

各向异性对 Ham 约化因子的影响

乔芬 邱庆春*

(汕头大学医学院物理与信息学教研室, 汕头 515041; 汕头大学物理系, 汕头 515063. * 联系人, E-mail: qcqiu@stu.edu.cn)

摘要 Ham 在 $E \otimes e$ 系统中所定义的约化因子 p 和 q , 以及它们之间的关系式 $2q - p = 1$, 早已被人们接受和承认, 所引入的约化因子的概念也被广泛应用于电声耦合的研究中. 但当系统具有各向异性时, 约化因子和 Ham 关系式都要随之改变. 利用么正平移变换法, 在分别考虑线性耦合项和各向异性项的情况下, 对 $E \otimes e$ 系统的约化因子 p 和 q 以及 Ham 关系式做了进一步研究. 结果显示在只考虑线性项的情况下, Ham 关系式总是成立的; 而对于进一步加入各向异性项以后, 该式则只能是在特定的耦合区域内才能满足. 当体系处于弱耦合状态时, 上述关系根本不能成立. 各向异性对约化因子有着不同程度的影响, 进而也影响物质的物理性质, 特别是对具有较强电声耦合的 C_{60} 系统, 也可用此方法对系统各向异性的影响进行类似研究.

关键词 电声耦合 约化因子 重叠积分 杨-泰勒效应

Ham^[1]在研究与 2E 电子态的电子顺磁共振(EPR)谱相关的动态杨-泰勒(Jahn-Teller, 简称JT)效应时, 在描述由于磁场、应力或超精细相互作用等造成 2E 能级分裂的自旋哈密顿量中引入了约化因子的概念. 由于约化因子不但能比较直接地反映出晶体中JT效应对能谱的影响, 而且对于某些弱微扰系统, 约化因子就足以描述系统的JT效应的影响. 因此, 许多学者在研究具有电声相互作用的JT系统时, 都对系统的约化因子进行了计算^[2-5], 其中包括 C_{60} 在内的二十面体群的对称性系统. 实验证明, Ham定义的约化因子反映了电声相互作用对自旋轨道耦合、外界压力和内应力等微扰对系统影响的屏蔽效应, 从而让人们更清楚地了解物质内部相互作用的实质. 基于约化因子的意义和重要性, 在 20 世纪七八十年代, 众多物理和化学领域从事理论研究的工作者对不同掺杂的晶体所对应的JT系统中约化因子进行了大量的研究. Ham在定义约化因子的同时, 给出了 $E \otimes e$ 系统的一阶约化因子 p 和 q 之间的关系: $2q - p = 1$; 由于这个关系式很重要, 很多学者对它成立的条件进行了广泛的探讨. Fletcher^[6], O'Brien^[7], Halperin和Englman^[8], Badran等人^[9]以及Gauthier和Walker^[10]都研究证明, Ham的 p 和 q 关系式一般只适合线性耦合的单声子模式; 在单声子模式的基础上, 又对多模的情况进行了讨论. Fletcher^[6]证明了Ham的关系式是成立的; 而Halperin和Englman^[8]在经过严格的论证后得出结论: 除非所有的频率都合并为一个单频率, 否则 $2q - p < 1$. 此外, Halperin和Englman还从理论上还得出多模系统

的 q 的最小值不仅可低于Ham的单模极小值 0.5, 甚至在某些特殊情况下可以低到 0.25.

从以上的研究可以看出, 多模耦合对系统约化因子有一定的影响. 但就我们的研究经验来看, 由于各向异性^[11,12]对势阱的形状以及晶格或分子的振动频率会产生影响, 因此它对JT系统能级的影响也不能忽略. 非常明显的例子是 $E \otimes e$ JT系统, 在只考虑电声的线性耦合项时, 系统的势能面是一个势槽, 而当考虑二阶耦合项后, 势能面将被弯曲成势阱. 所以, 势槽内和势阱中的能级不论从对称性上还是在结构上都有很大区别, 从而势必影响系统的约化因子. 因此, 探讨各向异性在系统中对计算约化因子所起的作用是很有必要的. 鉴于此, 本文在考虑线性项的基础上, 研究分别来自电声耦合的二阶项和反谐振项所产生的各向异性, 探讨各向异性的引入给系统的能级、势阱间的重叠积分及Ham约化因子 p 和 q 引起的变化, 分析这些变化对Ham的约化因子关系式 $2q - p = 1$ 所产生的作用, 进一步探讨这个关系式成立的条件, 从而确定在不同的电声耦合强度下各约化因子对不同对称性的微扰所造成的影响.

