

校系所組別：淡江大學 物理學系 博士班

畢業時間及提要別：95 學年度第 2 學期 博士學位論文提要

研究生：李啟正

指導教授：薛宏中 博士

論文提要內容：

氧化鎳(NiO)與氧化鈷(CoO)是一強關聯的系統且為標準的 Mott 絕緣體。非共振非彈性 X 光散射實驗中發現氧化鎳與氧化鈷的  $d-d$  軌域之躍遷呈現很強之動量轉換相依 ( $q$ -dependence) 的特性，且此激子(exciton)的能量分布在準粒子能隙(quasiparticle band gap)之中。為了研究此局域化的躍遷行為，我們發展了局域化、有對稱性、能量可解析之 Wannier 函數。經由對 Wannier 電子電洞對的 Fourier 轉換之解析，我們了解此強動量轉換相依的起源且發現一新的選擇定則。進一步，我們提出一個稱為 TDLDA+U 的方法來解 Bethe-Salpeter 方程式用以描述電子電洞對間的吸引力來得出此能量分布在能隙中的激子。經由此方法，我們發現氧化鎳中的激子強烈混成在 Mott 能隙中。在 Hartree-Fock 近似下，一個有趣的動量轉換相依現象將被討論。另一方面，鈦酸鉛( $\text{PbTiO}_3$ )為一鐵電性材料，我們利用密度泛函微擾理論(DFPT)研究其晶體振動之特性。經由計算零溫下鈦酸鉛的聲子頻譜與彈性波速，我們確定了鈦酸鉛在低溫下的鐵電結構。更重要的，我們詳細分析鈦酸鉛在立方(cubic)與四方(tetragonal)晶體結構下的橫向光頻(TO)與縱向光頻(LO)振動模式間的耦合。不像立方結構中所發現的橫向光頻與縱向光頻間之巨大分裂，四方結構呈現正常的橫向與縱向振動模式之耦合關係。根據此發現，我們重新解釋了在鈦酸鉛摻雜鈣原子( $\text{Pb}_{1-x}\text{Ca}_x\text{TiO}_3$ )下所發現的橫向與縱向之光頻分裂行為。最後我們將討論實驗上所觀測到鈦酸鉛摻雜鈣原子所發生之結構相變的成因，並預測低溫下新結構相變之發生。

關鍵字：線性響應、Wannier 函數、激子、聲子、氧化鎳、氧化鈷、鈦酸鉛