

五次对称与准晶态

郭可信

(中国科学院金属研究所)

1984年11月美国国家标准局(NBS)的一个研究小组,报道了他们在急冷 Al-Mn 合金中发现一种所谓“二十面体(icosahedron)相”,它的特点是,除了给出六次及二次对称的电子衍射图外,还有五次对称的电子衍射图。图中斑点明锐,而且旋转轴之间的关系符合二十面体的 $m\bar{3}5$ 点群。图1是金属研究所张泽在急冷 Ti-Ni-V 合金中得到的类似电子衍射图,图中十个衍射斑点为一组,坐落在同心圆上。示意图是一个二十面体,具有 $\frac{m}{2}\bar{3}5$ 点群对称。经

典晶体学中,无论是布喇菲14种点阵还是费德洛夫230种空间群,均不允许有五次对称,因为五次对称会破坏空间点阵的平移对称性。一个简单易懂的例子是,不可能用五边形布满二维平面,也不可能用二十面体充满三维空间而不留空隙。NBS小组认为,这种二十面体结构是由取向相同、分布无规则的二十面体构成。换句话说,这是一种介于晶体(取向及平移均有长程序)及玻璃(取向及平移均无长程序)之间的一种新状态^[1]。

美国宾州大学物理系的一个小组近几年来

一直对凝聚态中的二十面体结构进行理论探讨。12个原子(如铝原子)凝聚在一个尺寸略小的原子(如锰原子)周围,形成一个由20个正三角形构成的壳层,具有10个三次旋转轴和6个五次轴(见图1)。在一定的成分和温度范围内,这种二十面体结构的自由能很低,有可能出现。他们在1984年末计算出二十面体相的电子衍射图,无论斑点的位置还是强度均与NBS小组的实验结果相符。他们称这种新状态为准晶态(quasi-crystalline),经典的具有周期性的布喇菲点阵也为无周期性或更准确一点说为有准周期性(quasi-periodicity)的准点阵(quasi-lattice)取代^[2]。

这两篇短文立刻在科学界引起巨大反响,国际上一些专门介绍科学新进展的杂志对此竞相报道。英国《自然》杂志的标题是《面向五次对称?》(1985年1月24日);《新科学家》的标题是《晶体学准则的瓦解》(1985年1月24日)。美国《今日物理》的标题是《不允许的五次对称可能引出准晶态》(1985年2月)。人们一致认为,准晶态的研究除了会产生一系列具有奇异物理性能和机械性能的新材料外,还会在凝聚

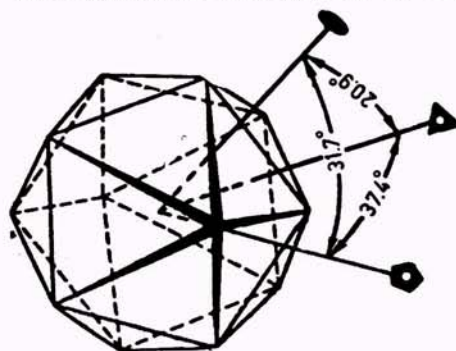
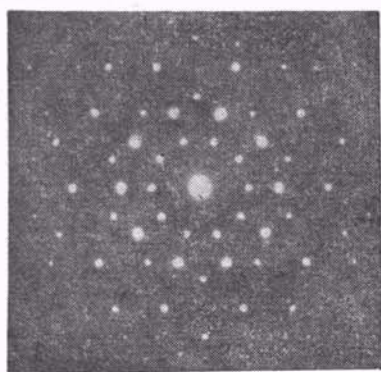


图1 急冷 Ti-Ni-V 合金的五次对称衍射图

态物理界产生一些新思想、新概念和新理论,如能带理论就需要革新和充实。准晶态研究的热潮已经兴起,据了解,目前国际上至少有十个实验室正在用高分辨电子显微镜观察 Al-Mn 二十面体的原子象,理论文章也接踵而来^[3-6],预期这将是凝聚态物理研究的一个热门课题。

