

黄昆先生的主要科学贡献

夏建白[†]

(中国科学院半导体研究所 北京 100083)

2019-06-16收到

[†] email: xiajb@semi.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20190804

2019年是黄昆先生诞辰100周年。黄昆先生是中国老一代科学家的典范，他在国外时已在固体物理领域取得了卓越的成就，新中国成立后立即回国投身于教育事业。他与谢希德先生一起开创了我国半导体事业，同时在北京大学建立了固体物理专业，为新中国培养了一大批人才。1977年黄先生调任中国科学院半导体研究所所长，与王守武、林兰英、王守觉先生一起带领半导体所独立自主地攻克难关，制造出一批国家急需的、国际禁运的核心元器件。尔后他老当益壮，焕发新春，又在半导体超晶格领域作出了新的贡献。在他的带领下，半导体所超晶格国家重点实验室成为当时国际前沿的实验室之一。下面介绍黄昆先生的主要科学贡献。

1 国际固体物理学研究的先驱者

黄昆先生是在二次世界大战刚结束时考取公费到英国留学的。当时国际上对固体物理的研究刚刚开始，这可以从历年的诺贝尔物理学奖获得者的研究领域看出(见表)。从1946至1957年诺贝尔物理学奖基本没有授予与固体物理有关的研究，说明当时只有一些个别的针对某一具体问题的固体物理研究，而没有系统的研究。如黄昆先生的导师莫特先生就研究了照相底板曝光过程中的电子过程，并写就专著《离子晶体中的电子过程》。

黄昆先生是“二战”结束后去布里斯托当莫特研究生的第一个中国人。当时莫特提出了2个题目：一个是计算小角度晶粒边界的能量，另一个是稀固溶体中的溶入原子对X射线衍射的效应。黄昆先生选择了后者，因为他喜欢系统的理论。因为溶入原子和母体原子带隙的差异会使固溶体中原子的位置发生偏离，其效应和热振动的效应

是相似的。因此去除平均晶格常数的光衍射点以外，在衍射点附近还存在一定漫散射的分布。黄昆早在1947年完成了理论工作，但没有实验验证。这一理论在20年后得到验证时，黄昆先生正在十年浩劫的磨难里，直到几年以后他才知道这个结果。现在这种X射线散射方法已经成为检验晶体中缺陷或杂质的方法，称为“黄—扩散散射”(HDS)。

2 极化子(polariton)概念的首创者

黄昆在布里斯托大学当研究生时，知道了弗

1946年—1957年诺贝尔物理学奖一览

年份	获得者	研究领域
1946	布里奇曼(Bridgman)	高压物理
1947	阿普顿(Appleton)	大气层物理
1948	布莱克特(Blackett)	宇宙线物理
1949	汤川秀树(Yukawa)	粒子物理
1950	鲍威尔(Powell)	粒子物理(实验)
1951	科克罗夫特(Cockcroft)	原子核物理
	瓦尔顿(Walton)	原子核物理
1952	布洛赫(Bloch)	核磁共振
	珀塞尔(Purcell)	核磁共振
1953	泽尼克(Zernike)	发明相衬显微镜
1954	玻恩(Born)	量子力学
	博特(Bothe)	发明粒子计数的符合法
1955	兰姆(Lamb)	氢光谱的发现
	库什(Kurch)	精密测定电子磁矩
1956	巴丁(Bardeen)	发明晶体管
	布拉顿(Brattain)	发明晶体管
	肖克利(Shockley)	发明晶体管
1957	李政道(Tsung-Dao Lee)	发现宇称不守恒
	杨振宁(Chen-Ning Yang)	发现宇称不守恒

洛里希和莫特的一项工作，他们试图将晶体光学振动的微观模型与介电函数结合起来。因此在茶歇时经常与弗洛里希讨论这项工作。黄昆觉得他们搞的微观模型不能正确地描述其中带电粒子的运动。因为不但正负粒子之间可以相互作用，而且这些粒子由于都是带电的，电场会对这些粒子产生极化，使这些粒子本身产生新的电荷分布而引起电场，所以这是一种自洽的关系。黄昆于1950年首先提出了一对唯象方程，将宏观电场 E 、晶格离子相对位移 u 和晶体的介电极化强度 P 联系起来，描述极性晶体的长波光学振动：

$$\begin{aligned} \ddot{u} &= a_{11}E - a_{12}P, \\ P &= a_{21}E + a_{22}P. \end{aligned}$$

方程提出十多年以后，在实验上证实了这种耦合振动的新的振动模式，并将这种振动模式命名为“极化激元”或“极化子”(polariton)。这组方程成为研究固体中晶格振动模与电磁波耦合的基础。由此发现了一种新的运动模式——极化激元，此后又发现了许多新的与电磁波耦合的元激发(如激子、磁子、等离激元等)。极化激元成为20世纪60年代固体物理研究的热点，一般公认黄昆先生是这一概念的首创者，这组方程称为“黄方程”。

