固体物理

晶格振动和固体热性质1

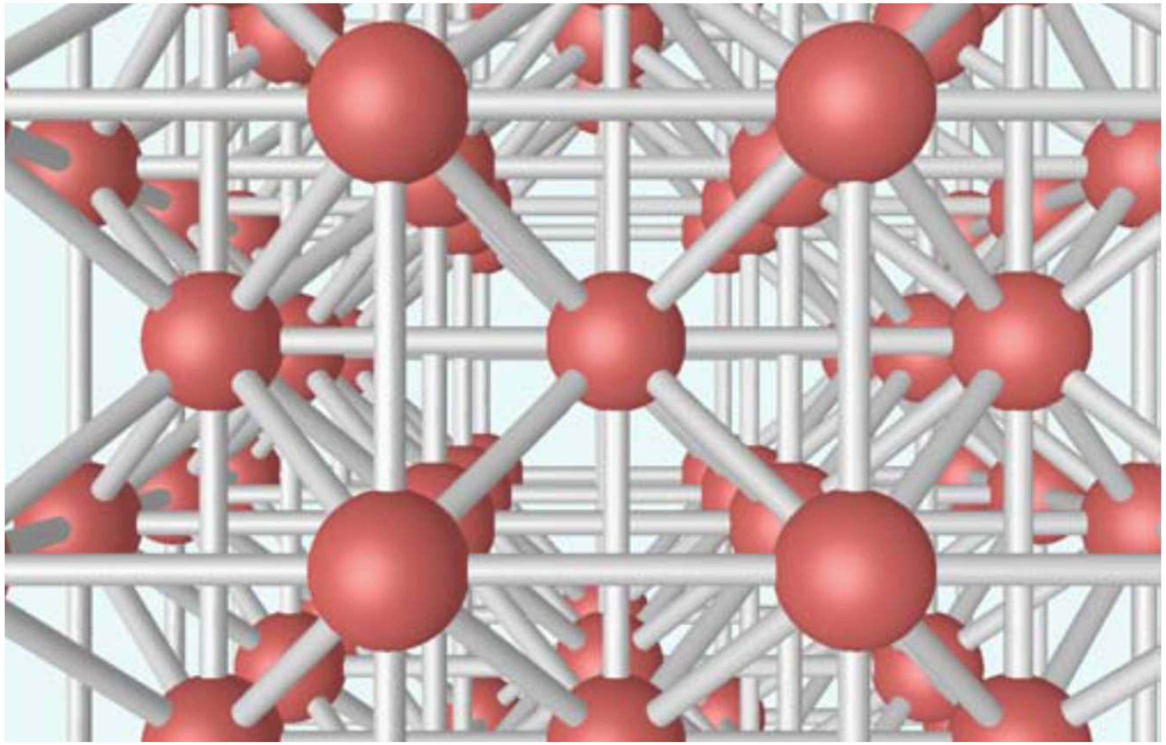
冯 雪

x-feng@tsinghua.edu.cn

罗姆楼2-101B

晶体的原子振动—晶格振动

在讨论电子运动时，晶体内的原子看作是处于平衡位置上固定不动的。



静止晶格模型的局限性

- 静止晶格模型的成功
  - 由电子决定的性质，一般都能较好的描述

- 但是，假定原子都静止在它们的平衡位置，与真实的情况差别有多大?
  - 经典理论：只有在绝对零度，原子才是静止的
  - 量子理论：即使在绝对零度，根据不确定性原理，静止模型也是不成立的——零点波动能
  - 只要原子质量不是无限大，或被无限大的力场所限制，静止晶格模型都只是近似。

静止晶格模型的局限性

- 晶格的观点不能解释比热、热膨胀等平衡性质，也不能解释电导、热导等输运性质
- 电导率将“无限大”
  - 如晶体中原子固定在平衡位置，晶体具有严格的周期性，根据Bloch定理，电子在晶体中运动无散射、无阻尼机制，电导率将是无限大
- 绝缘体是“绝热体”
  - 绝缘体中电子是相对惰性的，所有电子都处于“满带”中，难以参与输运过程
  - 如果对绝缘体采用静止晶格模型，几乎没有自由度可以用来描述绝缘体丰富的、不同的物理性质：例如热传导等

绝热近似

- 绝热近似（波恩-奥本海默近似），定核近似
- 核心：分子系统中核的运动与电子的运动可以分离
  - 固体系统分为两个子系统——电子和原子核
- 研究电子运动的时候可以近似认为原子核是静止不动
  - 电子和原子核运动的速度具有高度的差别

——固体电子论

- 研究原子核的运动时则不需要考虑空间中电子的分布
  - 原子核的运动可以看作整个中性原子的运动

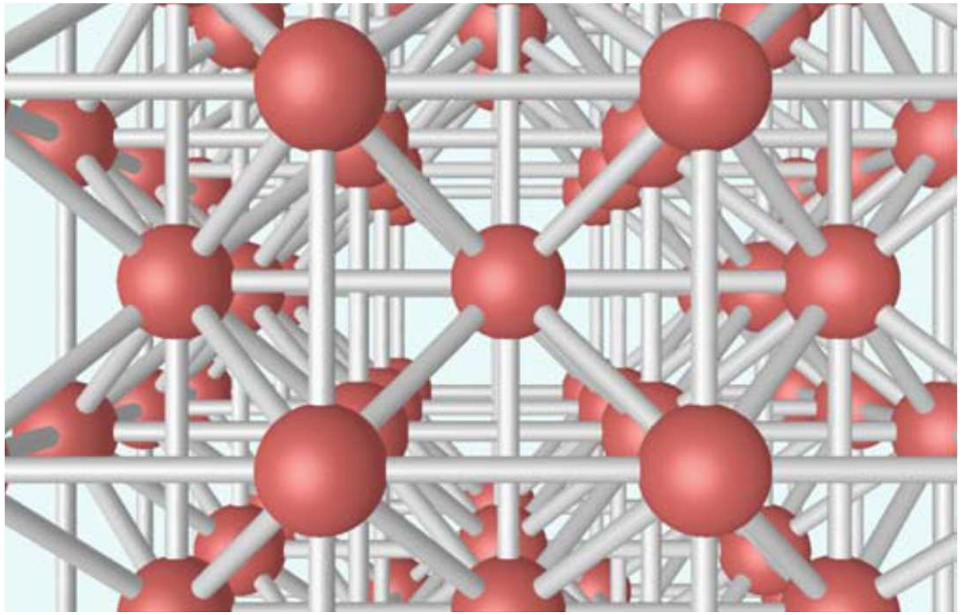
——晶格振动理论

晶体的原子振动—晶格振动

晶体中的格点表示原子的平衡位置，
晶格振动便是指原子在格点附近的振动

晶体的原子振动决定了很多宏观物理性质的基本特征

固体内部的原子振动波
—**声子**显示了热运动
准粒子的波粒二象性



晶体的原子振动—晶格振动

晶格振动的研究，最早是从晶体热学性质开始的，热运动的宏观性质上最直接的表现就是热容量

19世纪根据统计规律对杜隆-珀替经验规律的说明把热容量与原子振动具体联系起来

1907年 爱因斯坦提出声子的概念

1912年 玻恩（Max Born）与冯卡门（Theodore von Karman）提出晶格动力学

晶体的原子振动—晶格振动

1912年 玻恩（Max Born）与冯卡门（Theodore von Karman）提出晶格动力学

德国著名物理学家波恩（1882-1970），是量子力学的创始人之一，曾获1954年度诺贝尔物理学奖。1925年，玻恩写了一本关于晶体理论的书，开创了一门新学科——晶格动力学。1954年他和我国著名物理学家黄昆合著的《晶格动力学》一书，被国际学术界誉为有关理论的经典著作。这本书直到1985年还第三次再版。这位诺贝尔奖获得者曾经在写给爱因斯坦的信中说："书稿内容现在已经完全超越了我的理论，我能懂得年轻的黄昆以我们两人的名义所写的东西，就很高兴了"

波恩（1882-1970）

晶体的原子振动—晶格振动

1912年 玻恩（Max Born）与冯卡门（Theodore von Karman）提出晶格动力学

德国著名物理学家波恩（1882-1970），是量子力学的创始人之一，曾获1954年度诺贝尔物理学奖。1925年，玻恩写了一本关于晶体理论的书，开创了一门新学科——晶格动力学。1954年他和我国著名物理学家黄昆合著的《晶格动力学》一书，被国际学术界誉为有关理论的经典著作。这本书直到1985年还第三次再版。这位诺贝尔奖获得者曾经在写给爱因斯坦的信中说：“书稿内容现在已经完全超越了我的理论，我能懂得年轻的黄昆以我们两人的名义所写的东西，就很高兴了”

1945-1947年，在英国布列斯托（Bristol）大学物理系学习，获哲学博士学位；发表《稀固溶体的X光漫散射》论文，理论上预言“**黄散射**”。

1948-1951年，任英国利物浦大学理论物理系博士后研究员，这期间建立了“**黄方程**”，提出了**声子极化激元**的概念，并与李爱扶（A.Rhys）建立了**多声子跃迁**理论。

1947-1952年，与玻恩教授合著《**晶格动力学**》一书（英国牛津出版社，1954年）。（2006年中文版）

黄昆对晶格动力学和声子物理学的发展做出了卓越的贡献。他的名字与多声子跃迁理论、X光漫散射理论、晶格振动长波唯象方程、二维体系光学声子模联系在一起。他是“极化激元”概念的最早阐述者 。

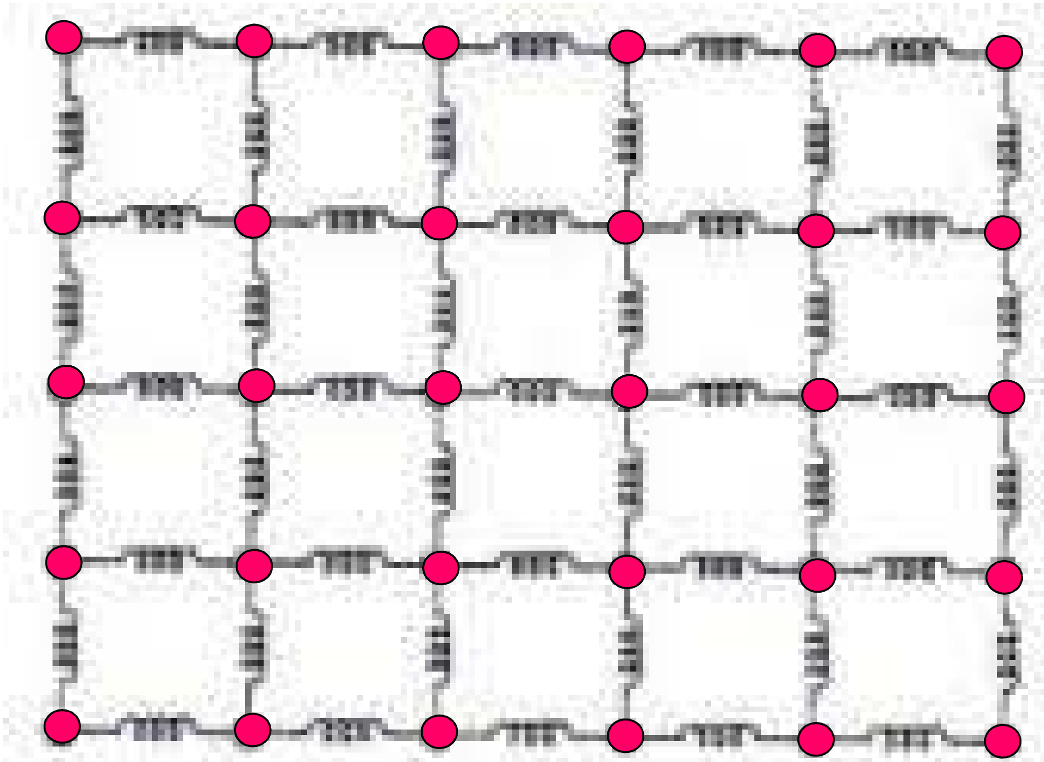
黄昆：1919~2005, 世界著名物理学家,
中国固体和半导体物理学奠基人之一
2001年获国家最高科学技术奖

晶格振动和固体的热特性

- 一维原子链的振动
- 晶格振动的量子化-声子
- 固体热性质

黄昆 书 P78
(第3章)
韦丹 书 P89
(第4章)

简谐近似



形象地讲，若把原子比作小球的话，整个晶体犹如由许多规则排列的小球构成，而小球之间又彼此由弹簧连接起来一般，从而每个原子的振动都要牵动周围的原子，使振动以弹性波的形式在晶体中传播

晶格振动和固体的热特性

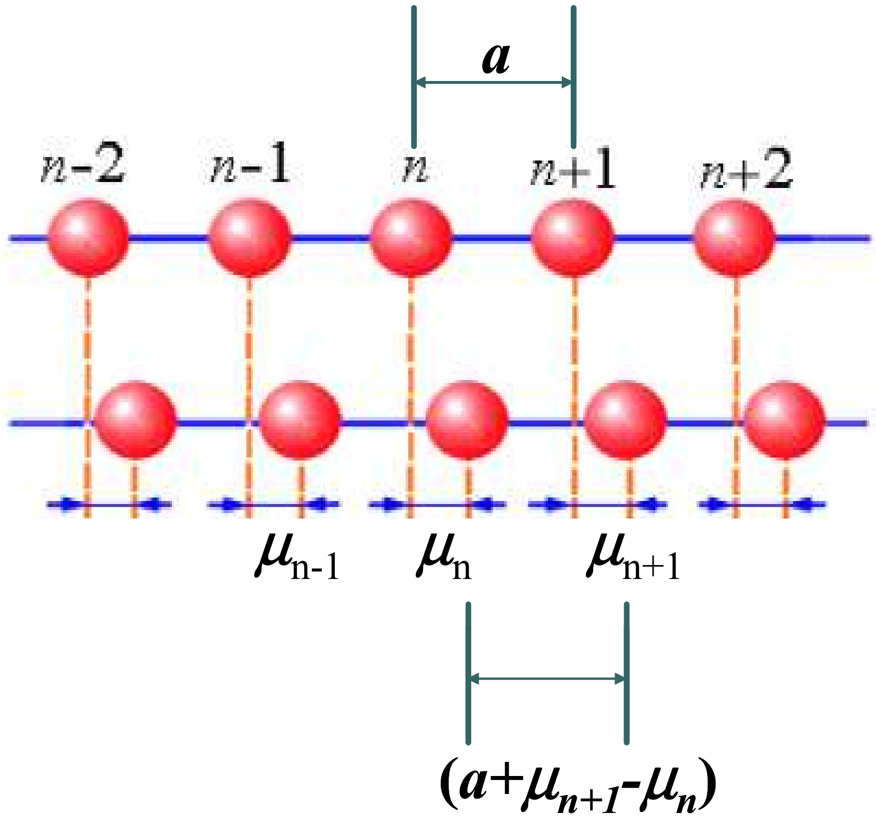
- 一维原子链的振动
- 晶格振动的量子化-声子
- 固体热性质

最简单模型：一维单原子链

一维简单晶格：原子限制在沿链的方向运动
非平衡状态时只考虑纵向振动

原子质量：m

平衡状态原子距离：a



偏离格点的位移为：

$$\cdots,\mu_{n-1},\mu_n,\mu_{n+1},\cdots$$

则n和$n+1$原子间距为

$$a+(\mu_{n+1}-\mu_n)=a+\delta$$

一维单原子链的振动

如果两个原子相对位移为δ，假设只有邻近原子间存在相互作用

两个原子间势能由$v(a)$变为$v(a+\delta)$，展成泰勒级数：

$$v(a+\delta)=v(a)+\left(\frac{dv}{dr}\right)\delta+\frac{1}{2}\left(\frac{d^2v}{dr^2}\right)\delta^2+\ldots$$