其实,五次对称并不是全新事物。矿物界的且白石,有机化学中的硼环化合物,生物界中的病毒,都显示宏观五次对称特征。早在 1974 年英国牛津大学的数学家 Penrose,作为业余消遣,就研究过五次对称问题,他发现,尽管正五边形不能布满平面,两种有 $72^\circ, 72^\circ, 144^\circ, 72^\circ$ 及 $36^\circ, 72^\circ, 36^\circ, 216^\circ$ 角的四边形却可以布满平面,不留空隙(图 2)。沿箭头方向,线段的长度有固定比值 $\tau = 1.6180\dots$ 。五次对称轴比比皆是,不过它们的分布并不具有周期性。应当指出,图 2 不是唯一的,用这两种四边形可以拼凑出无穷个五次对称的几何图案(关于 Penrose 的五次对称图案见 1977 年《科学美国人》第 236 卷 110 期中的科普文章《数学游戏》)。接着在 1981—1982 年英国的晶体学家 Mackay 把 Penrose 的概念推广到三维空间中去,用两种三十面菱面体穿插起来得出二十面体对称性,并用光学变换仪得出五次对称的光学衍射图^[7]。显然,这种二十面体点分布也没有周期性。指出上述事实,只是为了说明五次对称及非周期性的问题已经逐渐引起人们的注意,这是晶体学及凝聚态物理发展的必然结果。当然,这丝毫不会贬低二十面体相的发现和准晶态概念的提出的重要意义。

仔细推敲图 2 就会发现,沿与 5 次轴正交的一个轴向看去(在图 2 中用箭头标明),线段的长度并不是任意的,而仅有一长一短两种,它们的比值 τ 恰为黄金分割这一无理数

$$(1 + \sqrt{5})/2 = 1.6180\dots$$

此外,图 2 中所有夹角都是 $\pi/5$ 的整数倍。换句话说,这种二维结构尽管不具有周期性,但也不是完全混乱无序的,无论长度及夹角都有定值,只不过不具有我们在经典晶体学中所熟悉的旋转及平移对称而已。如果用一个五轴坐标

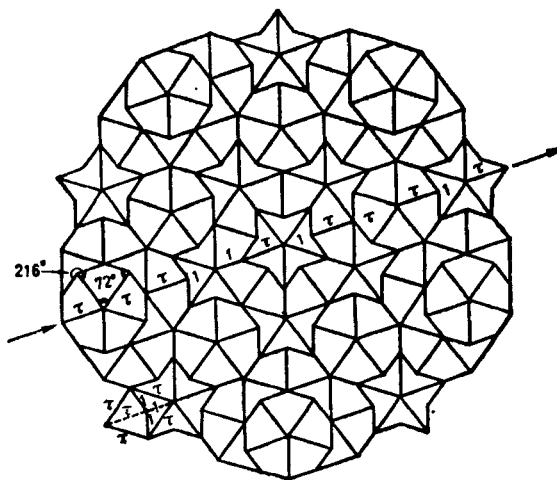


图 2 两种 Penrose 四边形

系描述平面上的点,则 $r = u_1 a_1 + u_2 a_2 + u_3 a_3 + u_4 a_4 + u_5 a_5$, 其中 a_i 是基矢 ($\sum a_i = 0$), u_i 是整数系数。用任意两个轴,可以得出一个二维点阵;用五个轴(其中三个是多余的),则可以得出一个准点阵,所有阵点都有整数坐标 $[u_1, u_2, u_3, u_4, u_5]$ 。由此可见,二维空间里的准点阵实际上是五维空间的一个点阵。显然,在倒易空间里也有一个五维倒易点阵或二维倒易准点阵与其对应,由此不难理解为什么这种准周期性结构会给出明晰的布喇格衍射在这里我们引用《自然》中《面向五次对称?》一文的结束语:“不管结果如何,晶体学家将必须准备在他们不熟悉的数学方面接受再教育”。这是十分中肯的判断。