1 电声耦合系统的哈密顿量

考虑双重简并的具有立方点群 O 的不可约表示 E 的对称性系统, 其轨道电子态与具有二重简并的 e 对称性的振动模式(分量为 Q_θ 和 Q_e)的耦合就是所谓的 $E \otimes e$ 电声耦合系统. 该系统的哈密顿量可分为谐振项、线性相互作用项、二次项和反谐振项 4 部分, 在

二维空间的轨道电子态基矢 $\{|\theta\rangle, |\varepsilon\rangle\}$ 下, 可表为如下的形式^[1]:

$$H_{\text{总}} = H_{\text{vib}} + H_{\text{int}} + H_{\text{quad}} + H_{\text{anhar}}, \quad (1)$$

其中

$$H_{\text{vib}} = \frac{1}{2} \sum_j \left(\frac{P_j^2}{\mu} + \mu\omega^2 Q_j^2 \right) \hat{A}_1, \quad (2)$$

$$H_{\text{int}} = V_E (Q_\theta \hat{U}_\theta + Q_\varepsilon \hat{U}_\varepsilon), \quad (3)$$

$$H_{\text{quad}} = V_2 [\hat{U}_\theta (Q_\varepsilon^2 - Q_\theta^2) + 2\hat{U}_\varepsilon Q_\theta Q_\varepsilon], \quad (4)$$

$$H_{\text{anhar}} = V_3 Q_\theta (Q_\theta^2 - 3Q_\varepsilon^2) \hat{A}_1, \quad (5)$$

式中 V_E 为线性耦合系数, V_2 为 E 对称性的二次耦合系数, V_3 为 A_1 对称性的三次耦合系数, μ 和 ω 分别是 e 声子模式的有效质量和频率, P_j 是振动坐标 Q_j 的共轭动量, \hat{U}_θ 和 \hat{U}_ε 是具有 E 对称性的电子算符的两个分量, \hat{A}_1 具有单位算符的形式, 分别由下列方程式给出:

$$\hat{U}_\theta = \frac{1}{2} (|\theta\rangle\langle\theta| - |\varepsilon\rangle\langle\varepsilon|), \quad (6)$$

$$\hat{U}_\varepsilon = -\frac{1}{2} (|\theta\rangle\langle\varepsilon| + |\varepsilon\rangle\langle\theta|), \quad (7)$$

$$\hat{A}_1 = |\theta\rangle\langle\theta| + |\varepsilon\rangle\langle\varepsilon|. \quad (8)$$

我们所考虑的系统往往不是孤立的绝热系统, 通常要受到外部微扰(如应力、自旋-轨道耦合和磁场等)的作用, 而这些微扰对系统各物理量性质的影响非常重要, 并且常常是未知量. 正确而有效地写出这部分哈密顿量对我们解决这类问题非常重要. 根据二重简并所具有的对称性耦合的分解, 它应该分解成 E , A_1 和 A_2 三种不可约表示, 即 $E \otimes E = E \oplus A_1 \oplus A_2$. 因此, 一般的微扰哈密顿可写成如下对称化的形式:

$$H' = G_1 \hat{A}_1 + G_2 \hat{A}_2 + G_\theta \hat{U}_\theta + G_\varepsilon \hat{U}_\varepsilon, \quad (9)$$

式中作为电子算符系数出现的 $G_i (i=1, 2, \theta, \varepsilon)$ 不仅具有对称性的特征, 而且还表示了该系统所受外部微扰作用的大小. 其中 G_1 具有立方点群中 A_1 的对称性, G_2 具有不可约表示 A_2 的对称性, G_θ 和 G_ε 则具有不可约表示 E 两个分量的对称性. 轨道算符 \hat{A}_2 在电子基态 $\{|\theta\rangle, |\varepsilon\rangle\}$ 下的表达式为

$$\hat{A}_2 = \frac{i}{2} (|\theta\rangle\langle\varepsilon| - |\varepsilon\rangle\langle\theta|). \quad (10)$$