简谐近似，保留到δ^2项：

$$v(a+\delta)=v(a)+\frac{1}{2}\beta\delta^2+\ldots$$

相邻原子间的作用力为：

$$|F|=\left|\frac{\partial v}{\partial\delta}\right|\approx|\beta\delta|$$

类别弹簧振子：正比与相对位移的弹性恢复力

一维单原子链的振动

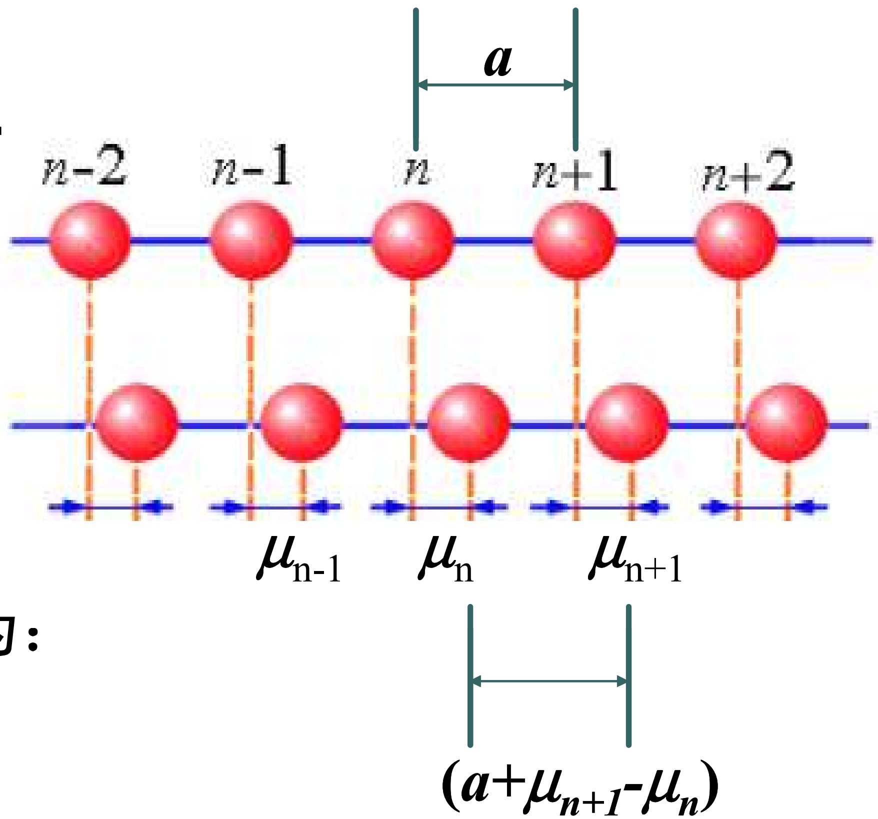
注意分析对n个原子的受力情况，此处与黄先生书中不同

相邻原子间的作用力为：

$$F=-\frac{\partial v}{\partial \delta}\approx-\beta\delta$$

第n-1对第n个原子的作用力为：

$$F_{n,n-1}=-\beta\left(\mu_n-\mu_{n-1}\right)$$



第n+1对第n个原子的作用力为：

$$F_{n,n+1}=-\beta\left(\mu_n-\mu_{n+1}\right)$$

一维单原子链的振动

$$F_{n,n-1} = -\beta\left(\mu_n - \mu_{n-1}\right) \quad F_{n,n+1} = -\beta\left(\mu_n - \mu_{n+1}\right)$$

第n个原子所受的总作用力为：

$$F_n = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$$

原子的质量为***m***，则运动方程为：

$$m\ddot{u}_n = \beta\left(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n\right)$$

相邻原子间的耦合运动方程——线性齐次方程组

一维单原子链的振动

简正坐标的基本思想：
通过线性变换得到
N个独立振动方程

原子的质量为*m*，则运动方程为：

$$m\ddot{\mu}_n = \beta\left(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n\right)$$

如何求解不要求

联立所有原子得到简谐振动解： $\mu_n = Ae^{i(\omega t - qX_n)}$

μ_n的实部或虚部
对应实际的振动

式中 $X_n = na$ 是第n个原子的平衡位置

将简谐解带入运动方程：

$$m(i\omega)^2 Ae^{i(\omega t - qX_n)} = \beta Ae^{i(\omega t - qna)}(e^{-iqa} + e^{iqa} - 2)$$

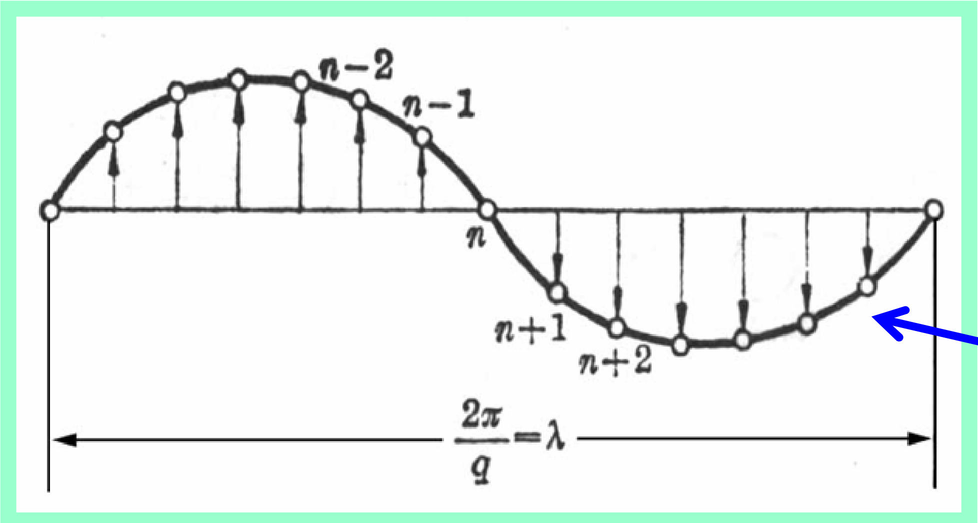
$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m}(1 - \cos aq) = \frac{4\beta}{m}\sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$$

一维单原子链的振动

第n个原子偏离平衡位置的解： $\mu_n = Ae^{i(\omega t - qna)}$

色散关系 $\omega^2 = \dfrac{2\beta}{m}(1-\cos aq) = \dfrac{4\beta}{m}\sin^2\left(\dfrac{aq}{2}\right)$

所有原子都以相同的频率ω 和相同的振幅A振动，不同原子之间有相位差，相邻原子之间的相位差为aq, 并且当原子间距为$2\pi/q$的整数倍时，两原子的振动位移相同



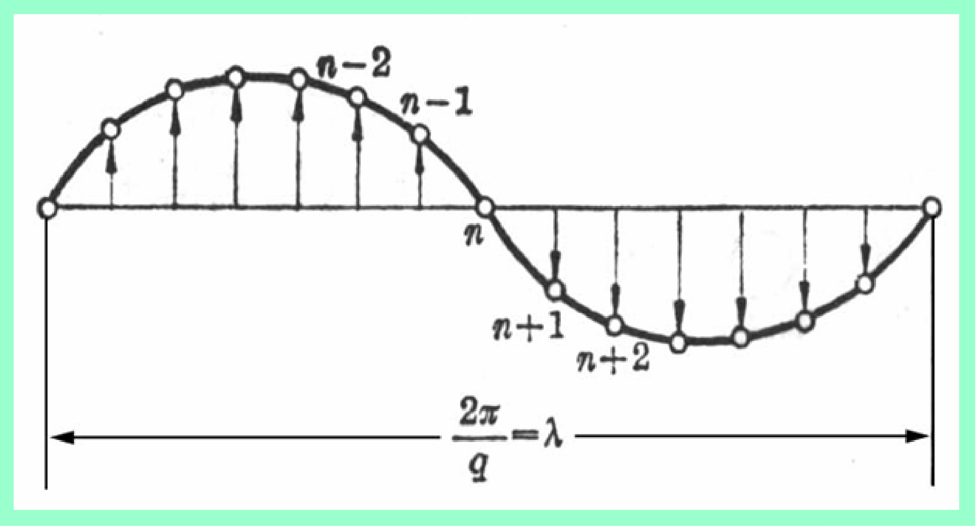
格波

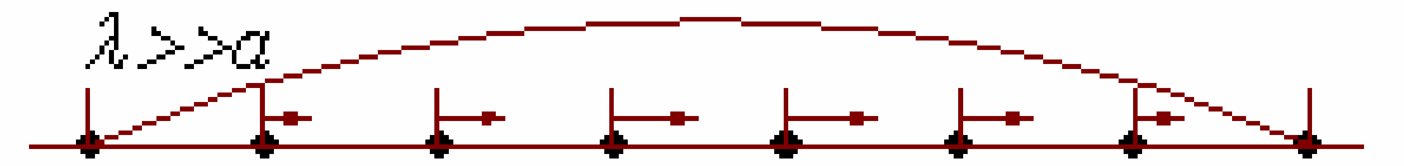
一维单原子链的振动——格波

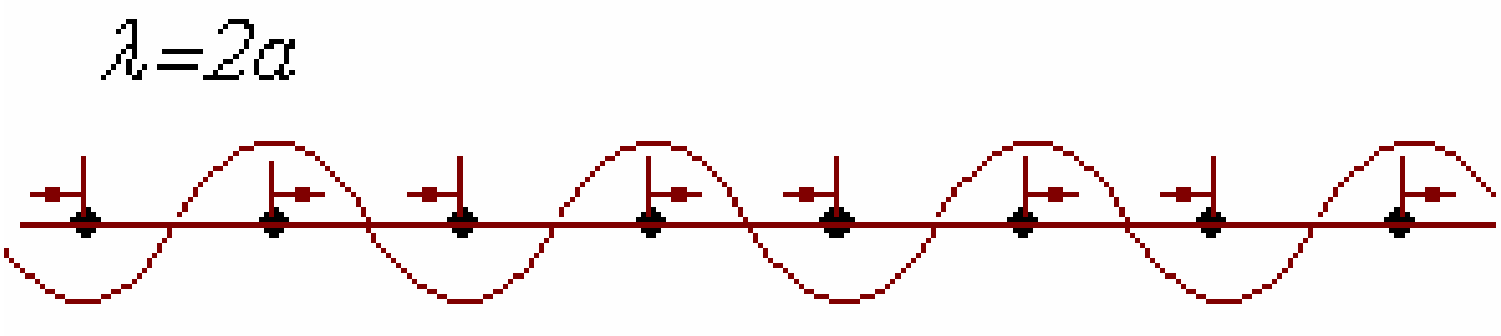
格波: 原子在平衡位置附近的振动以波的形式在晶体中传播

格波的波长：

$$\lambda = \frac{2\pi}{q}$$



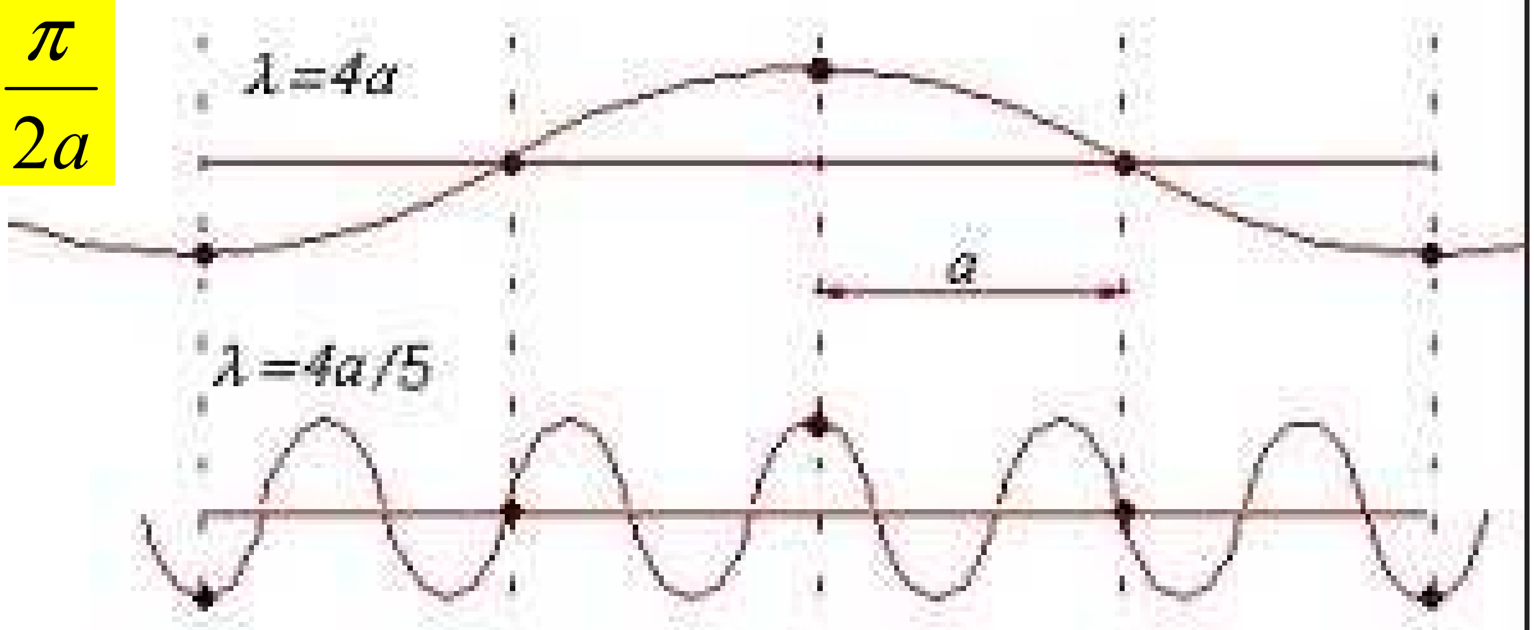




格波波矢的取值——第一布里渊区

两个相邻原子的位移之比 $\dfrac{\mu_n}{\mu_{n-1}} = \dfrac{Ae^{i(\omega t - qna)}}{Ae^{i(\omega t - q(n-1)a)}} = e^{-iqa}$

$q = \dfrac{\pi}{2a}$



两者描述的原子振动相同 $q = \dfrac{\pi}{2a} + \dfrac{2\pi}{a} = \dfrac{5\pi}{2a}$

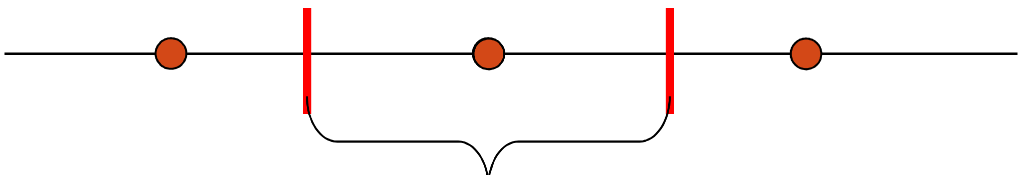
与布洛赫波有什么区别？

格波波矢的取值——第一布里渊区

两个相邻原子的位移之比 $$\frac{\mu_n}{\mu_{n-1}} = \frac{Ae^{i(\omega t - qna)}}{Ae^{i(\omega t - q(n-1)a)}} = e^{-iqa}$$

- 在-π到π的qa涵盖了指数函数所有独立的值
- 独立q值的区间为 $$-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$$

