

# 黄方程与极化激元

朱 邦 芬

(中国科学院半导体研究所)

如果晶体元胞含两个原子,其格波(具有波的形式)的晶格振动模)除了三支声学波外,还有三支光学振动波。在长波极限下(即光学声子波长远大于晶格常数),元胞中两个粒子的光学振动方向相反,而元胞的质心则保持静止。在考虑极性晶体与红外光的相互作用以及电子与晶格的相互作用时,长波长光学振动具有特殊的重要性<sup>[1]</sup>。

对于极性晶体,正负离子在光学振动时会伴随产生极化,由此产生的宏观电场反过来又影响晶格光学振动模的频率,造成了纵光学振动(振动方向与波传播方向平行)与横光学振动(振动方向垂直于波传播方向)频率的不同。30—40年代的深入研究表明,这种极化的微观机制异常复杂。离子极化不仅包括电子云的极化,而且还存在着伴随离子振动而出现的电子云畸变的贡献。当时研究光学振动模所采用的硬离子模型显然无法恰当地处理离子极化效应。此外,以微观模型处理长程库仑作用对动力学过程的影响,本身也是一个相当复杂的问题。早期的研究工作曾因未能正确认识长程库仑作用而得出一些错误的结论。

针对这种情形,黄昆先生在1950年提出了一对唯象方程,以解决极性晶体的光学振动问题。黄先生引进宏观电场作为一个新的变量,来描述离子光学振动所受的库仑作用,而宏观电场与离子位移又共同对电极化有贡献。这就是著名的黄方程。它确立了光学位移 $W$ (正比于正负离子位移之差)、宏观电场 $E$ 与电极化 $P$ 三者之间的关系<sup>[1-3]</sup>,即

$$\dot{W} = b_{11}W + b_{12}E, \quad (1)$$

$$P = b_{21}W + b_{22}E. \quad (2)$$

四个系数 $b_{ij}(i, j = 1, 2)$ 中,由能量守恒可证

明 $b_{12} = b_{21}$ ,而它们都与实验可测量(红外色散频率、静态和低频介电常数)直接相联系。这对方程的物理意义十分明确。如果视元胞内光学振动为一个谐振子,则第一式代表运动方程。其中右边第一项是振子内部弹性恢复力,而第二项表示振子受到其他各处电荷长程库仑作用。对于横波或非极性晶体,由于不存在宏观电场或 $b_{12}$ 为零,运动仅由短程力决定。(2)式中如果忽略了 $b_{21}W$ ,晶格的行为就象普通电介质对电场的响应,而 $b_{21}W$ 相当于离子电荷的位移对介电极化的贡献。黄方程作为宏观关系是严格的,结合电磁学方程,它简洁而有效地解决了极性晶体光学振动问题。

作为应用黄方程的一个尝试,黄昆先生首先将其用于研究电磁作用的“推迟效应”(即离子间库仑作用不是瞬时发生的,而是以光速传播)对长光学波的影响。为此,黄先生把黄方程与麦克斯韦方程结合起来,轻而易举地解决了当时微观模型所未能解决的电磁推迟作用对长波光学声子的效应<sup>[1,4]</sup>。黄方程与麦氏方程用于双原子极性晶体,可得五支解。这表明除了三支光学格波外,麦氏方程引入了两支简并的电磁模(光子)。三支光学波中,纵光学声子模不受电磁推迟作用的影响,而两支简并的横光学波在长波情形下与电磁模相互耦合形成新的模式。换句话说,考虑了电磁推迟效应,晶体的长波长横光学格波与电磁波都归结为这种耦合模。

这是一个非常重要的新概念。首先,光子(可以不限于介质内)与声子(仅限于介质内)以同等级位得到处理。其次,电磁波在极性晶体内传播模式应被理解为介质特征模式,即一类

(下转第559页)