I\right)+\epsilon_{yy}\left(J_y^2-\frac{5}{4}I\right)\right. \\ &\left.+\epsilon_{zz}\left(J_z^2-\frac{5}{4}I\right)\right\}+\left(\frac{2d'}{\sqrt{3}}\right)(\{J_yJ_z\}\epsilon_{yz} \\ &+\{J_zJ_x\}\epsilon_{zx}+\{J_xJ_y\}\epsilon_{xy})\quad\cdots\cdots(21)\end{aligned}$$

여기서 계수

$$\begin{aligned}a'=&\frac{1}{9}\int d\vec{r}(V_{xx}+V_{yy}+V_{zz})\ (|a|^2f_0+|b|^2g_0) \\ b'=&-\frac{1}{18}\int d\vec{r}(2V_{zz}-V_{xx}-V_{yy})\ (|a|^2f_1-|b|^2g_1 \\ &-(a^*b+ab^*)\sqrt{3}h_1 \\ d'=&-\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)\int d\vec{r}\ V_{yz}(|a|^2f_x+|b|^2g_x-(a^*b \\ &+ab^*)h_x/\sqrt{3})\quad\cdots\cdots(22)\end{aligned}$$

이다. 여기서 g_0는 $\varphi_{\mu'}'^{+}\varphi_\mu$곱에서 표현 Γ_1의 함수이고, g_1은 Γ_3의 첫행이고, g_x는 Γ_5의 첫행이다.

h_1과 h_x는 $\phi_{\mu'}'^{+}\varphi_\mu$ 에 해당한다.

Ⅲ. 에너지 準位의 結定

1. [111] 축방향으로 작용하는 힘

⟨111⟩ 축방향으로 작용하는 힘 $\vec{F}$에 의한 삽입물순물의 대칭성은 point group C_{3v}대칭이된다. C_{3v}의 double-valued 表現은 표 IV에 주어진다.

표 Ⅳ. C_{3v}의 2重値의 表現

$\overline{C}_{3v}$	E	$\overline{E}$	$2C_3$	$2\overline{C}_3$	$3\sigma_v$	$3\overline{\sigma}_v$
Γ_4	2	−2	1	−1	0	0
Γ_5	1	−1	−1	1	i	$-i$
Γ_6	1	−1	−1	1	$-i$	i

$\Gamma_8(\overline{T}_d)$에 의한 特性準位는 $\overline{C}_{3v}$의 $\Gamma_4+\Gamma_5+\Gamma_6$으로 분해된다.

表現 $\Gamma_5(\overline{C}_{3v})$와 $\Gamma_6(\overline{C}_{3v})$는 서로 共軛複素이기 때문에 그들이 속하는 준위는 時間反轉對稱하에[13] 축퇴되어 있다.

이 경우에 變形의 成分은

$$\left.\begin{array}{l} e_{xx}=e_{yy}=e_{zz}=\frac{1}{3}T(S_{11}+2S_{12}) \\ e_{xy}=e_{yz}=e_{zx}=\frac{1}{3}TS_{44} \end{array}\right\}\quad\cdots\cdots(23)$$

이다. 여기서 T는 응력이고 가해진 힘의 逆方向이고, S_{ij}는 彈性에 따르는 係數[16]이다.

그래서 우리는 (21)식을 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$[V]=[a'(S_{11}+2S_{12})-(5d'/8\sqrt{3})S_{44}]TI+(d'/2\sqrt{3})S_{44}TJ_n^2 \cdots\cdots(24)$$

여기서 J_n은 $\vec{J}$의 [111] 방향의 성분이다.

(24)을 對角化하는 規格直交化函數는 다음과 같다.

$$\left.\begin{aligned}
\Lambda_{\frac{3}{2}}&=\frac{i}{\sqrt{2}}\Psi_{\frac{3}{2}}+\frac{1+i}{\sqrt{6}}\Psi_{\frac{1}{2}}+\frac{1}{\sqrt{6}}\Psi_{\frac{1}{2}}\\
\Lambda_{\frac{1}{2}}&=-\frac{i}{\sqrt{6}}\Psi_{\frac{1}{2}}+\frac{1+i}{\sqrt{6}}\Psi_{-\frac{1}{2}}+\frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{-\frac{3}{2}}\\
\Lambda_{-\frac{1}{2}}&=-\frac{i}{\sqrt{2}}\Psi_{\frac{3}{2}}+\frac{1+i}{\sqrt{6}}\Psi_{\frac{1}{2}}+\frac{1}{\sqrt{6}}\Psi_{-\frac{1}{2}}\\
\Lambda_{-\frac{3}{2}}&=\frac{i}{\sqrt{6}}\Psi_{\frac{1}{2}}-\frac{1+i}{\sqrt{6}}\Psi_{-\frac{1}{2}}+\frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{-\frac{3}{2}}
\end{aligned}\right\}(25)$$