这个区间为线晶格的第一布里渊区



第一布里渊区

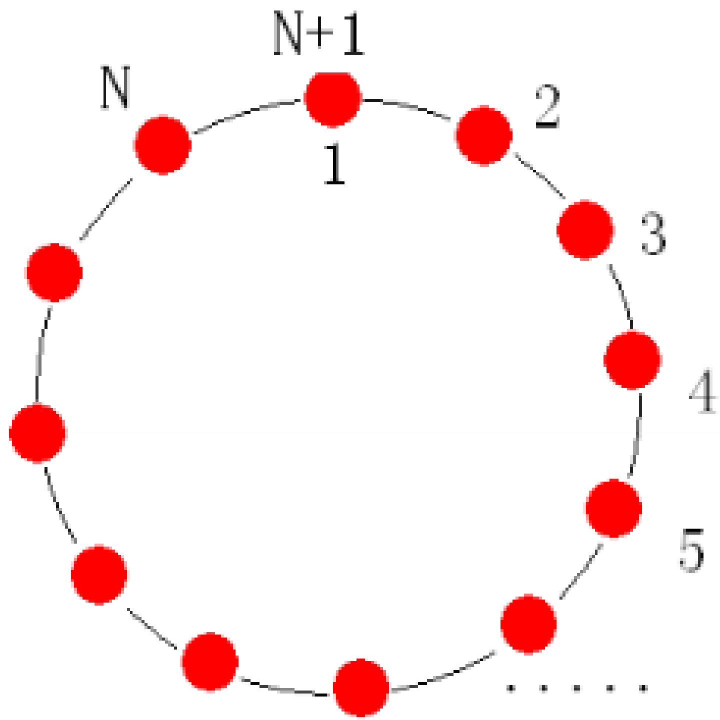
周期性边界条件（波恩-卡门条件）

前面讨论的运动方程只适用于无穷长的原子链

对于有限长度的一维原子链，边界原子的运动方程不一样，方程组变得复杂，原来的解不能适用！

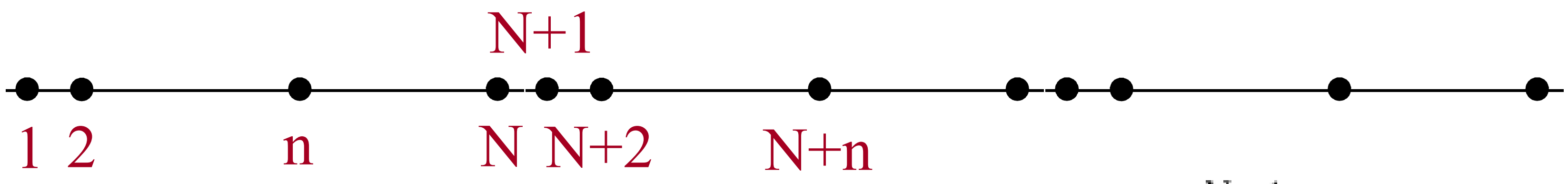
首尾相连的环状链模型

忽略了边界的影响，
对于大量原子的情况
是一种很好的近似



周期性边界条件（波恩-卡门条件）

设晶体中原子总数为N，晶体链长为Na，所谓周期性边界条件就是将一有限长度的晶体链看成无限长晶体链的一个重复单元，即：

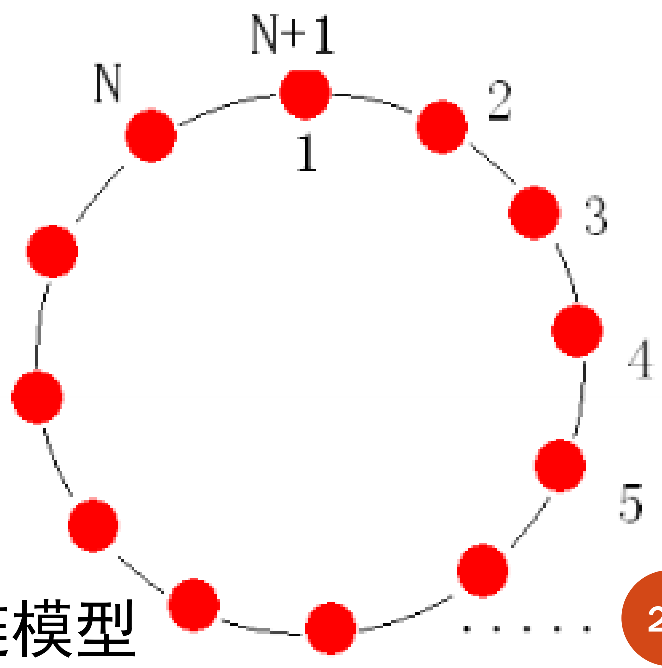


$$\mu_{N+n}=\mu_n$$

$$Ae^{i[\omega t-(N+n)aq]}=Ae^{i(\omega t-naq)}$$

$$e^{-iNaq}=1$$

$$\therefore q=\frac{2\pi}{Na}\cdot h \quad (h=\text{整数})$$



首尾相连的
波恩-卡门环状链模型

格波波矢的取值

引入周期性边界条件后，波数q不能任意取值，只能取分立的值

在q轴上，相邻两个q的取值相距 $\dfrac{2\pi}{Na}$

即在q轴上，每一个q的取值所占的空间为 $\dfrac{2\pi}{Na}$

所以，q的分布密度为：$\rho(q)=\dfrac{Na}{2\pi}=\dfrac{L}{2\pi}$

$\boldsymbol{L=Na}$ 为晶体链的长度

简约区中波数q的取值总数$=\rho(q)\cdot 2\pi/a=(Na/2\pi)\cdot 2\pi/a$

$=N=$晶体链的原胞数

一维晶格振动格波的总数$=N$

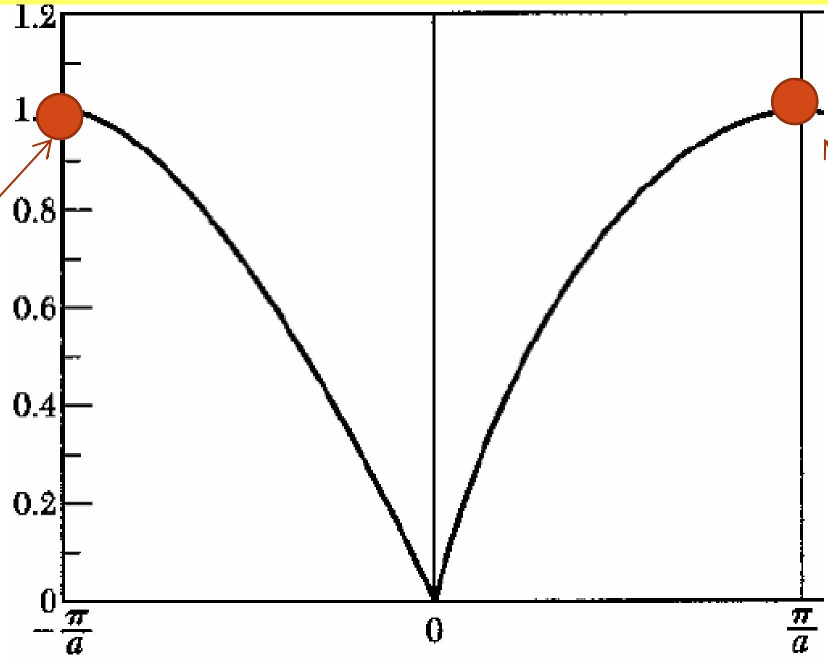
格波的频率

色散关系 $$\omega^2=\frac{2\beta}{m}(1-\cos aq)=\frac{4\beta}{m}\sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$$

$$\omega=2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\left(\frac{aq}{2}\right)\right|$$ 频率ω取正值

频率ω最大值为$2(\beta/m)^{1/2}$ ——截止频率

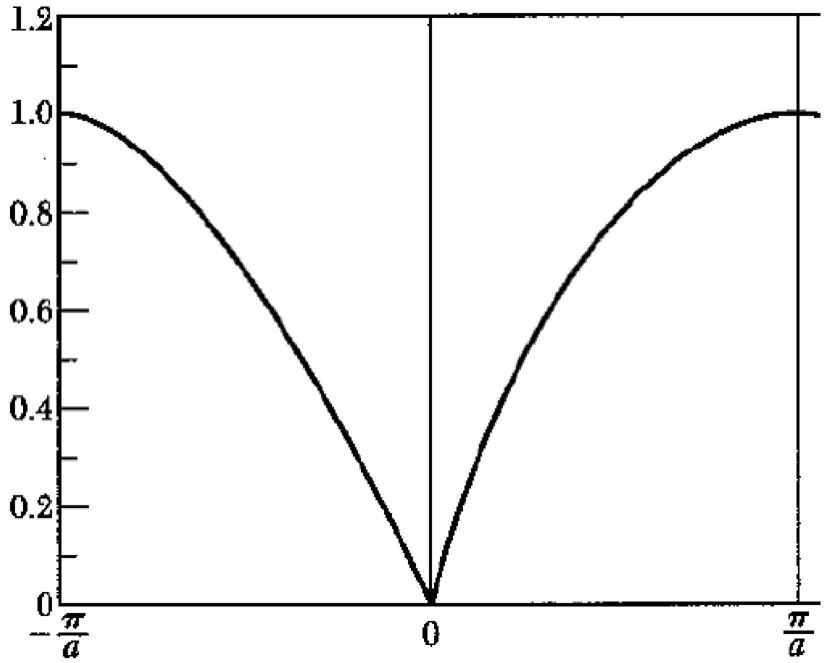
$q=-\dfrac{\pi}{a}$



$q=\dfrac{\pi}{a}$

格波的波速

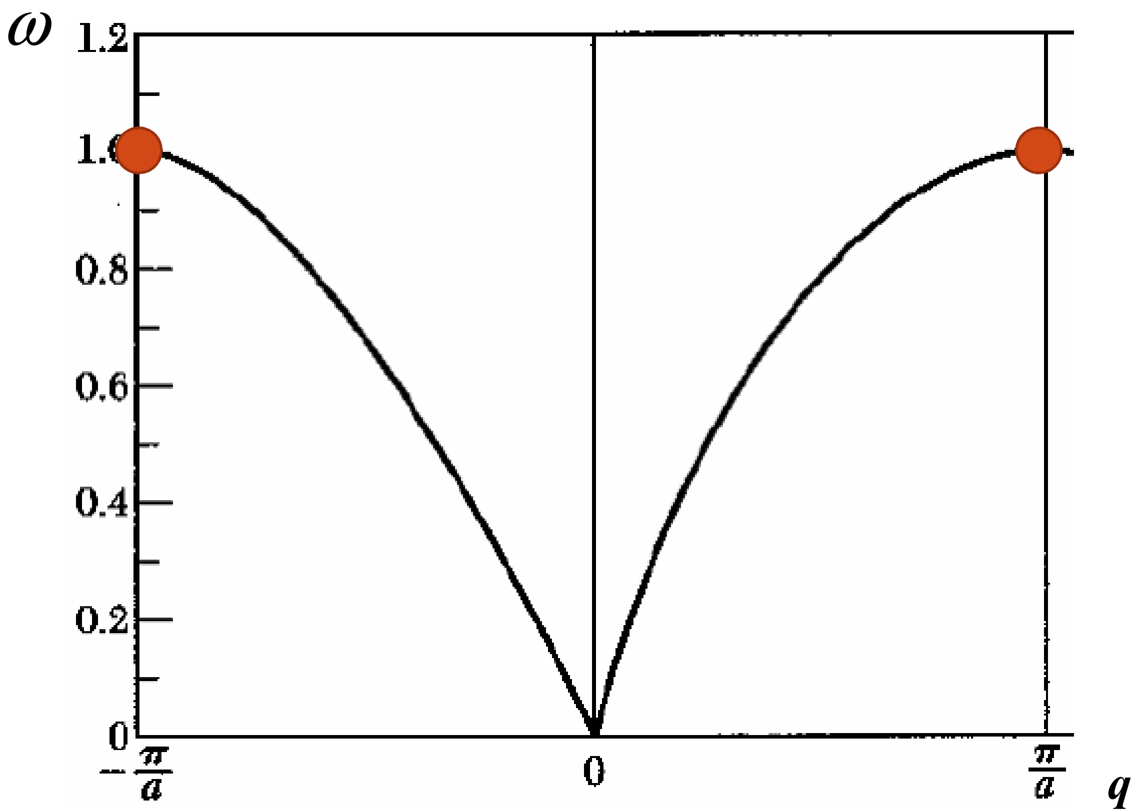
- 波速
  - 相速度 $\upsilon_p = \lambda f = \omega / q$
  - 群速度 $\upsilon_g = d\omega / dq$



相速度：是单色波单位时间内一定的振动位相所传播的距离

群速度：是平均频率为ω，平均波矢为 q 的波包的传播速度，它是合成波能量和动量的传播速度

格波在布里渊区边界的波速



第一布里渊区的边界

$$q = \pm\frac{\pi}{a}$$

群速度：

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial q} = 0$$

布拉格反射形成驻波，群速度为零

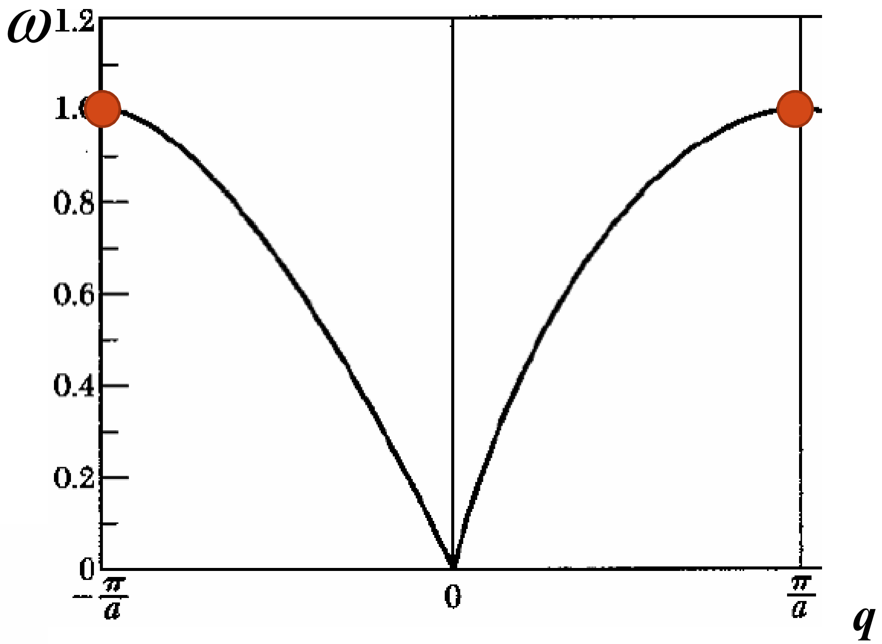
格波在布里渊区边界的波速

q接近布里渊区边界($\pm\pi/a$)时， 频率ω趋向于常数

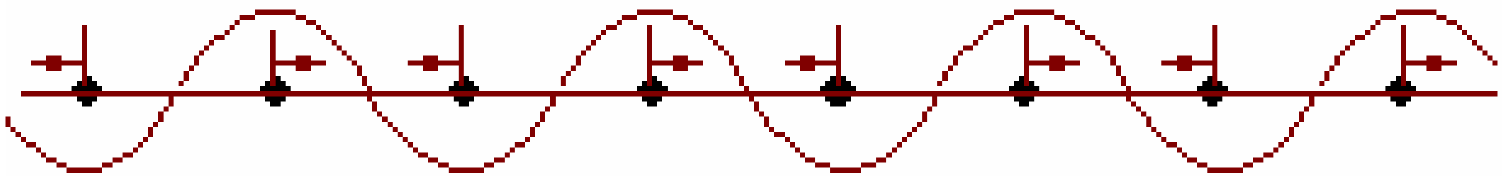
$$\omega \rightarrow 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$$

截止频率

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} = 0$$



$$\lambda = 2a, qa = \pi$$



相邻原子相位相差π(振动相反),

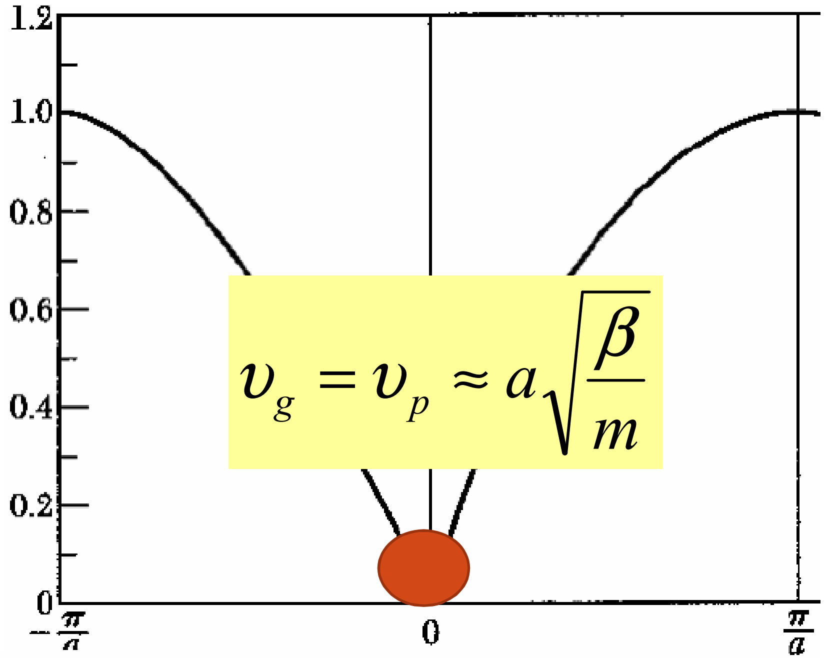
类似于布拉格反射形成驻波，群速度等于0

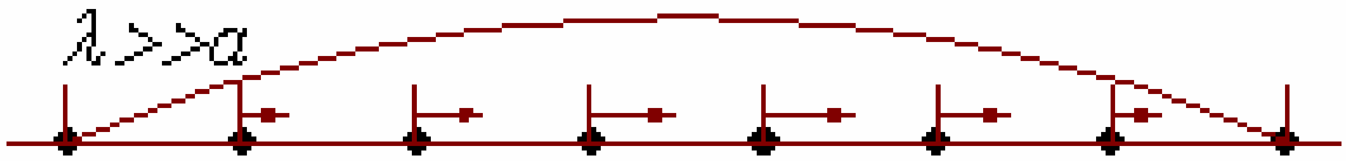
格波波速的长波极限

$\lambda>>a$时(长波极限)，$q\rightarrow 0$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\left(\frac{aq}{2}\right)\right|$$

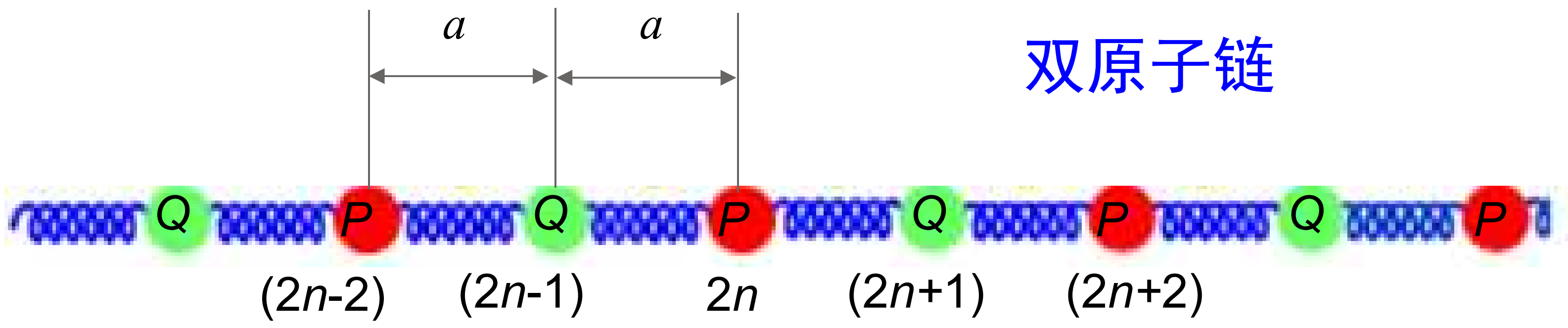
$$\approx 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\frac{1}{2}aq\right| = a\sqrt{\frac{\beta}{m}}q$$