不难看出, (10) 与 (6) 和 (7) 式具有如下的对易关系:

$$[\hat{U}_\theta, \hat{U}_\varepsilon] = i\hat{A}_2. \quad (11)$$

作为微扰的哈密顿 H' 应该作用在电子-声子耦合

空间, 即态矢量应该是具有一定对称性且含有声子或声子的产生和湮灭算符的态形式. 为了简化能量求解的运算, 在不改变体系任何能量矩阵元的条件下, 我们将电声耦合空间变换到纯电子空间, 将微扰哈密顿写成如下的有效形式:

$$H_{\text{eff}} = G_1 \hat{A}_1 + p G_2 \hat{A}_2 + q (G_\theta \hat{U}_\theta + G_\varepsilon \hat{U}_\varepsilon), \quad (12)$$

式中 p 和 q 是在态空间变换时为保持能量相等而引入的参数, 由下式给出:

$$q = \frac{\langle E_\theta; 0, 0 | U_\theta | E_\theta; 0, 0 \rangle}{\langle \theta | U_\theta | \theta \rangle} = \frac{\langle E_\varepsilon; 0, 0 | U_\varepsilon | E_\varepsilon; 0, 0 \rangle}{\langle \varepsilon | U_\varepsilon | \varepsilon \rangle}, \quad (13)$$

$$p = \frac{i \langle E_\varepsilon; 0, 0 | A_2 | E_\theta; 0, 0 \rangle}{\langle \varepsilon | A_2 | \theta \rangle}, \quad (14)$$

其中 $|E_\theta; 0, 0\rangle$ 和 $|E_\varepsilon; 0, 0\rangle$ 为系统电声耦合的基态函数, $|\theta\rangle$ 和 $|\varepsilon\rangle$ 为纯电子态. 显然, p 和 q 就是 Ham 提出的约化因子^[1], 它们分别影响 A_2 对称性和 E 对称性的微扰. 由于它们在一般情况下小于 1, 因此对系统的微扰起屏蔽作用. 从 p 和 q 的定义式可以清楚看出, 此作用完全是电声耦合的结果.

电子空间和电声耦合空间的变换是通过么正平移变换算符来完成的, 为了满足对称性的变换, 电子态也适当采用了原电子基态的对称性组合, 即 $|\theta_j\rangle = n_\theta^j |\theta\rangle + n_\varepsilon^j |\varepsilon\rangle$ (当 j 分别等于 x, y 和 z 时, $n_\theta = -1/2, -1/2, 1, n_\varepsilon = -\sqrt{3}/2, \sqrt{3}/2, 0$). 其态之间的变换关系由下式给出:

$$|\theta'_j; 0, 0\rangle = U_j |\theta_j; 0, 0\rangle, \quad (15)$$

式中 \hat{U}_j 称为么正平移算符,

$$\hat{U}_j = \exp \left\{ \sum_i C_i^{(j)} (b_i - b_i^+) \right\}, \quad (16)$$

其中 $C_i^{(j)} = -\sqrt{\hbar\mu\omega/2} \alpha_i^{(j)}$, $\alpha_i^{(j)}$ 是计算系统能量极值时所引入的参数, 下标 i 代表声子的模式, 可取 e 模式的两个分量 θ 和 ε , b_j^+ 和 b_j 为声子的产生和湮灭算符. 利用投影算符对任何一个势阱中的态 $|\theta'_j; 0, 0\rangle (j=x, y, z)$ 进行作用都可以得到如下所示的对称化的电声耦合基态^[13]:

$$|E_\theta; 0, 0\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} N_E (|\theta'_z; 0, 0\rangle - \frac{1}{2} |\theta'_x; 0, 0\rangle - \frac{1}{2} |\theta'_y; 0, 0\rangle), \quad (17)$$

$$|E_\varepsilon; 0, 0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} N_E (|\theta'_x; 0, 0\rangle - |\theta'_y; 0, 0\rangle). \quad (18)$$

(17) 和 (18) 式中, N_E 是态函数的归一化因子, 等于

$1/\sqrt{1+S_E/2}$; S_E 为属于不同势阱间谐振子基态的重叠积分, 其定义和计算结果由下式给出:

$$S_E = \frac{\langle \theta'_z; 0, 0 | \theta'_x; 0, 0 \rangle}{\langle \theta_z | \theta_x \rangle} = \exp\left(-\frac{3E_{JT}}{2\hbar\omega}\right), \quad (19)$$

式中

$$E_{JT} = \frac{V^2}{8\mu\omega^2}. \quad (20)$$

E_{JT} 就是由于线性项的电声耦合所造成的 JT 分裂能量, 它与文献[1]的定义有 1/4 系数之差, 这源于 V 和 V_E 的定义. E_{JT} 表示原来对称且简并的能级被分裂为上下两个势能面, 这两个势能面的最低点的能量差被定义为该系统在此情况下的 JT 能量. 从物理概念上讲, 么正平移变换在这里起到了关键的作用, 使得变换后的电声耦合表象的基态在电子态的表象中含有声子的产生和湮灭算符, 从本质上反映了电声耦合的特征.

