

# F 心 吸 收 线 型 函 数

李 平 方 书 淦

(上海交通大学应用物理系)

本文的基本思想是: 从微观机制出发, 计算当  $F$  心受到单色平面波作用时其极化电矩  $P$  的系综平均值。与宏观意义上的  $F$  心极化电矩比较, 得  $F$  心吸收线型函数。

$F$  心极化电矩  $P$  的系综平均值计算基于下列假设:

(1) 晶格振动与  $F$  心电子的耦合可以作为  $F$  心电子受到一个无规热扰动处理。无规扰动的相关时间很短。

(2) 仅考虑  $F$  心的  $F$  带跃迁, 忽略能量较高的吸收。 $F$  心系统可以看成二能级系统。

(3) 由于晶格的热扰动是温度的函数, 与玻氏统计类似, 扰动  $\sim e^{-\frac{A}{kT}}$ 。 $A$  是与晶格振动平均频率有关的常数。

从求得的线型函数可得下列结果。

(1)  $F$  心吸收线型函数是六个洛伦兹线型函数和三个非洛伦兹线型函数之和。由于大量洛伦兹线型迭加就接近高斯线型, 故  $F$  心的吸收带是近高斯线型的。

(2)  $F$  心吸收峰中心波长位于  $\omega_0 - \lambda_i^{(0)}$ , 而  $\lambda_i^{(0)} \sim e^{-\frac{2A}{kT}}$ 。所以, 当温度升高时,  $F$  心吸收峰按  $e^{-\frac{2A}{kT}}$  向长波移动。实验曾经测定不同温度下  $F$  心吸收峰的位置, 通过拟合确定参数, 这一关系可以较好地解释实验现象。

(3) 由于非洛伦兹线型项的存在, 计算给出的线型函数关于吸收带中心是不对称的。关于中心偏短波方向吸收较小, 反之吸收较大。这恰好可以解释  $F$  心吸收带的不对称性。

(4)  $L(\omega)$  同时还给出了  $F$  心的发射线型函数。