类似于连续介质弹性波相速度等于群速度
长波极限时可将晶格视为连续介质

一维双原子链的结构



一般情况下双原子链的构成：

- 两个原子不同
- 间距不同
- 恢复力常数不同

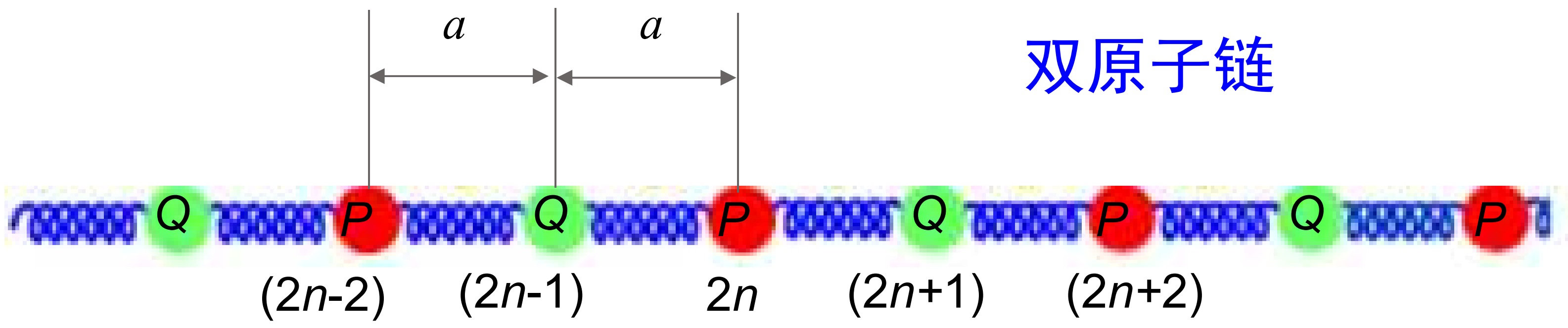
*P*原子

*Q*原子

基元含有多个原子，是电子材料晶体的常见情况

对于基元含有多个原子，晶格振动将出现新的特征

一维双原子链的结构



与单原子链的区别：原胞含2个不同原子

这里考虑最简单的情况：仅考虑质量不同
其余条件不变

*P*原子质量：***m***
*Q*原子质量：***M***

类比写出运动方程

*P*原子： 临近2个*Q*原子
*Q*原子：临近2个*P*原子

$$m\ddot{\mu}_{2n}=\beta(\mu_{2n+1}+\mu_{2n-1}-2\mu_{2n})$$

$$M\ddot{\mu}_{2n+1}=\beta(\mu_{2n+2}+\mu_{2n}-2\mu_{2n+1})$$

双原子链晶格的色散关系

格波试解（对应P和Q）

$$\mu_{2n} = Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$$
$$\mu_{2n+1} = Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}$$

运动方程

$$m\ddot{\mu}_{2n} = \beta(\mu_{2n+1} + \mu_{2n-1} - 2\mu_{2n})$$
$$M\ddot{\mu}_{2n+1} = \beta(\mu_{2n+2} + \mu_{2n} - 2\mu_{2n+1})$$

化简为A、B的齐次方程：

$$\begin{cases} -m\omega^2 A = \beta\left(e^{-iaq} + e^{iaq}\right)B - 2\beta A \\ -M\omega^2 B = \beta\left(e^{-iaq} + e^{iaq}\right)A - 2\beta B \end{cases}$$

$$\begin{cases} (m\omega^2 - 2\beta)A + 2\beta\cos aqB = 0 \\ 2\beta\cos aqA + (M\omega^2 - 2\beta)B = 0 \end{cases}$$

双原子链晶格的色散关系

- 系数行列式=0

$$\begin{vmatrix} m\omega^2 - 2\beta & 2\beta\cos aq \\ 2\beta\cos aq & M\omega^2 - 2\beta \end{vmatrix}$$

$$= mM\omega^4 - 2\beta(m+M)\omega^2 + 4\beta^2\sin^2 aq = 0$$

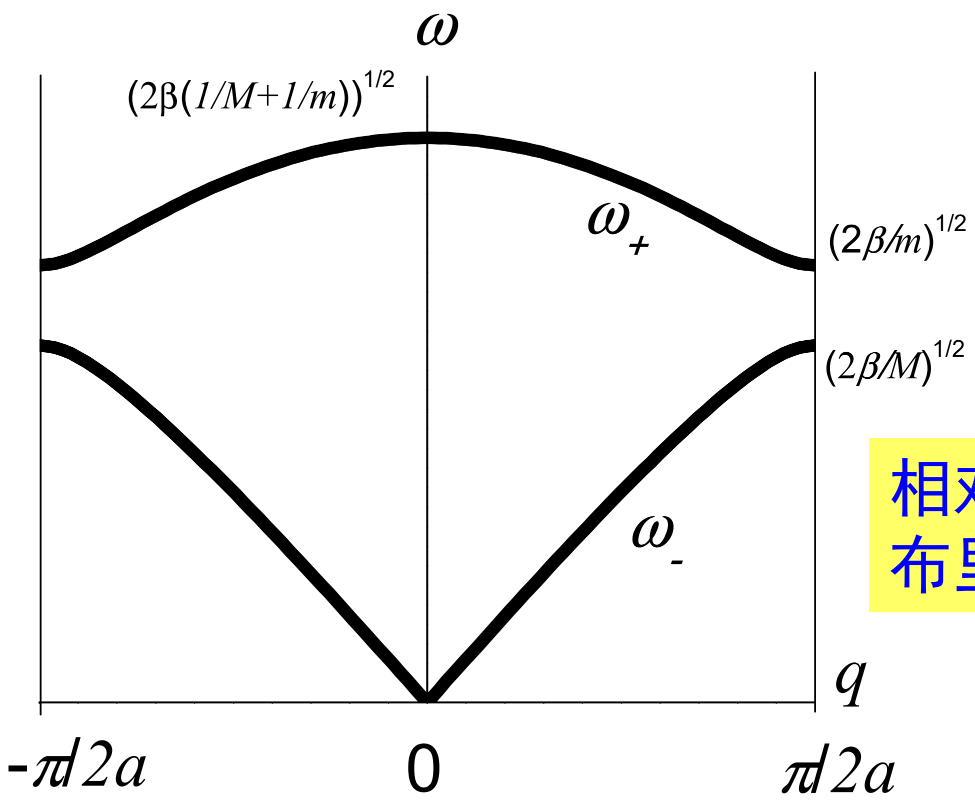
得到两个频率解：

$$\omega^2 \left\langle \begin{matrix} \omega_+^2 \\ \omega_-^2 \end{matrix} \right. = \beta\frac{m+M}{mM}\left\{1 \pm \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq\right]^{1/2}\right\}$$

频率分别为ω_+和ω_-的两组解

双原子链晶格的色散关系

$$\omega^2 \left\langle \begin{matrix} \omega_+^2 \\ \omega_-^2 \end{matrix} \right. = \beta \frac{m+M}{mM} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \right]^{1/2} \right\}$$



相对一维单原子链
布里渊区变小

m与M不同时的色散关系

双原子链中波矢q的取值

相邻原胞相位差$2aq$

- 波数q的取值范围：

$$-\frac{\pi}{2a} < q \leq \frac{\pi}{2a}$$

$$\mu_{2n} = Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$$
$$\mu_{2n+1} = Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}$$

原胞变大，倒格矢变小，布里渊区变小

周期性边界条件：

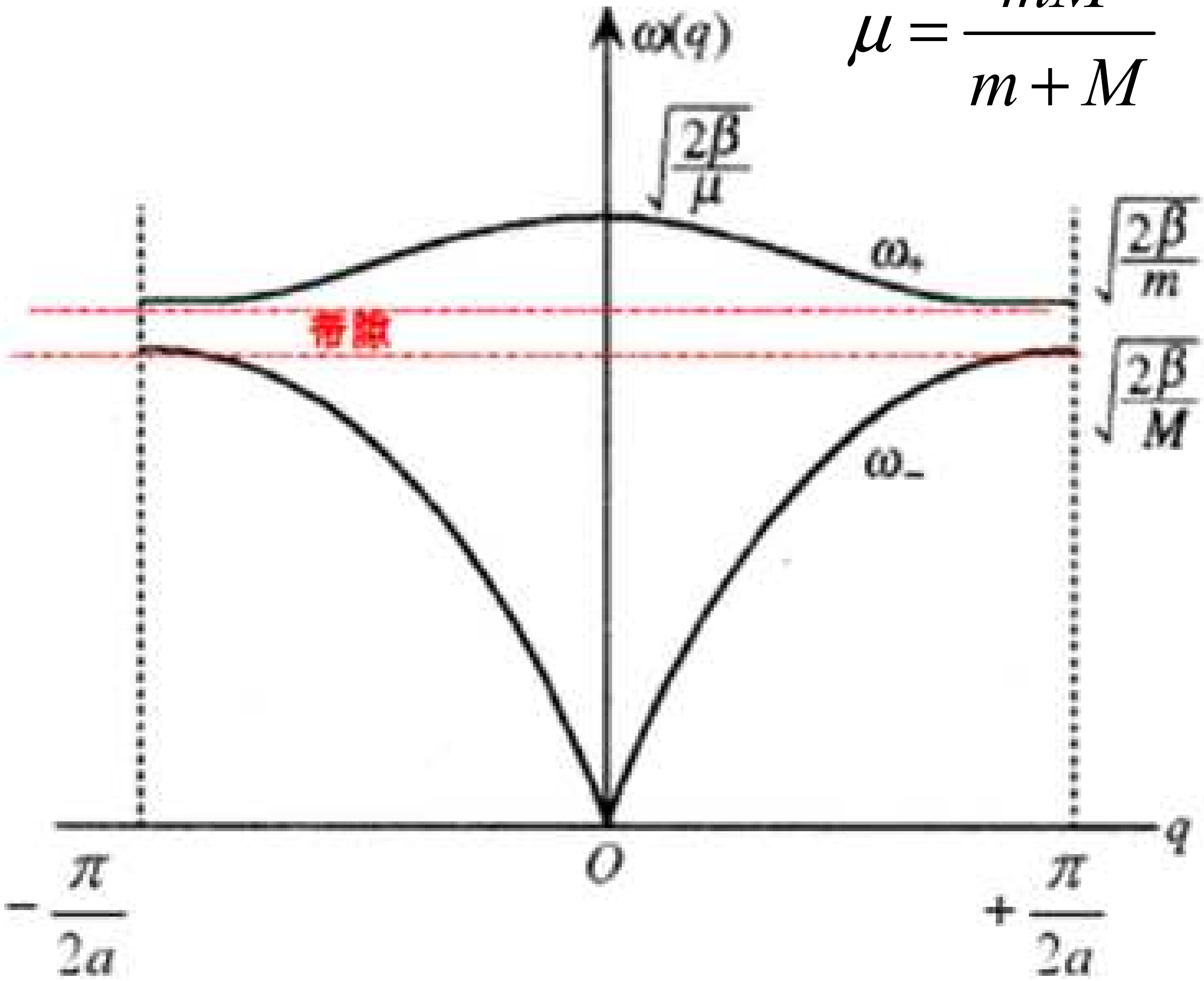
2N个原子：

$$N\cdot(2aq) = 2\pi h, h = [-N/2, +N/2] \qquad q = \frac{h\pi}{Na}$$

对于双原子链，有2N个原子，也有2N个格波

格波的带隙 q→π/2a

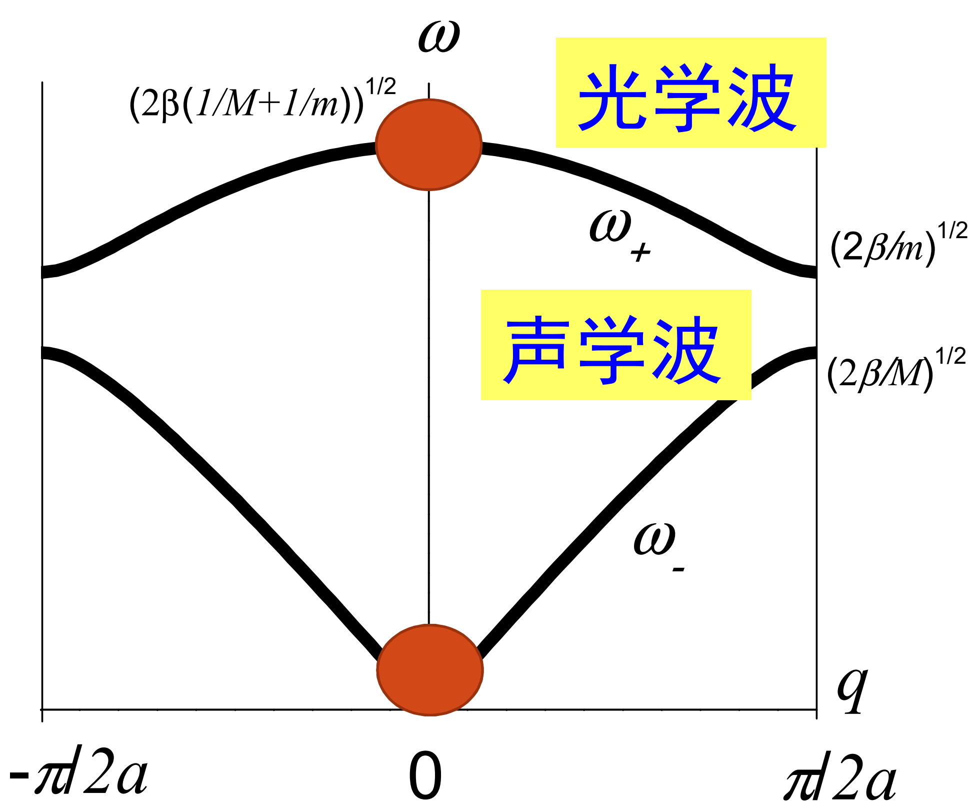
$$\mu = \frac{mM}{m+M}$$



长波极限——光学波与声学波

频率ω_+和ω_-：光学波、声学波

命名是基于它们在长波极限的性质（$q\rightarrow0$ ）



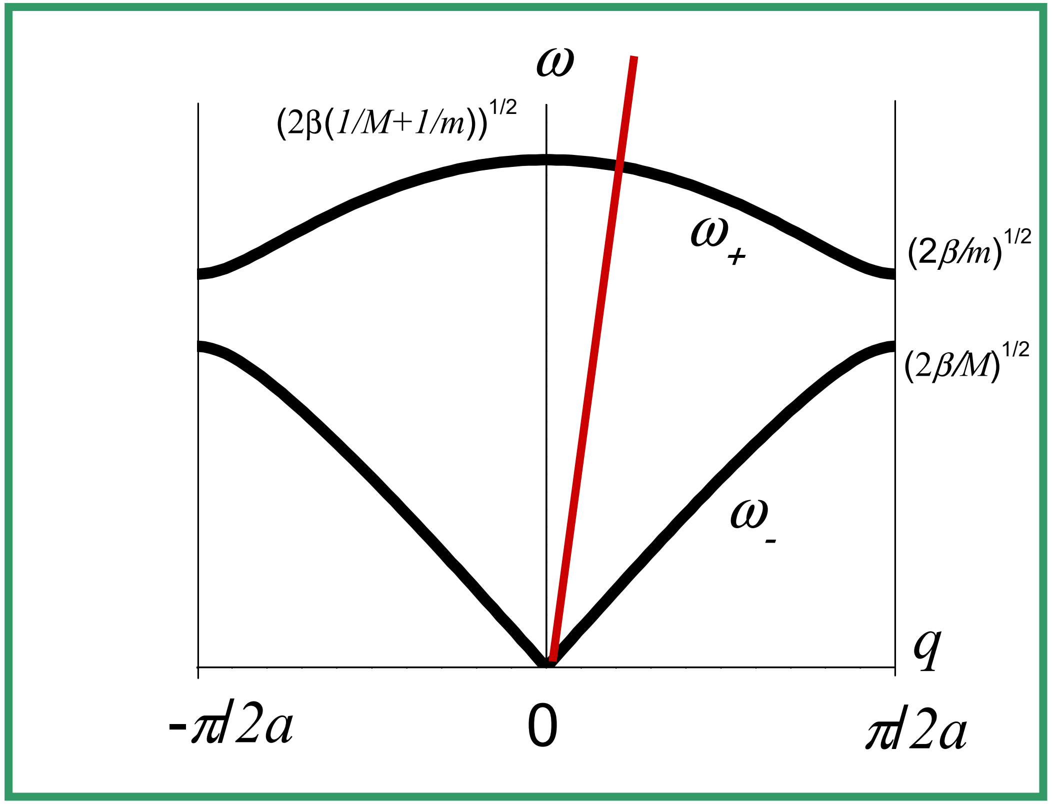
离子晶体中的光学波

不同离子之间的相对振动产生一定的电偶极矩，从而可以和电磁波相互作用

电磁波与波数相同的格波发生作用，在频 率相同时发生共振

光波： $\omega = c_0 q$

实际晶体的长光学波的频率对应于远红外的光波，离子晶体中光学波的共振能够引起对远红外光在 ω_+ 附近强烈吸收



在长波极限(q→0)的光学波

ω_+ 光学波色散关系

$$\omega_+^2 = \beta\frac{m+M}{mM}\left\{1+\left[1-\underline{\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq}\right]^{1/2}\right\}$$