2 线性耦合项对约化因子的贡献

为清楚起见, 我们首先考虑线性耦合, 忽略二次项和反谐振项的影响. 但完全忽略这两项的影响, 就必须应用连续的投影算符对线性项的波函数进行处理, 否则就要重复 Ham 的运算步骤. 根据我们的计算, 当 $V_2/\mu\omega^2 \ll 1$ 时, 二次项对重叠积分的贡献可以忽略, 但仍可保留系统的对称性和重叠积分. 这样一方面可以避免使用连续投影算符的复杂性, 另一方面(13), (14), (17)~(19)式的定义可继续使用. 因此利用(13)和(14)式, 即可计算约化因子 p 和 q :

$$q = \frac{1+2S_E}{S_E+2}, \quad p = \frac{3S_E}{S_E+2}. \quad (21)$$

把 S_E 的表达式代入(21)式, 很容易计算出 q 和 p 的值, 为方便起见, 我们以 $K_1 = V_E/\sqrt{\hbar\mu\omega^3}$ 为变量将结果绘入图 1, 以便分析和比较.

从图 1 可以看出, 在只考虑线性耦合的情况下, 不管 V_E 取什么值, 关系式 $2q-p=1$ 都是成立的; 此外, 随 V_E 强度的增加, 约化因子 q 以指数形式衰减到某一确定的值(约为 0.5), p 比 q 衰减的更快以致到零, 该图与文献[1]中的图很类似, 不同之处在于文献[1]是取约化因子 q 和 p 的多项式展开近似和不同的自变量. 这就从另一角度展示了 Ham 的结果 $2q-p=1$. 然而, 随着研究的深入, 人们发现电子态与多模振动的耦合对约化因子和 Ham 关系式产生了一定的影响. 由此推断, 电声耦合的高阶项以及反谐振项的加入,

将会导致系统的各向异性效应, 对系统的能量和势阱间的重叠积分也会产生一定的作用, 这势必对约化因子以及 Ham 关系式产生影响.

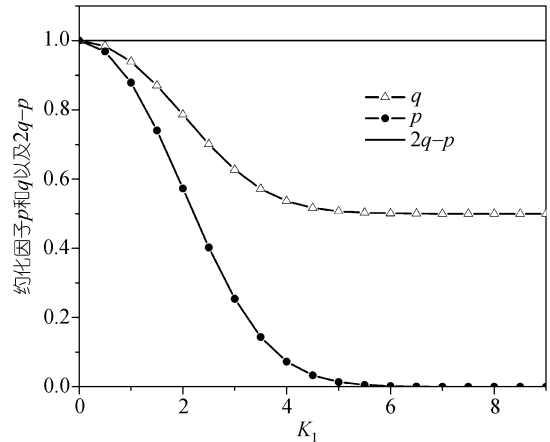


图 1 在只考虑线性耦合作用时, 约化因子 q 和 p 与耦合系数 K_1 的关系

3 H_{quad} 所造成的各向异性对约化因子的影响

当 H_{quad} 项所起的作用比线性项足够小但又能足以形成对称性的势阱时, 将声子的激发所造成的影响作为系统的微扰, 也就是在原来绝热近似的基础上, 将声子激发所造成的微扰作为对基态的修正. 利用微扰理论, 可对系统的重叠积分和约化因子进行计算, 从而确定该微扰对系统的各向异性产生的影响. 在考虑两个声子的修正时, 我们对该系统的约化因子和重叠积分进行了解析计算, 得到了如下的结果:

$$q = \frac{1}{S_{EQ}+2} \left[1 + 2S_{EQ}(1+f_1) \right], \quad (22)$$

$$p = \frac{3S_{EQ}}{S_{EQ}+2} \left[1 + f_1 - \frac{K_1^2}{64} \left(\frac{3K_2}{x+1} + \frac{8}{2x+1} \right) \right], \quad (23)$$

$$S_{EQ} = \exp \left[-\frac{3K_1^2}{16(1-K_2)^2} \right] \cdot \left[1 + 64f_1 \left(\frac{3}{512} + \frac{3}{x+1} + \frac{4(1-2K_2)}{\sqrt{2K_2}(2x+1)} \right) \right], \quad (24)$$