3 首次提出一个严格的理论,处理晶体中电子—晶格相互作用,不用微扰论处理

在一般的极性比较强的晶体，如半导体中，电子—晶格相互作用较弱，可以用微扰论处理。但在离子性强的晶体中，如氯化钠等，电子跃迁将引起周围原子的弛豫。也就是电子基态和激发态的“位形坐标”不同，电子跃迁过程中将产生或吸收多个声子，也就是多声子跃迁，因此微扰论就不再适用。黄昆先生在研究离子晶体中F—心的光谱时发现了这个问题。F—心光谱是由离子晶体中的缺陷产生的，光谱不像通常晶体中的窄的光谱线，而是很宽的带。因此他理解到缺陷中心(F—心)的电子跃迁伴随着周围原子位置的新调整，也就是晶格弛豫。从数学处理角度，他

提出位形坐标的变化，两个不同的位形坐标中，声子波函数的正交性不再满足，因此任意的声子数的改变是可能的。在此基础上黄昆发展了多声子跃迁理论。与此同时他还发展了无辐射跃迁理论，其中声子的发射或吸收补偿了电子跃迁的能量。这一理论是黄昆先生及其夫人李爱扶先生合作完成的。其中他们引入一个重要的参量来描述声子的数量，称为“黄—李因子”。

4 将晶格动力学理论系统化,与玻恩教授合著的《晶格动力学理论》成为该理论的“圣经”

在完成博士论文工作后，黄昆先生有半年时间访问爱丁堡大学的玻恩教授。见面时玻恩就交给黄昆一份关于晶格动力学的非常不完整的手稿并提议由黄昆与他合作来完成这本书。该书花了黄昆3年时间才写就，为此黄昆还专门研究了力常数的10个不变性条件。正如玻恩在序言中强调的，这本书不是已发表结果的综合，而是重新组织的。关于黄昆先生的贡献，可以从玻恩教授的序言中看出：“本书的最终形式和撰写应基本上归功于黄昆博士。”“黄昆博士坚信科学之主要目的在于社会应用，而我原先计划的抽象演绎表达方式不太合他的口味。因此他增写了几章比较基本的引论，这几章应易于理解；而后再逐步引申至本书第二章的普遍理论。他同时也重写了原先的内容，在很多方面使之更普遍化，并增加了新的章节。”因此这本书明显的带有了“黄昆风



黄昆与玻恩合著的《晶格动力学理论》



黄昆先生与学生们在家里讨论工作(摄于1994年)

格”，而不是原来的“玻恩风格”。

5 半导体超晶格的声子模和激子态

这里的工作包括：(1)发展了平面波展开方法计算超晶格的空穴子带；(2)在此基础上发展了严格的四分量的激子态理论；(3)最成功的是发展了超晶格光学振动模的理论，后来称为“黄—朱模型”。当时基于介电连续近似的唯象处理能导出超晶格光学模，而另一方面直接的晶格动力学计算需要很大的计算量。关于超晶格光学振动模在两种材料之间的边界条件有很大的分歧：一是静电边界条件，另一是力学边界条件。黄昆和朱邦芬提出了一个偶极振子模型，这个模型具有许多灵活(flexible)和非常称心(desirable)的特点来描述超晶格的光学模，同时与实际的微观模型比较，计算工作量大为减小。另一方面在长波极限下它又与介电连续模型相容。由这个模型得出的结果澄清了超晶格光学模的一系列基本问题。“黄—朱模型”与拉曼散射实验工作的理论解释紧密相关，在过程中黄昆发现这种工作是非常迷惑的(baffling)，为此他和朱邦芬又一起发展了超晶格光学声子拉曼散射的细致微观理论。

今天我们纪念黄昆先生百年诞辰，我们应该

向黄昆先生学习(摘自黄昆先生的观点及所言)：

1. 对科学的爱好向往和追求，这对有志于科学研究的人来讲是非常重要的。国家历来希望，我们在基础研究方面要提高质量，要在国际上占有一席之地。要做到这一点，首先需要有对科学不懈追求的精神。这种追求，不是口头上面而是要渗透到自己的思想中去，甚至于渗透到每天的生活中去。做基础研究的人，如果没有这样一种思想境界，在某种意义上讲，可以说不大像一个做基础研究的人。

2. 选择科学研究方向是非常重要的。“选择莫特做导师，我也就选择了固体物理作为自己的研究方向是非常幸运的。固体物理作为一门学科来讲，在40年代刚刚形成，以后有了很大发展，称得上是物理学在20世纪里最重大的一门新的学科的发展。我在那个时期进入这一大有作为的科学领域是很幸运的。其次就是导师莫特的治学风格，对我产生了很大的影响。跟他认识和接触以后，使我进一步认识到，从对科学的追求和到真正进入科研领域，是通过对一个又一个具体的科学问题的解决逐步发展的。”“莫特教授面不是很宽，但他要求你集中全部精力来解决你所面临的问题。集中精力与否，是你能否做好研究工作的关键。”

3. 对于成才问题，从我的切身经历，体会出两个小道理：一是要学习知识，二是要创造知识。对科学研究工作的人来讲，归根结底在于创造知识。在学习知识上，我的实际体会是，不是越多越好、越深越好，而是要服从于应用，要与自己驾驭知识的能力相匹配。要做到三个“善于”，即要善于发现和提出问题，尤其是要提出在科学上有意义的问题；要善于提出模型和方法去解决问题；还要善于作出最重要、最有意义的结论。