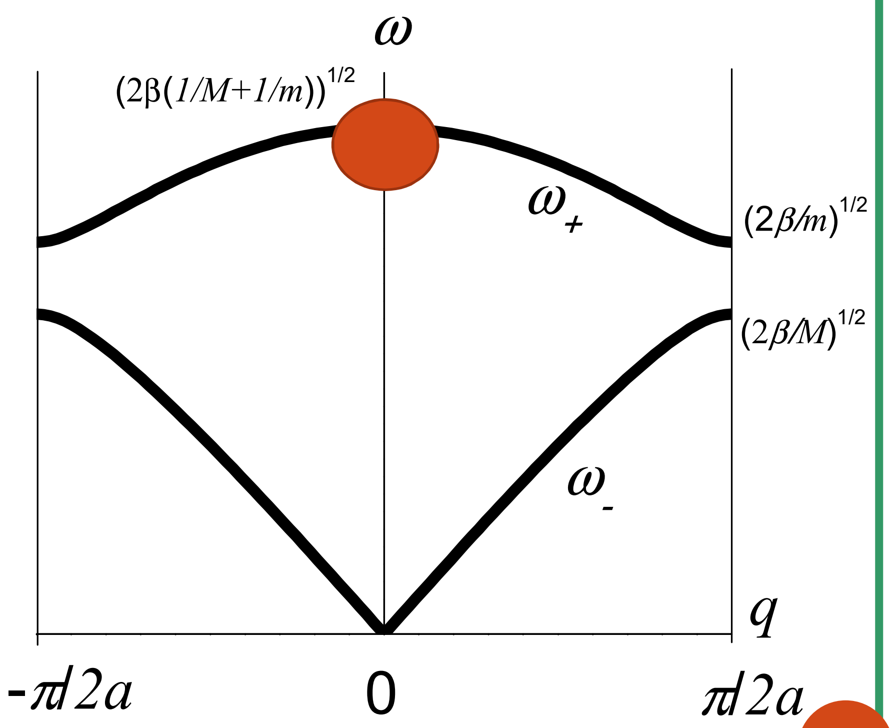
≈ 0

当$q\rightarrow 0$，长光学波

$$\omega_+^2 \rightarrow 2\beta\frac{m+M}{mM}$$

$$\omega_+ \rightarrow \sqrt{\frac{2\beta}{\left(\dfrac{mM}{m+M}\right)}}$$

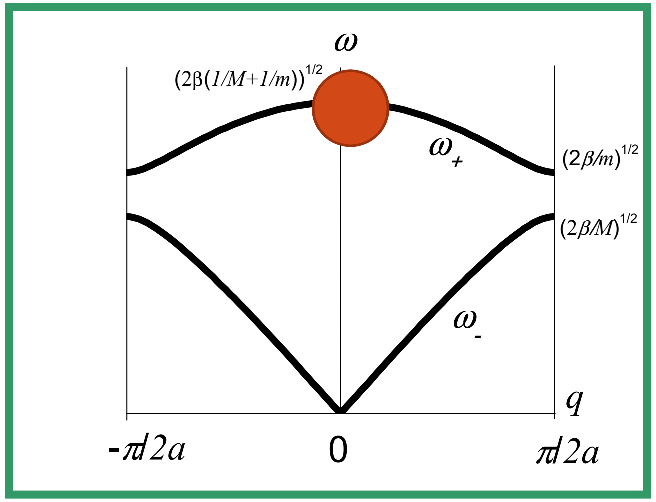
频率最高



在长波极限(q→0)的光学波

波速：群速度为0

$$\omega_+ \to \sqrt{\frac{2\beta}{\left(\frac{mM}{m+M}\right)}}$$



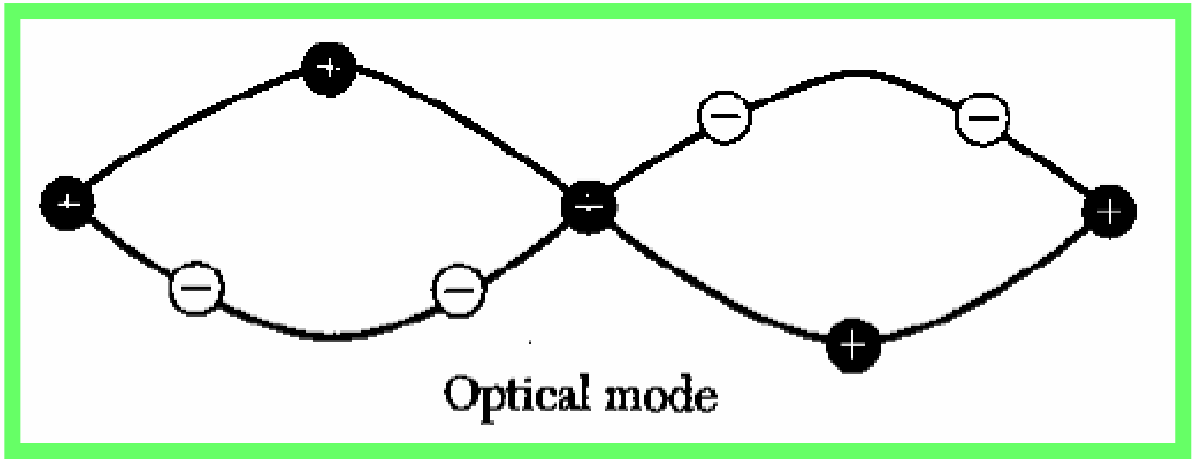
振幅比

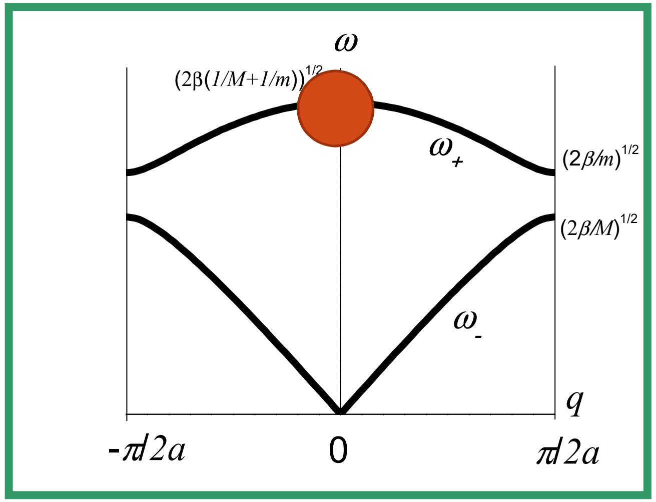
$$\left(\frac{B}{A}\right)_+ = -\frac{m\omega_+^2 - 2\beta}{2\beta\cos aq} = -\frac{m\frac{2\beta}{\left(\frac{mM}{m+M}\right)} - 2\beta}{2\beta} = -\frac{m}{M}$$

相邻原子振动相反，振幅反比于原子质量

在长波极限(q→0)的光学波

波速：群速度为0





$$\mu_{2n} = Ae^{i\left[\omega t-(2na)q\right]}$$

$q \rightarrow 0$时

（1）同种原子具有相同的位相，所以每一种原子（P或Q原子）形成的格子象一个刚体一样整体地振动

（2）两种原子的振动有完全相反的位相，P和Q两组格子的相对振动，振幅反比于原子质量，整个晶格的质心不变

$$\left(\frac{B}{A}\right)_{+} = -\frac{m}{M}$$

在长波极限(q→0)的声学波

- ω_- 支—声学波的色散关系

$$\omega_-^2 = \beta\frac{m+M}{mM}\left\{1-\left[1-\boxed{\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq}\right]^{1/2}\right\}$$

当$q\to 0$:

<<1

$$\omega_-^2 \approx \beta\frac{m+M}{mM}\cdot\frac{2mM}{(m+M)^2}(aq)^2 = \frac{2\beta}{m+M}(aq)^2$$

$$\omega_- \approx aq\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}} \xrightarrow{m=M} a\sqrt{\frac{\beta}{m}}q$$

$q\to 0$时：$\omega_-\to 0$

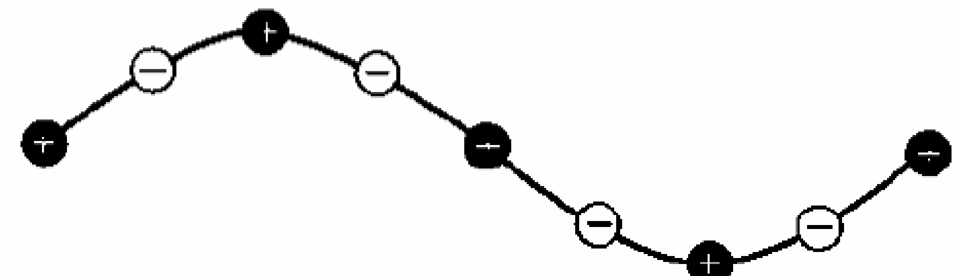
在长波极限(q→0)的声学波

$$\begin{cases}(m\omega^2-2\beta)A+2\beta\cos aqB=0\\ 2\beta\cos aqA+(M\omega^2-2\beta)B=0\end{cases}$$

$$\mu_{2n}=Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$$
$$\mu_{2n+1}=Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}$$

振幅比 $\left(\dfrac{B}{A}\right)_-=-\dfrac{m\omega_-^2-2\beta}{2\beta\cos aq}$

$q\to0$时： $\omega_-\to0$，$B/A\to1$，相位差$qa\to0$



相邻原子同步运动, 原胞中两种原子的运动是
完全一致的振幅和位相

在长波极限(q→0)的声学波

$q \to 0$ 频率 $\omega_- \approx aq\sqrt{\dfrac{2\beta}{m+M}} \to 0$

长声学波频率正比于波数，类似于连续介质的弹性波

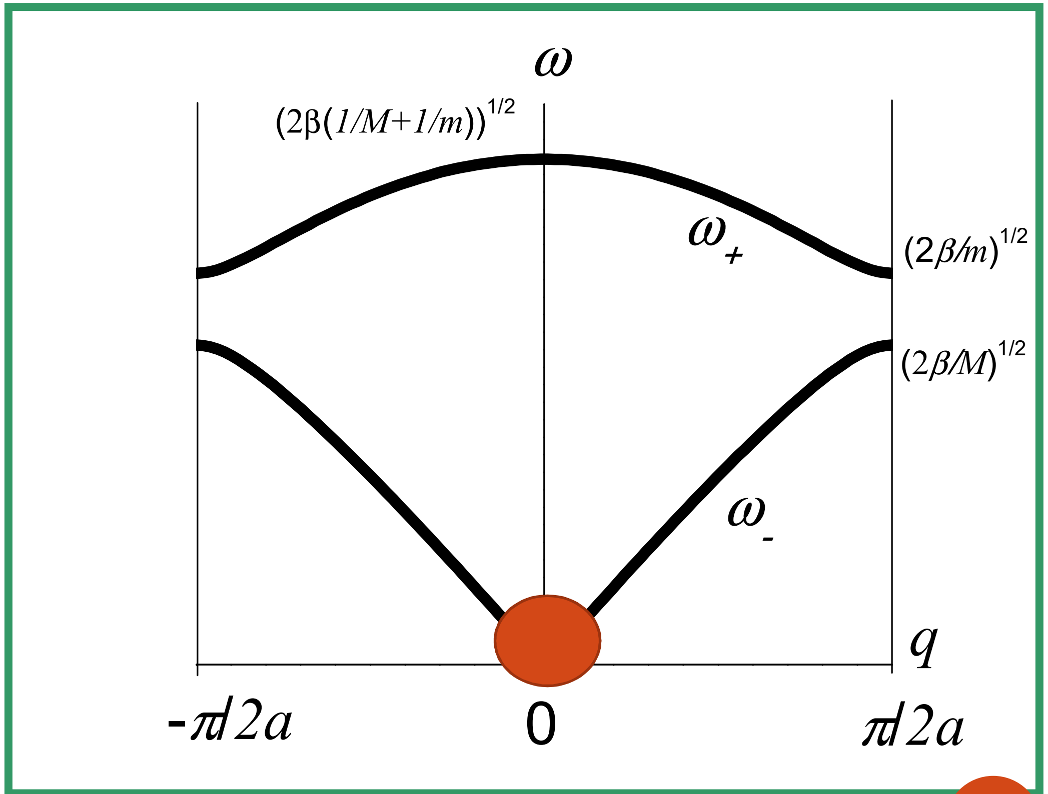
振幅比

$$\left(\frac{B}{A}\right)_- = -\frac{m\omega_-^2 - 2\beta}{2\beta\cos aq} \to 1$$

相位差：$qa \to 0$

可将晶格视为连续介质

声学波



声学波与光学波的区别

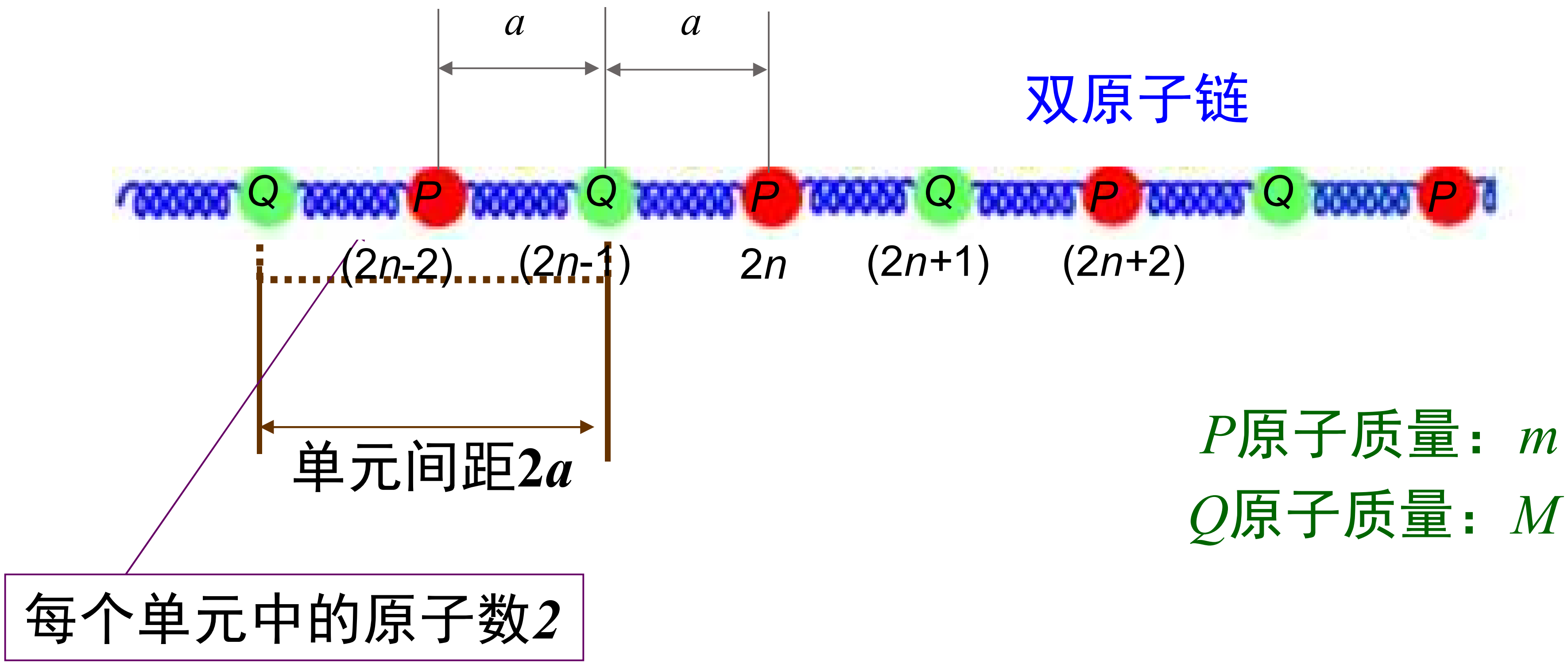
$q \to 0$时：

长光学支格波的特征是每个原胞内的不同原子做相对振动，振动频率较高，它包含了晶格振动频率最高的振动模式

长声学支格波的特征是原胞做整体运动，振动频率较低，它包含了晶格振动频率最低的振动模式，波速是一常数

任何晶体都存在声学支格波，但简单晶格（非复式格子）晶体不存在光学支格波

一维双原子链的结构



P原子质量：m

Q原子质量：M

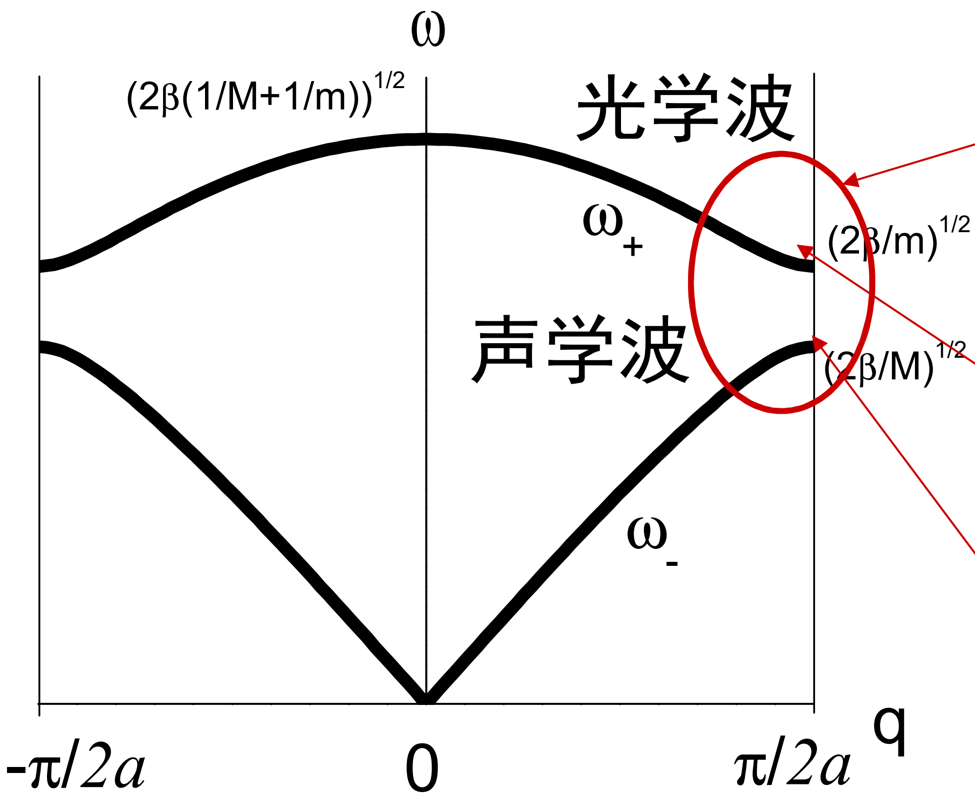
格波的色散关系（双原子链晶格）

$$\omega^2 \left\langle \begin{matrix} \omega_+^2 \\ \omega_-^2 \end{matrix} \right. = \beta \frac{m+M}{mM} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \right]^{1/2} \right\}$$