式中

$$f_1 = \frac{3K_1^2 K_2}{64(1-K_2)^2}, \quad K_2 = \frac{V_2}{\mu\omega^2}, \quad x = \frac{K_1^2}{4(1-K_2)}. \quad (25)$$

上式中 S_{EQ} 表示含有电声二次耦合项和两个声子激发作为微扰的重叠积分, K_2 是在计算过程中引入的与二阶电声耦合常数相关的无量纲参数. 计算后则可以

得出, 只有当两种耦合常数都很强时, 约化因子 p 和 q 才满足 Ham 关系式 $2q - p = 1$ (图 2).

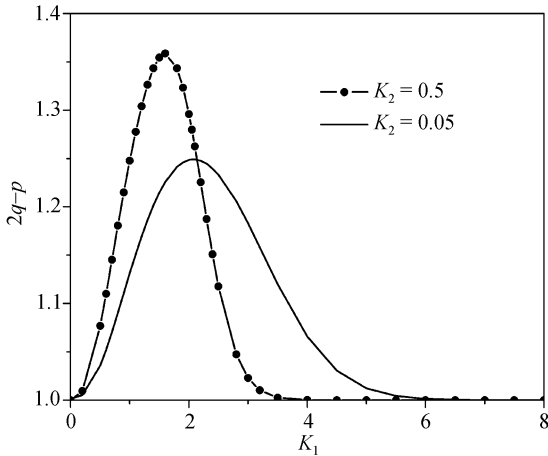


图 2 K_2 取不同值时, Ham 关系式 $2q - p$ 与电声耦合参数 K_1 的函数关系

从图 2 可以看出, 随着 K_2 的减小, 曲线的峰值向右移动并有迅速展宽的趋势, 使得弱线性耦合区域远远偏离 1. 这说明在线性耦合强度较弱时, $2q - 1 = p$ 关系式是不成立的. 在真实的电声耦合系统中, 当线性耦合强度较小时, 作为高阶的二次耦合强度应当更小, 即 K_2 作用很小. 由此得出结论, 对于具有各向异性的弱耦合的电声相互作用体系, Ham 的约化因子关系式 $2q - p = 1$ 不成立.

在考虑二次项引起的各向异性时, 另一个值得观察的系统参数就是势阱间的重叠积分, 因为它不仅能够直接反映势阱间声子态的相互叠加程度, 而且还能够表征势阱形状受二次耦合影响的大小. 为了直观起见, 我们把各向同性状态下的重叠积分与含有各向异性的重叠积分绘于图 3 中.

4 H_{anhar} 所造成的各向异性

与引入二次项的微扰类似, 考虑来自 H_{anhar} 的各向异性项所产生的影响, 利用同样的方法进行处理, 对系统的约化因子和势阱间声子的重叠积分进行了计算. 根据此项微扰的特性, 考虑三个声子的激发所带来的影响, 得到了如下的结果:

$$q = \frac{1 + 2S_{EA}(1 + f_2)}{S_{EA} + 2}, \quad p = \frac{3S_{EA}(1 + f_2 + f_3)}{S_{EA} + 2}, \quad (26)$$

$$S_{EA} = \exp\left[-\frac{3K_1^2}{16(1 - K_2)^2}\right](1 + f_4), \quad (27)$$

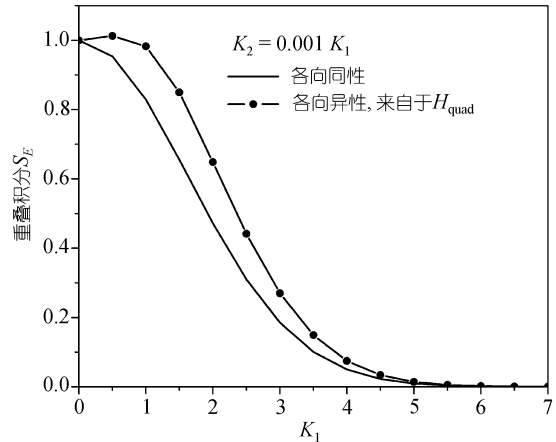


图 3 二次项耦合所造成的各向异性下得到的重叠积分与各向同性下的重叠积分结果

其中参量分别为

$$f_2 = \frac{16K_3}{K_1^4(1 + K_3)^2}, \quad f_3 = -\frac{64(1 + K_3)}{3K_1^4 + 256}, \quad (28)$$

$$f_4 = \frac{3K_1^2}{8(1 - K_3)} \left[\frac{K_3}{4(1 - K_3)^2} - \frac{K_1^2}{32 + K_1^2} \right], \quad K_3 = \frac{3V_E}{2\mu^2\omega^4}. \quad (29)$$