함수 $\Lambda_{\pm\frac{3}{2}}$은 Γ_{5+6}에 속하며 에너지 固有値는 다음과 같다.

$$\lambda_{\frac{3}{2}}=a'(S_{11}+2S_{12})T+(d'/2\sqrt{3})S_{44}T \cdots\cdots(26)$$

$\Lambda_{\pm\frac{1}{2}}$은 $\Gamma_4(\bar{C}_{3v})$에 속하며 그 고유치는 다음과 같다.

$$\lambda_{\frac{1}{2}}=a'(S_{11}+2S_{12})T-(d'/2\sqrt{3})S_{44}T \cdots\cdots(27)$$

그럼으로 이 準位의 에너지 分離는

$$\Delta_{111}=\lambda_{\frac{3}{2}}-\lambda_{\frac{1}{2}}=\left(\frac{d'}{\sqrt{3}}\right)S_{44}T \cdots\cdots(28)$$

이다.

2. [001] 축 방향으로 작용하는 힘

$\vec{F}//\langle 100\rangle$에 대한 point group은 D_{2d}이다. Γ_8은 $\Gamma_6(\bar{D}_{2d})+\Gamma_7(\bar{D}_{2d})$ 로 분해된다. $\bar{D}_{2d}$의 2중치기약표현은 표V에 주어진다.

표 V. $\bar{D}_{2d}$의 표현

$\bar{D}_{2d}$	E	$\bar{E}$	$2S_4$	$2\bar{S}_4$	C_2	$\bar{C}_2$	$2C'_2$	$2\bar{C}'_2$	$2\sigma_d$	$2\bar{\sigma}_d$
Γ_6	2	−2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0		0		0	
Γ_7	2	−2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0		0		0	

변형의 성분은

$$\left.\begin{aligned}
e_{xx}&=e_{yy}=S_{12}T\\
e_{zz}&=S_{11}T\\
e_{xy}&=e_{yz}=e_{zx}=0
\end{aligned}\right\}\cdots\cdots(29)$$

그래서 (21)식은 다음과 같이 계산된다.

$$[V]=a'(S_{11}+2S_{12})TI+b'T(S_{11}-S_{12})(J_z^2-5I/4) \cdots\cdots(30)$$

Γ_8 준위는 $\Gamma_6(\bar{D}_{2d})$에 속하는 파동함수 $\Psi_{\pm\frac{3}{2}}$과 $\Gamma_7(\bar{D}_{2d})$에 속하는 $\Psi_{\pm\frac{1}{2}}$인 두개의 準位로 分離된다. $\Psi_{\pm\frac{3}{2}}$의 固有値는

$$\lambda_{\frac{3}{2}}=a'(S_{11}+2S_{12})T+b'(S_{11}-S_{12})T \cdots\cdots(31)$$

이고, $\Psi_{+\frac{1}{2}}$의 固有値는

$$\lambda_{\frac{1}{2}}=a'(S_{11}-S_{12})T \cdots\cdots(32)$$

이다.

이 準位의 에너지 差異는

$$\Delta_{100}=\lambda_{\frac{3}{2}}-\lambda_{\frac{1}{2}}=2b'(S_{11}-S_{12})T \cdots\cdots(33)$$

이다.

3. [110] 축방향으로 작용하는 힘

$\vec{F}//\langle 110\rangle$ 에 대해서, 不純物의 對稱群은 C_{2v}이다. Γ_8은 $2\Gamma_5(\bar{C}_{2v})$로 분해된다.

변형성분은

$$\left.\begin{aligned}
e_{xx}&=e_{yy}=\left(\frac{1}{2}T\right)(S_{11}+S_{12}),\\
e_{zz}&=S_{12}T\\
e_{yz}&=e_{zx}=0\\
e_{xy}&=\frac{1}{2}TS_{44}
\end{aligned}\right\}\cdots\cdots(34)$$

이다.