发生布拉格反射，形成驻波，群速度为零

$$q = \frac{\pi}{a} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\lambda = 2a$$



单元之间有π相差

$$\omega = \sqrt{\frac{2\beta}{m}}$$

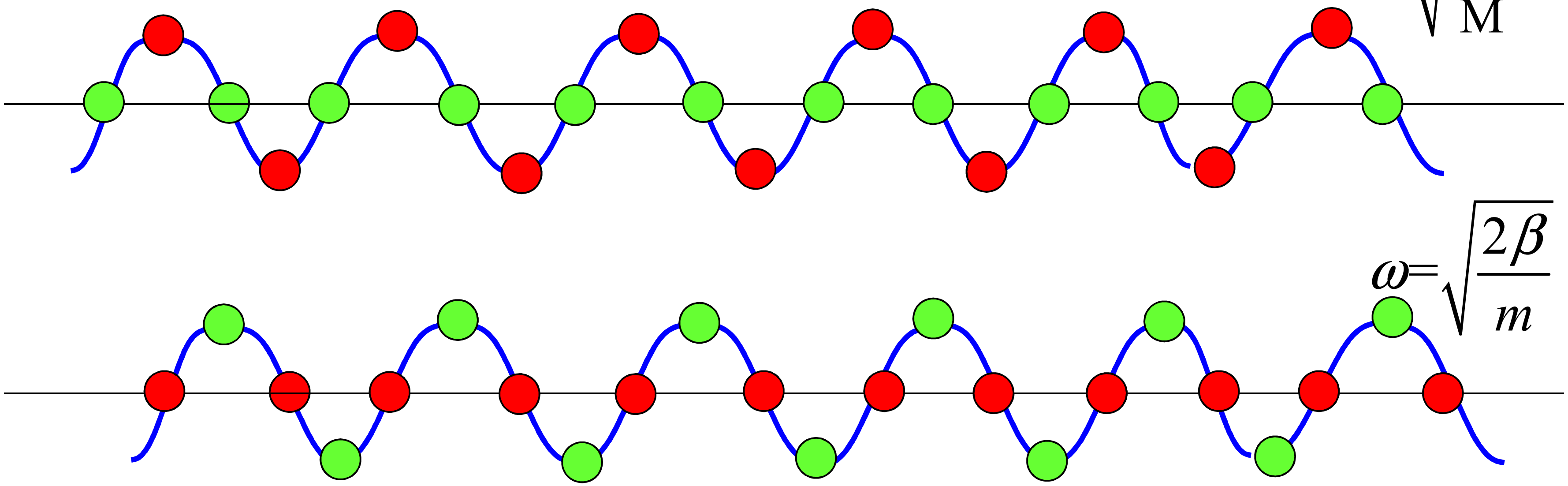
$$\omega = \sqrt{\frac{2\beta}{\mathrm{M}}}$$

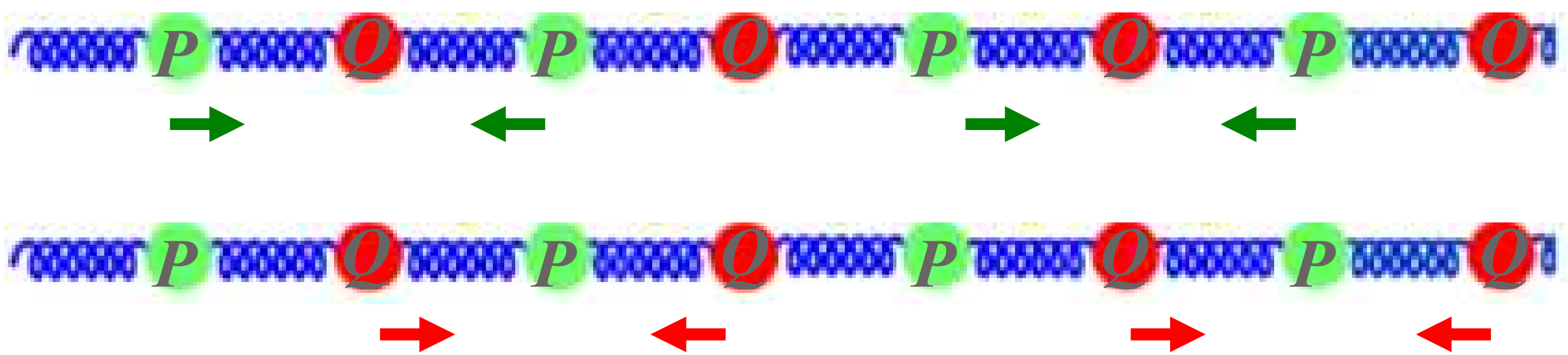
格波带隙的物理图景

一种原子的格波发生布拉格反射，形成驻波

$$\omega=\sqrt{\frac{2\beta}{M}}$$

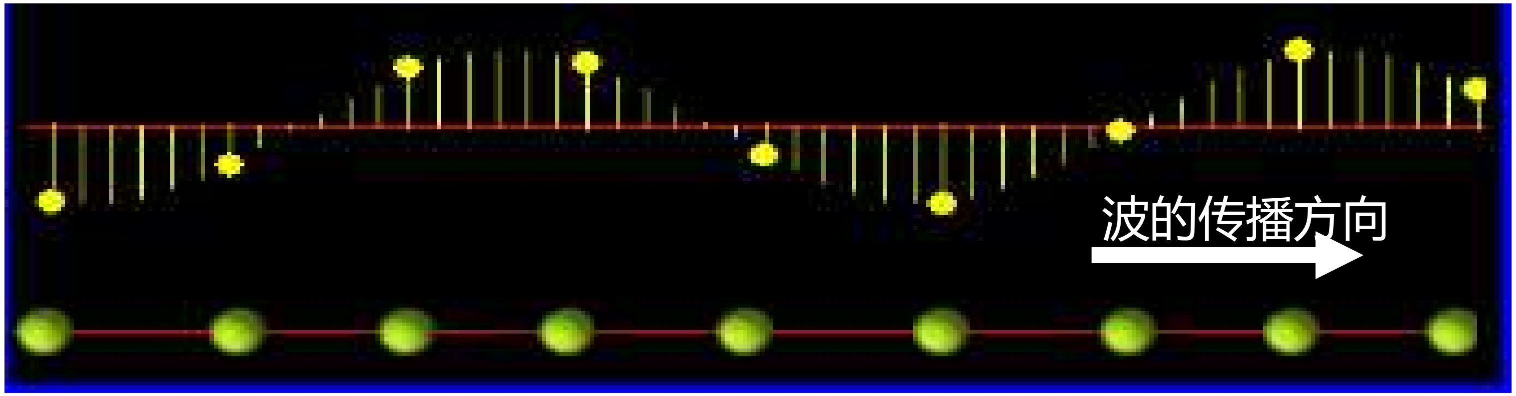
$$\omega=\sqrt{\frac{2\beta}{m}}$$



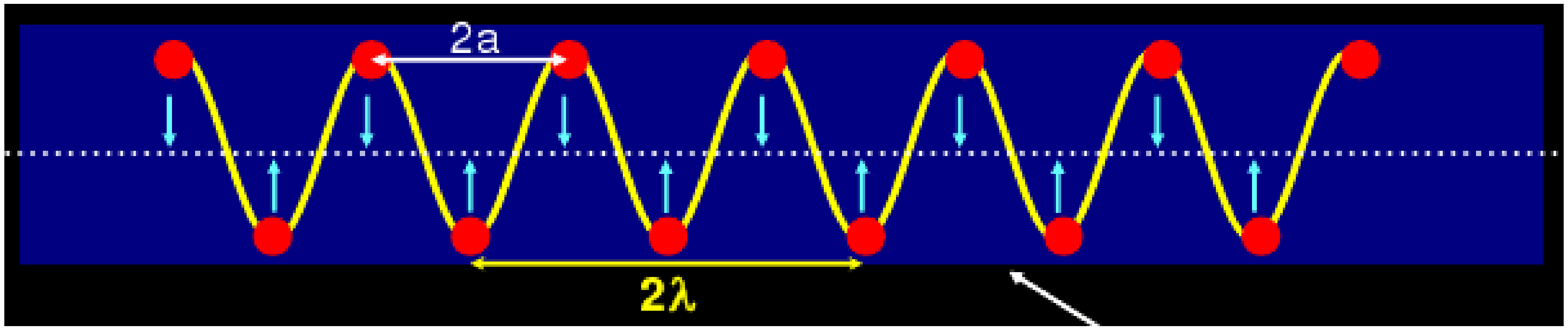


三维晶体中的格波

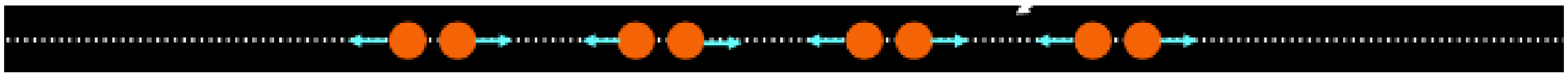
沿某一晶向的传播的格波



每个振动存在3种模式: 2个横向极化（偏振）

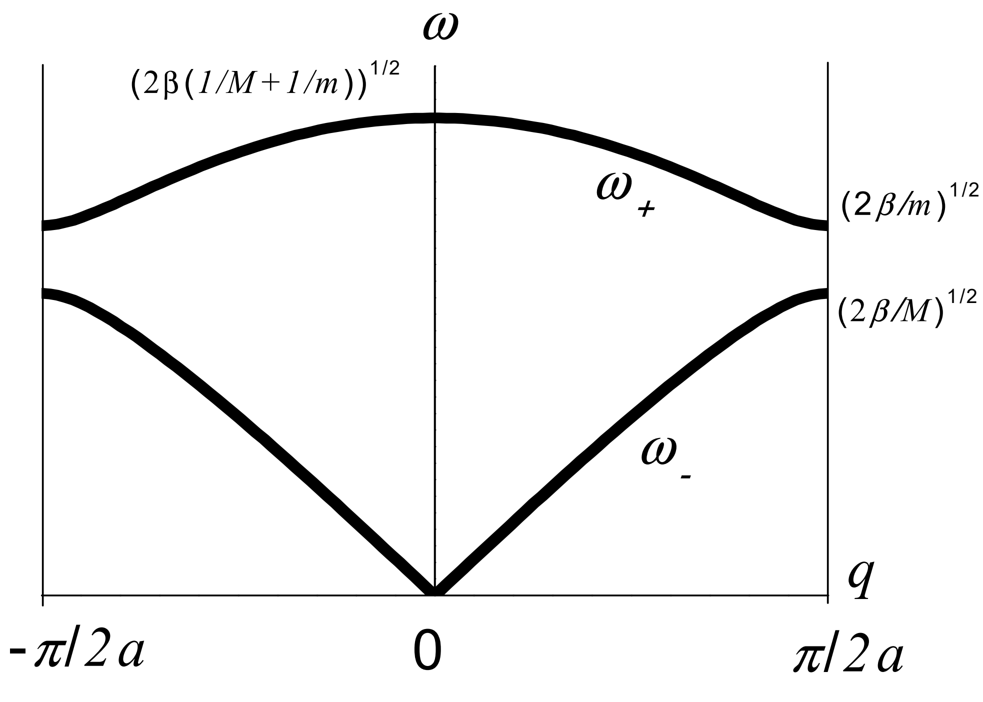


1个纵向极化（偏振）

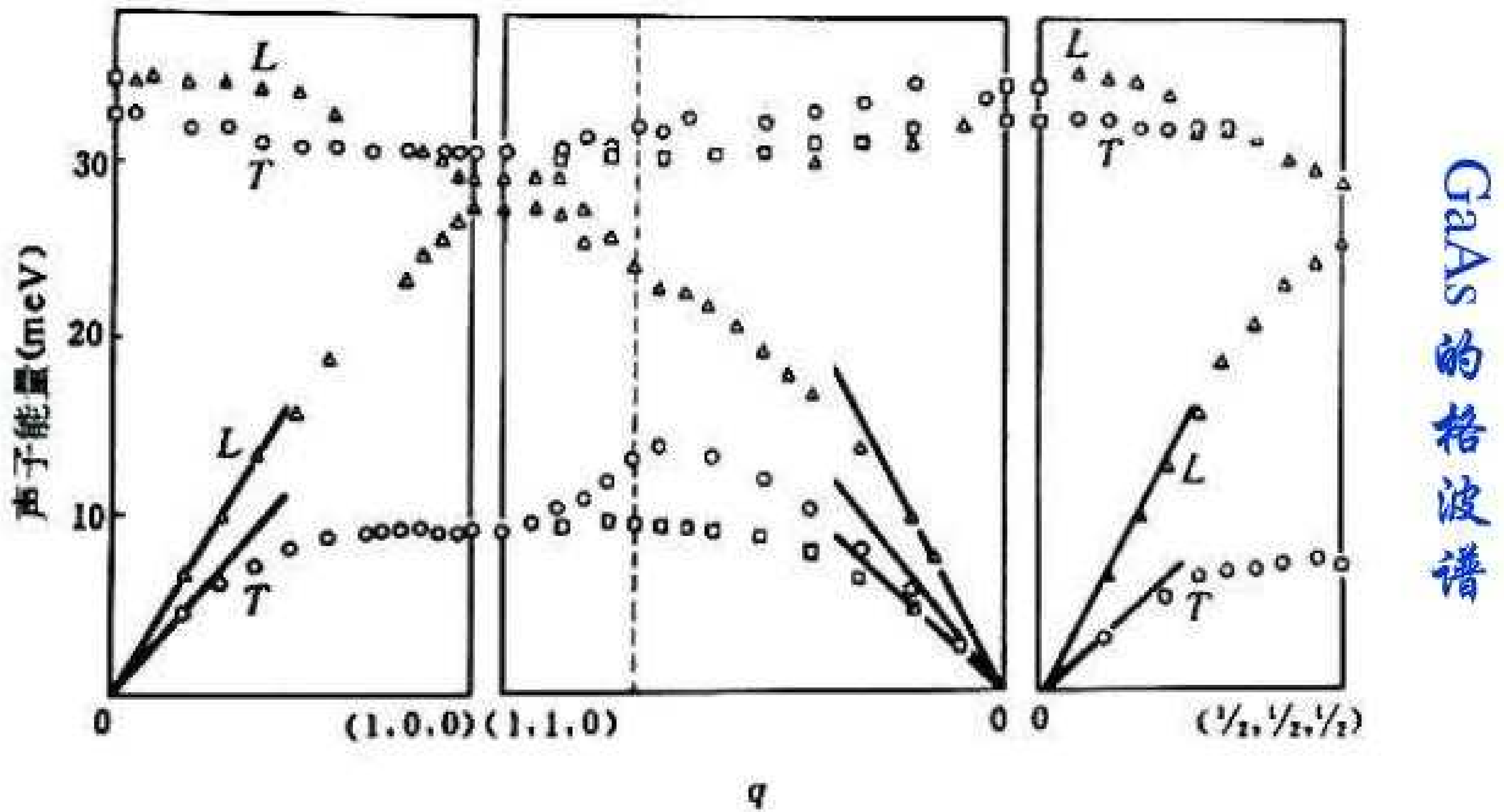


三维晶格的格波

若晶体有N个原胞，每个原胞含n个原子，则晶体的自由度为$3*n*N$。格波数目（即晶体振动模式的数目）等于晶体自由度数，所以三维晶体的格波波矢数目等于N，振动模式数目等于$3nN$；$3nN$个格波又可分为$3n$支，每支含N个具有相同的色散关系的格波，$3n$支中有3支是声学波，其余$3(n-1)$支是光学波