为了清晰起见, 我们将势阱间的重叠积分和约化因子所满足的 Ham 关系式分别绘入图 4 和 5, 并把各向同性的结果一并绘入, 以便比较.

从图 4 可以看出, 重叠积分与二阶项的各向异性有很大区别. 二阶项的各向异性往往造成势阱形状的扩展和区域的扩大, 使得势阱间的重叠积分比各向同性时略大. 但反谐振项的各向异性却使得势阱的形状变得陡峭, 势阱的区域变小, 势阱间的重叠减弱, 从而使重叠积分变小. 这一结果并非是三阶项的

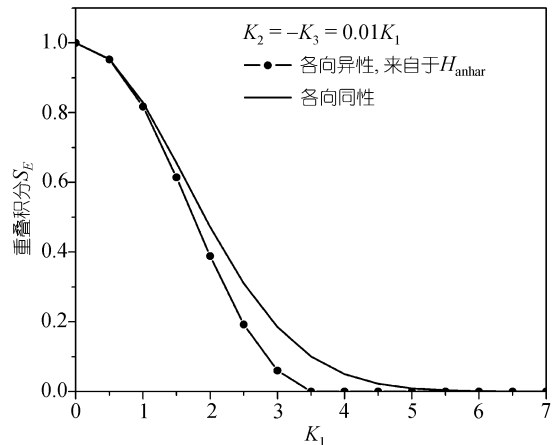


图 4 不同势阱间的重叠积分

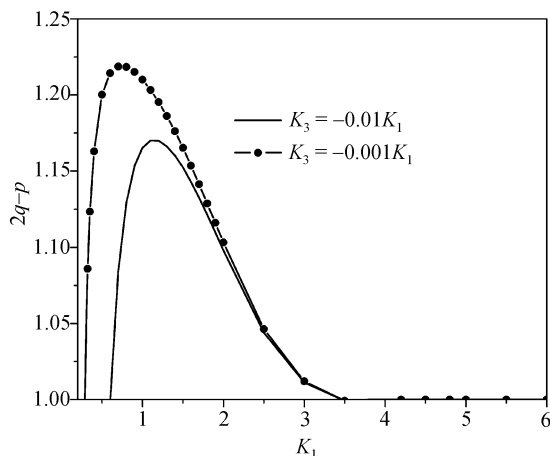


图5 约化因子关系 $2q-p$ 与耦合系数 K_1 及不同 K_3 之间的关系

特征, 而是反谐振项的对称性以及耦合常数 K_3 与线性耦合常数反号^[13]所具有的结果。

从图5可以清楚地看出, 当线性耦合强度较弱时, Ham关系式不成立, 即 $2q-p \neq 1$, 但如果 $K_1 > 3.5$, Ham关系式都是成立的。这说明线性耦合较强时, Ham关系式基本不受反谐振项的影响, 都是成立的。

5 结论

本文在线性及弱二阶项的基础上, 继续考虑来自于 H_{quad} 和 H_{anhar} 项所造成的各向异性对约化因子 p 和 q 及其关系式 $2q-p=1$ 所产生的影响。发现在考虑线性项和非常弱的二阶耦合的情况下, $E \otimes e$ 系统的一阶约化因子 p 和 q 之间的关系 $2q-p=1$ 在任何耦合强度下都是满足的。但在引入各向异性后, 不仅 p 和 q 本身都受到了影响, 而且 Ham 关系式 $2q-p=1$ 也只能是在特定的耦合强度范围内才能成立。这一结果表明, 在引入各向异性后得到的约化因子关系式含有更为详细的信息, 也为进一步模拟实验数据及揭示物质内在相互作用的规律提供了更为具体的物理模型。通过计算, 本文展示了各向异性在计算约化因子中的重要性, 也为实验工作者利用约化因子来解释实验数据提供了又一重要的参考依据, 并可与考虑多模对约化因子的影响相比较。严格说来, 应该统筹考虑各向异性和多模对约化因子的影响, 才能比较精确地提供有关该系统内电声耦合对外加压力、应力以及自旋轨道耦合等作用的约化或屏蔽效应。如果考虑多 JT 中心或多个非满壳层的电子能级的电声耦合系统, 我们需要考虑电子态之间的耦合。这些不同的电子态耦合成更高维数的电子态, 然后再与晶体