식(21)은 다음과 같다.

$$[V]=a'(S_{11}+2S_{12})TI-\frac{1}{2}b'(S_{11}-S_{12})T(J_z^2-5I/4)+(d'/2\sqrt{3})S_{44}T\{J_xJ_y\} \cdots\cdots(35)$$

[V]를 대각화하는 규격직교화 함수는 다음과 같다.

$$\left.\begin{aligned}
\Sigma_{\frac{3}{2}}&=(1+\alpha^2)^{-\frac{1}{2}}(\Psi_{\frac{1}{2}}+i\alpha\Psi_{-\frac{3}{2}})\\
\Sigma_{\frac{1}{2}}&=(1+\alpha^2)^{-\frac{1}{2}}(i\Psi_{\frac{3}{2}}+\Psi_{-\frac{1}{2}})\\
\Sigma_{-\frac{1}{2}}&=(1+\alpha^2)^{-\frac{1}{2}}(-\alpha\Psi_{\frac{1}{2}}+i\Psi_{-\frac{3}{2}})\\
\Sigma_{-\frac{3}{2}}&=(1+\alpha^2)^{-\frac{1}{2}}(-i\alpha\Psi_{\frac{3}{2}}+\Psi_{-\frac{1}{2}})
\end{aligned}\right\}\cdots\cdots(36)$$

여기서

$$\alpha=\frac{[2b'(S_{11}-S_{12})-(4b'^2(S_{11}-S_{12})^2+d'^2S_{11}^2)^{1/2}]}{d'S_{11}} \cdots\cdots(37)$$

$\Sigma_{\pm\frac{3}{2}}$은 固有値가

$$\lambda_{\frac{3}{2}}=a'(S_{11}+2S_{12})T-\frac{1}{4}((2b'(S_{11}-S_{12}))^2+(d'S_{44})^2)^{1/2}\,T \cdots\cdots(38)$$

인 縮退函數이고,

函數 $\Sigma_{\pm\frac{1}{2}}$은 固有値가

$$\lambda_{\frac{1}{2}}=a'(S_{11}+2S_{12})T-\frac{1}{4}((2b'(S_{11}-S_{12}))^2-(d'S_{44})^2)^{1/2}T \quad \cdots\cdots(39)$$

이다.

그러므로 두 準位의 에너지 分離는 다음과 같다.

$$\Delta_{110}=\lambda_{\frac{3}{2}}-\lambda_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}((2b'(S_{11}-S_{12}))^2+(d'S_{44})^2)^{1/2}T \cdots\cdots(40)$$

Ⅳ. 結 論

外部攝動이 없을때 電氣双極子遷移는 Γ_8에서 Γ_6, Γ_7, Γ_8로 일어난다.

電氣双極子能率演算子의 行列成分은 모두 複素行列要素로 표시될 수 있다. 그래서 주어진 遷移確率이 적당한 行列要素의 크기의 자승에 비례하기 때문에 그러한 遷移의 모든 應力으로 인한 성분의 相對强度는 완전히 對稱的으로만 결정된다.

다른 한편 두 Γ_8 狀態사이의 천이에 대한 행열은 두개의 독립적인 複素行列要素로 표시된다. 식(37)에 의하면 α는 서로상반되는 두개의 값을 갖는다. Δ_{100}과 Δ_{111}의 比가 陽이면, $\vec{F}$ // [110]에 대한 $\Gamma_8\to\Gamma_8$ 遷移의 應力에 의한 成功의 相對强度를 얻을 수 있고, 比가 陰이면 그 反轉이 된다. 특히 $\Delta_{100}=\Delta_{111}$ 일때는 $\alpha=\sqrt{3}$으로 소위 等方性이다.

Reference

1. R.L. Aggarwal and A.K.Ramdas, Phys. Rev. **137**, A 602 (1965).
2. J.H.Reuszer and P. Fisher, Phys. Rev. **140**, A245(1965).
3. R.L.Aggarwal, P.Fisher, A.K.Ramdas등 Phys. Rev. **138**, A882 (1965).
4. R. L. Jones and P.Fisher, Solid State Commun. **2**, 369(1964).
5. P.Fisher and A.K.Ramdas, Phys. Letters **16**, 26(1965).
6. A. Onton, Ph.D. thesis (Purdue University 1967) (unpublished).
7. A.Onton, P.Fisher, and A.K. Ramdas, Phys. Rev. **163** 986(1967).
8. R.J.Elliott, Phys. Rev. **96**, 266(1954).
9. J.M. Luttinger and W.Kohn, Phys. Rev. **97**, 869(1955).
10. C.Kittel and A.H.Mitchell, Phys. Rev. **96**, 1488(1954).
11. D.Shechter, J. Phys. Chem. Solids, **23**, 237 (1962).
12. G.F. Koster, J.O.Dimmock, R.G. Wheeler, and H.Statz, Properties of the Thirty-Two Point Groups (MIT U.P., Cambridge, Massachusetts, 1965).
13. M.Hammermesh, Group Theory and its Applications to Physical Problems (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1962), P.132ff.
14. E.P. Wigner, Group Theory and its Appication to the Quantun Mechanics of Atomic Spectra (Academic, New York, 1956), p.325 ff.
15. J.M.Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030(1956)
16. A.L.Schawlow, A.H.Piksis, and S.Sugano, Phys. Rev. **122**, 1469(1961).