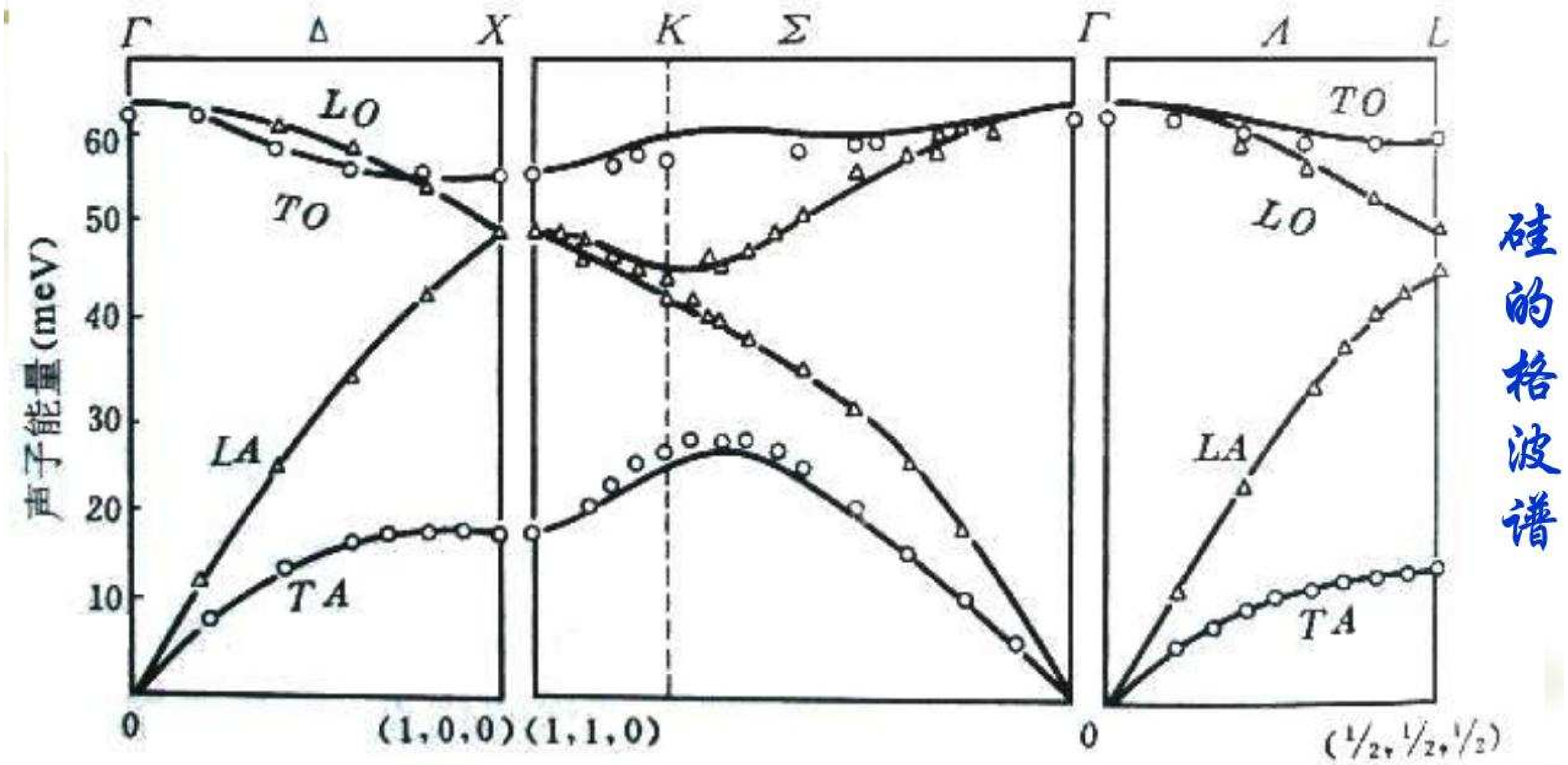


GaAs的格波谱



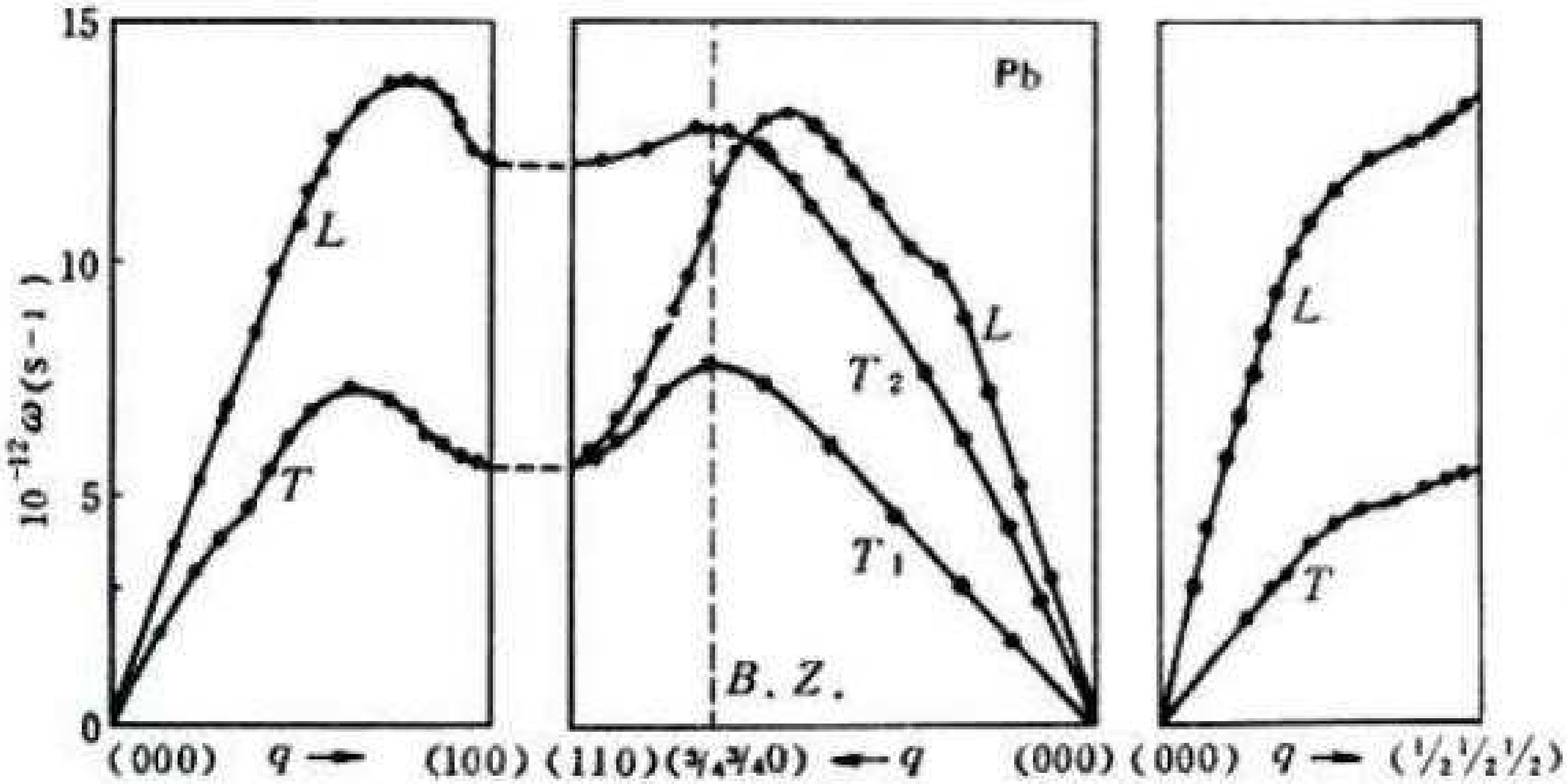
TO：横光学波，LO： 纵光学波，TA：横声学波，LA： 纵声学波
其中：TO与TA为二重简并的，实际代表了两支波

硅的格波谱



硅的晶格中虽然只有硅一种原子，但是由于是复式晶格结构，
等同于有两种原子，因此也有声学波和光学波

金属铅（Pb）的格波谱



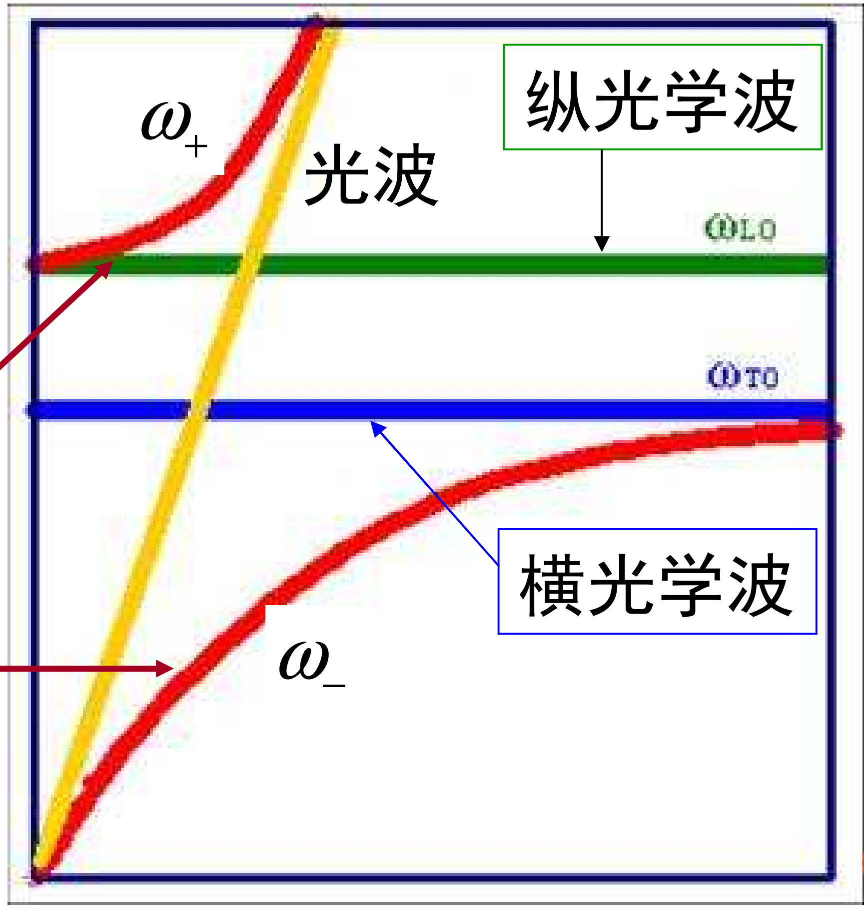
Pb的格波谱

金属铅(Pb)属于面心立方的简单晶格结构，没有光学波只有三支声学波（注：不同方向上有简并）

极化激元（Polaritons）

光照射离子晶体时将激发横向的电磁场，从而对离子晶体中光频支格波振动产生影响，其结果将使光子与光学模声子的色散关系曲线都发生很大的改变，形成光子–光学模声子的耦合模式

不仅格波有这样的模式，等离子振荡、激子、自旋波也都有类似的现象，统称为极化激元



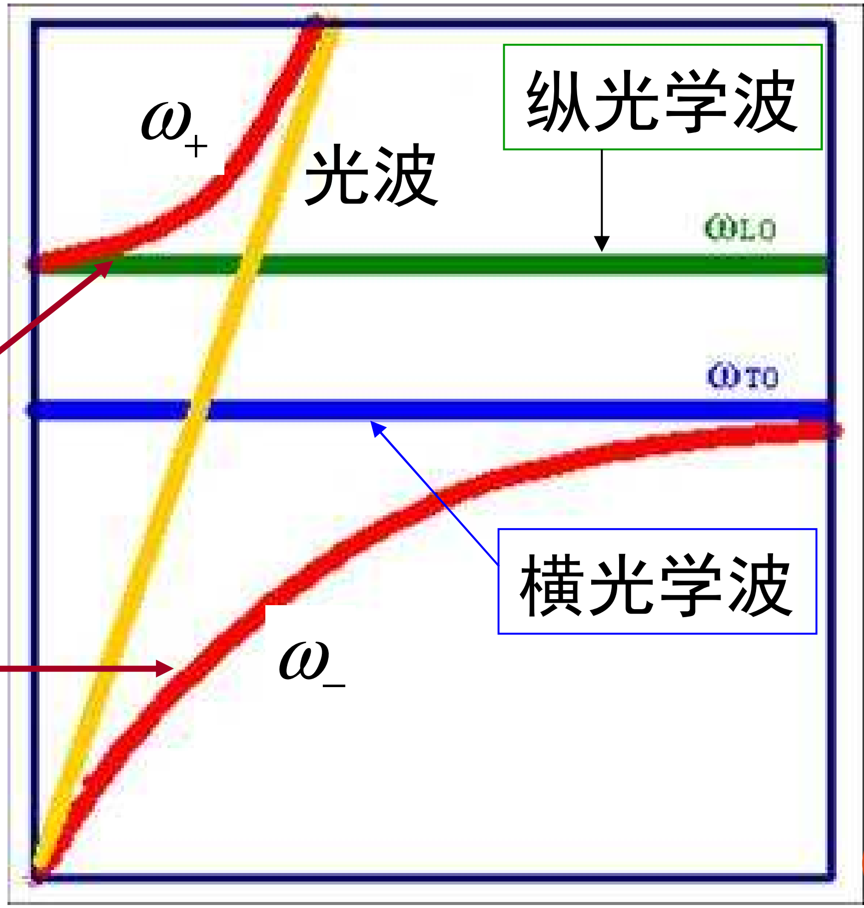
1951年黄昆提出

极化激元 （Polaritons）

离子晶体中长光学横波与光子的耦合模

由于是放大图，
（1）纵、横光学波的色散曲线（绿线和蓝线）显得很平坦。
（2）纵、横光学波色散曲线的差异显得很明显。

详细说明请参照黄昆书P114



原来的光波（黄线）与格波耦合后形成ω+和ω-两支

极化激元（Polaritons）

1950年

黄昆综合介质的电磁理论和晶格动力学理论对极性晶体提出了一对唯象方程。它提供了处理极性晶体光学振动的基础，被称为“黄方程”

1951年

黄昆从黄方程出发，又推导出晶体中的声子与电磁波的耦合振荡模式

1963年

黄昆所预见的声子与电磁波的耦合振动模式首先被半导体磷化镓的Raman散射实验所证实，被命名为极化激元

后来发现其他物质振动也有类似的与电磁波的耦合模式，也被称为极化激元。现在极化激元成为分析固体光学性质的基础

极化激元 （Polaritons）

元激发可以分为两类：

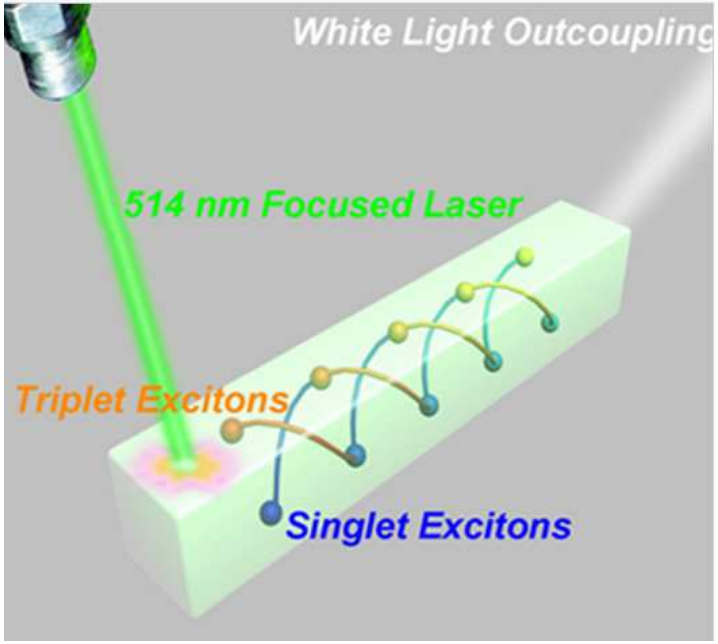
集体激发的准粒子：

晶格振动的格波就是最典型的集体激发的例子，其准粒子称为声子，格波表示的是所有原子的一种集体运动。自旋波是另一个集体激发的例子，其准粒子成为磁振子

单粒子激发的准粒子：

金属中的电子可以理解为单粒子激发的准粒子。
把电子与屏蔽电荷云加在一起构成准电子，把计入库仑相互作用的电子气形式的看成是准电子气。准电子数目与电子数一致，服从费米统计。所不同的是有效质量不同（计入库仑相互作用的结果）……