的振动模式相互作用, 这就是所谓的乘积型 JT 效应^[14]。解决这种耦合模式的新方法的讨论已经在二重简并的电子态下进行^[15]。能否把本文讨论的各向异性方法纳入乘积型 JT 效应中, 还有待于进一步的探讨。但可以肯定的是, 各向异性效应对电声耦合系统的能级和约化因子都有不可忽视的影响, 在其他电声耦合系统中, 特别是在 C_{60} 参与的高对称性 JT 系统中都应该进一步考虑, 并且应该深入到二阶约化因子的计算。

致谢 本工作为广东省自然科学基金(批准号: 34613)资助项目。

参 考 文 献

- 1 Ham F S. Effect of linear Jahn-Teller coupling on paramagnetic resonance in a 2E state. *Phys Rev*, 1968, 166: 307—321
- 2 Al-Hazmi F E, Moujaes E A, Abou-Ghantous M, et al. Accurate calculations of second-order vibronic reduction factors for C_{60} ions. *J Phys: Condens Matter*, 2005, 17: 4779—4791 [DOI]
- 3 Qiu Q C, Dunn J L, Bates C A, et al. Reduction factors for the icosahedral $T_{1u} \otimes h_g$ Jahn-Teller system. *Phys Rev B*, 2000, 62 (23): 16155—16166 [DOI]
- 4 Bates C A, Abou-Ghantous M, Dunn J L, et al. Second-order vibronic reduction factors for orbital triplet Jahn-Teller systems in cubic and icosahedral symmetry. *J Phys: Condens Matter*, 2004, 16(29): 5309—5325 [DOI]
- 5 Huang R, Abou-Ghantous M, Bates C A, et al. Modelling of the $H \otimes (g+h)$ Jahn-Teller system: Extension to vibronic reduction factors. *J Phys: Condens Matter*, 2002, 14(6): 1319—1335 [DOI]
- 6 Fletcher J R. A variational groundstate for the dynamic Jahn-Teller effect. *J Phys C: Solid State Phys*, 1972, 5: 852—862
- 7 O'Brien M C M. The dynamic Jahn-Teller effect with many frequencies: A simple approach to a complicated problem. *J Phys C: Solid State Phys*, 1972, 5(15): 2045—2063
- 8 Halperin B, Englman R. Reduction factors for the Jahn-Teller effect in solids. *Phys Rev Lett*, 1973, 31(17): 1052—1055
- 9 Badran R I, Jamila S, Kirk P J, et al. First- and second-order reduction factors for $E \otimes e$ Jahn-Teller system. *J Phys: Condens Matter*, 1993, 5: 1505—1516 [DOI]
- 10 Gauthier N, Walker M B. Dynamic Jahn-Teller effect for an electronic E state coupled to the phonon continuum. *Phys Rev Lett*, 1973, 31(19): 1211—1214
- 11 Jamila S, Dunn J L, Bates C A. Further second-order vibronic reduction factors for strongly coupled $T \otimes t_2$ systems. *J Phys: Condens Matter*, 1992, 4: 4945—4958 [DOI]
- 12 邱庆春. $T_{1u} \otimes h_g$ Jahn-Teller 系统: D_{3d} 势阱中的频率分解与能级分裂. *物理学报*, 2004, 53(7): 2292—2298
- 13 Badran R I, Bates C A. An analysis of the strongly coupled $E \otimes e$ Jahn-Teller system: Anisotropy and the inversion splitting. *J Phys: Condens Matter*, 1991, 3: 6329—6343 [DOI]
- 14 Ceulemans A, Qiu Q C. Product Jahn-Teller systems: The $\{T_1 \otimes T_2\} \otimes (e+t_2)$ case. *Phys Rev B*, 2000, 61: 10628—10639 [DOI]
- 15 Qiu Q C. Operatorization and unitary transformation approaches to product Jahn-Teller problems. *Chin Phys Lett*, 2005, 22(8): 2009—2011 [DOI]

(2006-01-18 收稿, 2006-04-03 接受)