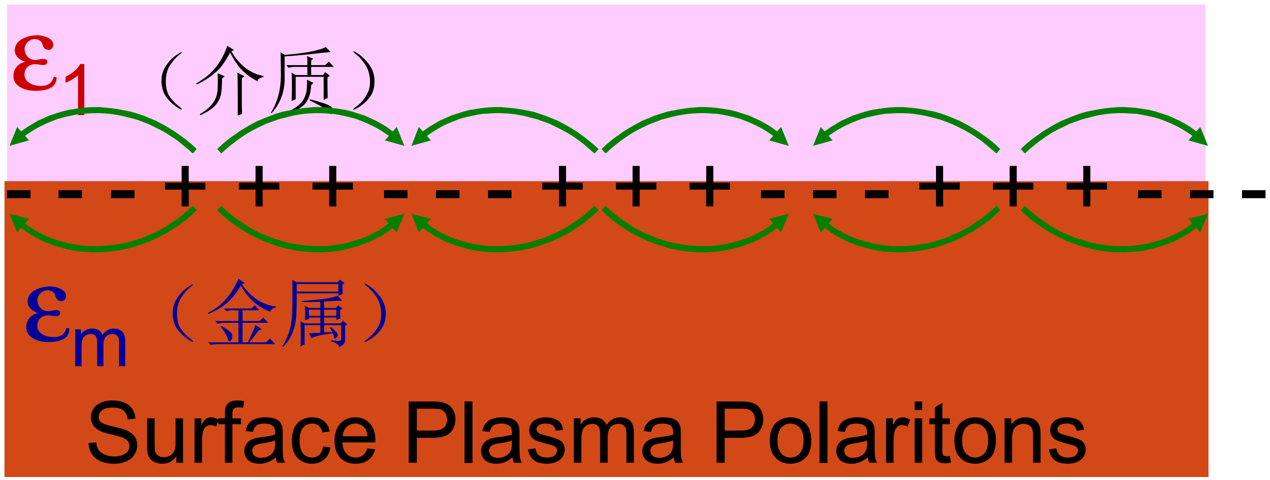
有机材料中的激子极化激元

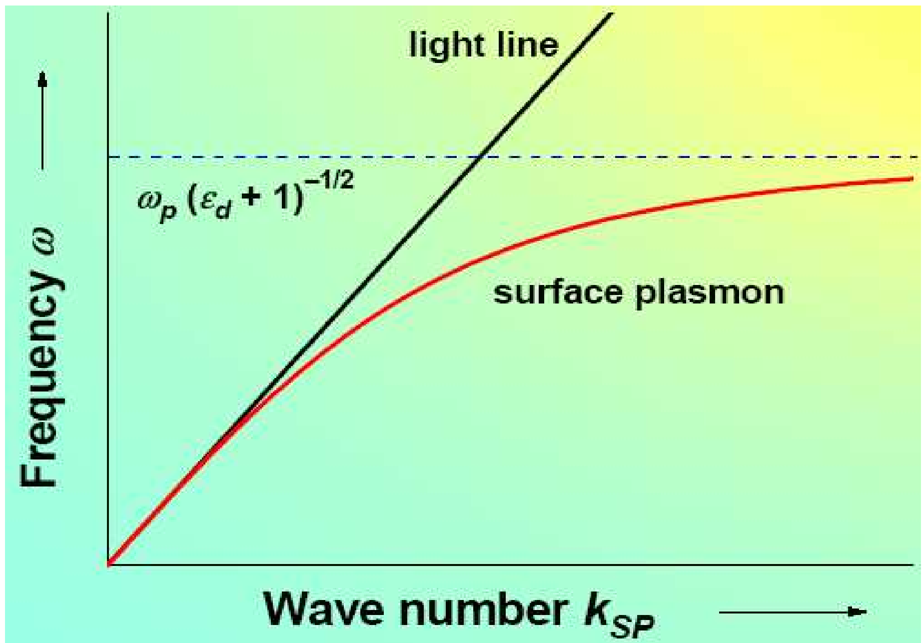


有机材料中的Frenkel激子(束缚的电子-空穴对)具有高的激子结合能，能够与光子耦合形成稳定的激子极化激元(Exciton Polariton, EP)。这种激子光子强耦合作用对有机纳米线体系中光波导行为和发光调制谐振等方面有着重要的作用

表面等离子极化激元

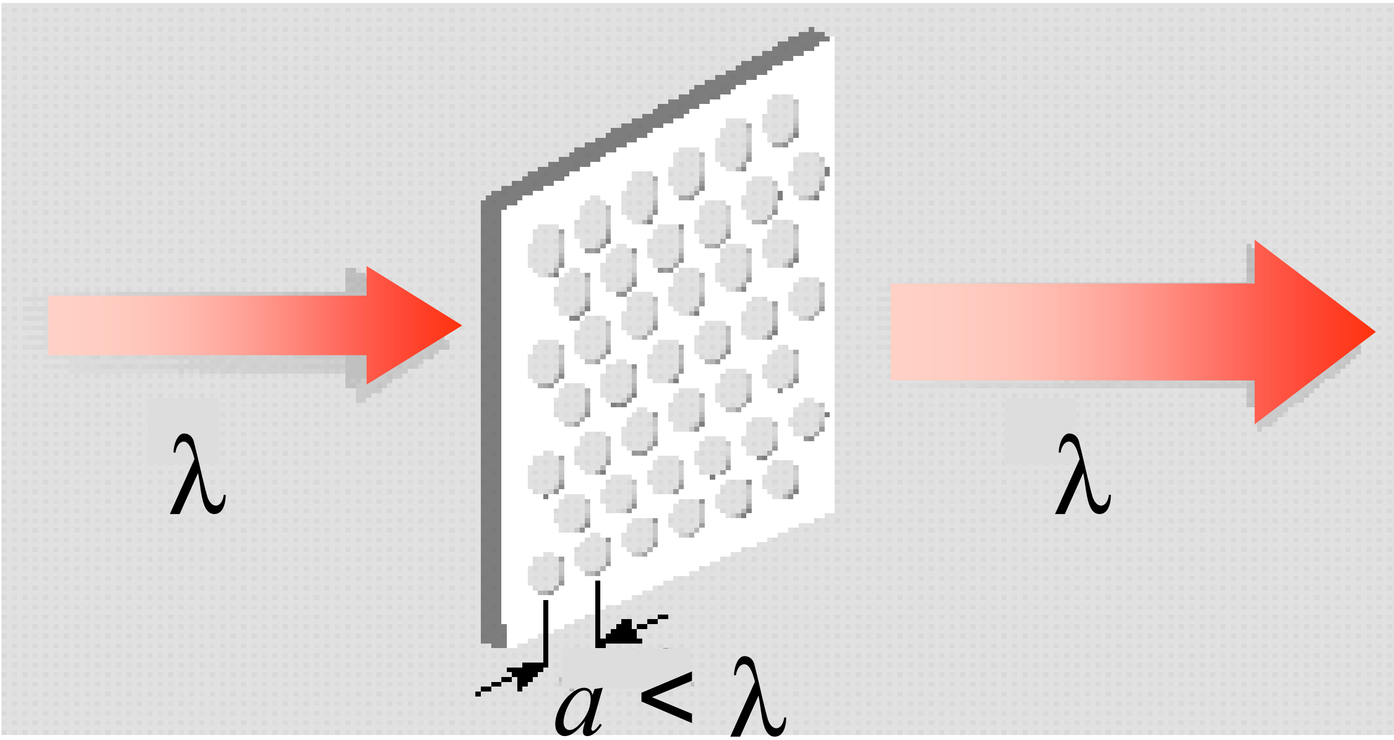
与金属表面电子形成的共振模式



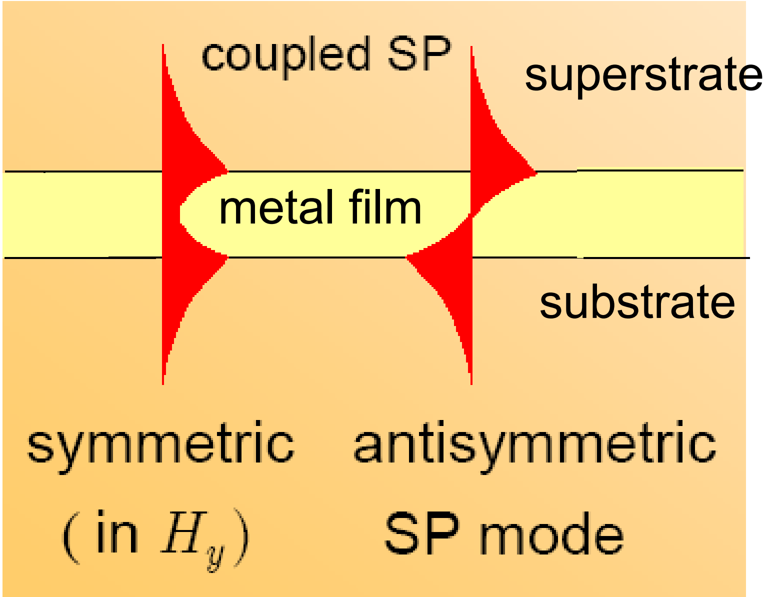


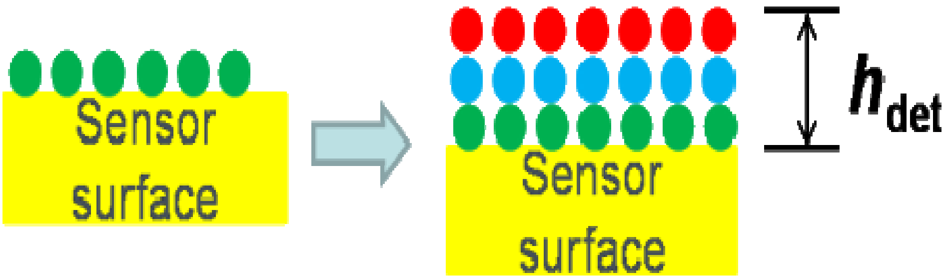
表面等离子极化激元

借助SPP的超透明小孔效应



表面等离子极化激元

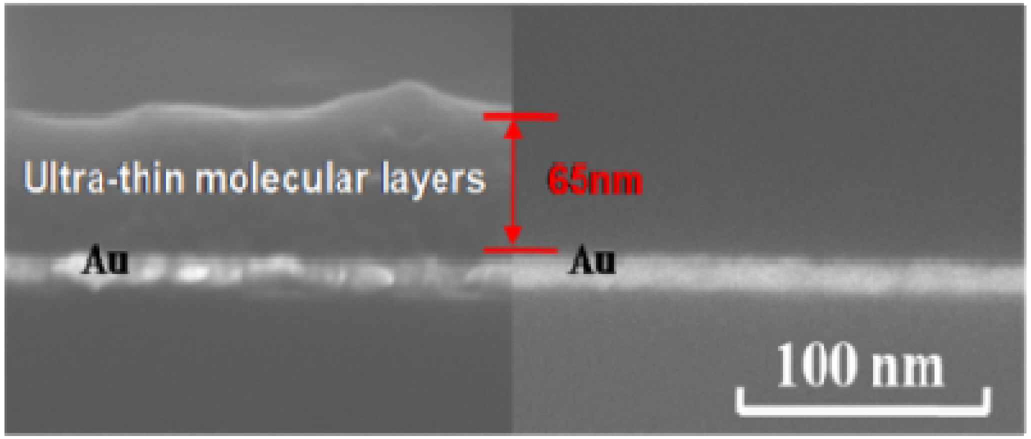




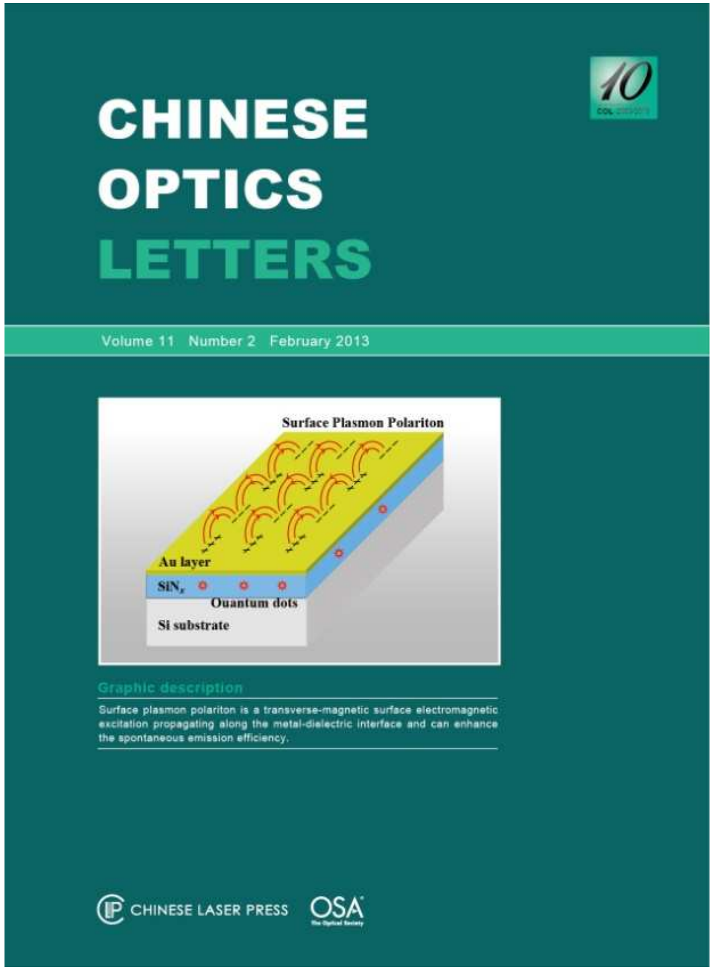
Thickness of each layer ~ 5nm

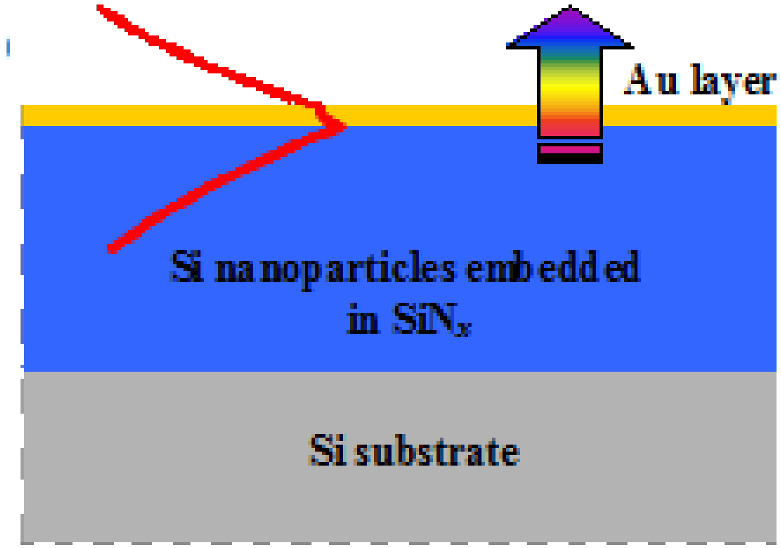
可探测超薄层的SPP sensor

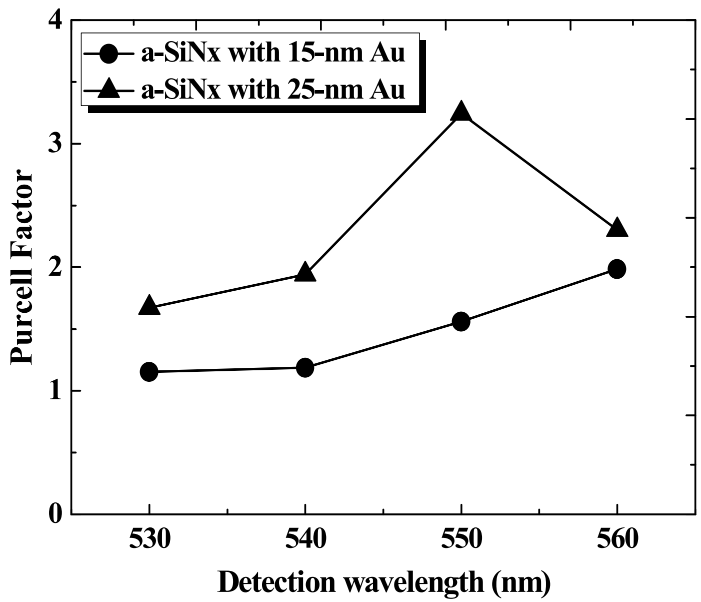
(b)



表面等离子极化激元







SPP增强硅基发光
“2013中国光学重要成果”