自从 1983 年以来,中国科学院金属研究所的原子象课题组一直从事合金相及金属玻璃晶化的研究。我们在 1984 年在一些具有二十面体单元的合金相中发现五次对称的电子衍射图,并在当年秋天写了一篇题为《正空间与倒易空间中的五次对称》的论文^[8],将其摘要寄到美国,准备在一次高分辨电子显微学国际会议上宣读。这是一些由二十面体单元构成的所谓四面体密堆相组成的微畴结构给出的五次对称电子衍射图。在这些只有几纳米(nm)大小的微畴中,二十面体不但取向相同,而且具有平移对称。在畴与畴之间,二十面体的取向仍然相同,

但平移对称已不复存在。接着,我们又在急冷的 Ti-Ni-V 合金中发现了与 NBS 小组在 Al-Mn 合金中类似的二十面体相。图 1 就是它的五次对称电子衍射图。最近还指出它的高分辨结构象,一则显示一组具有二十面体对称关系的、排在一个圆上的十个亮点,二则这种十个亮点的分布又不具有周期性^[9]。这与准晶态的结构模型是相符的。此外,我们还在非晶态 Ni-Zr 合金的晶化过程中观察到一种 $\beta = 72^\circ$ 的单斜亚稳相绕 b 轴的五次旋转孪晶,它也给出五次对称的电子衍射图。所有这些结构都由取向相同的二十面体构成,只不过它们的排列有准周期性、纳米级的周期性和长程有序几种不同情况而已。我们在五次对称方面的实验工作比国外目前所报道的内容还要丰富,如果能在理论研究方面尽快开展工作,我们在这一凝聚态

物理的新兴领域里是会走在世界前列的。

参 考 文 献

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias and J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.*, **53** (1984), 1951.
- [2] D. Levine and P. J. Steinhardt, *ibid.*, **53** (1984), 2477.
- [3] P. Bak, *ibid.*, **54**(1985), 1517.
- [4] D. Levine, T. C. Lubensky, S. Ostlund, S. Ramaswamy and P. J. Steinhardt, *ibid.*, **54** (1985), 1520.
- [5] N. D. Mermin and S. M. Troian, *ibid.*, **54**(1985), 1524.
- [6] V. Elser, *ibid.*, **54** (1985), 1730.
- [7] A. L. Mackay, *Physica*, **114A** (1982), 609.
- [8] H. Q. Ye, D. N. Wang and K. H. Kuo, *Ultramicroscopy*, (1985). (待发表).
- [9] Z. Zhang, H. Q. Ye and K. H. Kuo, *Phys. Rev. Lett.*, (待发表).

(上接第 455 页)

633 nm 激光器已在 1980 年正式通过作为国家标准。

2. 微波技术引入光波频段

在经济建设、科学研究各领域中,微波技术比无线电技术用途广,主要原因是微波的频率高、容量大、精度高。光波的频率比微波的高约千倍。因此,将微波技术延伸到光波范围,不仅会使目前信息科学产生蜕化,而且使物理学中的电子学和光学衔接和逐步“统一起来”。这对经济发展和科学技术的进步将起推动作用。

3. 新米定义在物理学中的作用

首先是光速值作为一个基本物理常数规定下来,它不受精度的限制,从而提高其它基本物理常数的精度,使物理的理论计算更接近于实际。也有可能将其它物理量的基本单位也采用基本物理常数来定义,同时统一在真空光速值的基础上。

真空光速值作为一个固定值的基本物理常数,对研究广义相对论,解释宇宙红移现象和探索光的本性等具有意义。

由于稳频激光器的稳定性好,复现性又在不断提高,有可能在可见光范围内建立光频标准,这对发展原子分子物理学,对深入了解微观世界有促进作用,为进一步发展高分辨率激光光谱学奠定基础。

参 考 文 献

- [1] F. Bayer-Helms, *Unterrichtblätter der Deutschen Bundespost*, Jg. 36, No. 12, (1983), s. 485.
- [2] 赵克功,光明日报(第三版),1984年4月13日.
- [3] *Sur Une Nouvelle De'finition Du Me'tre Recommendation*, M 1, (1982), BIPM Paris.
- [4] *Comite Consultatif Pour la De'finition Du Me'tre 7^e Session*, (3—4 Juin 1982), BIPM Paris.
- [5] R. D. Reasenberg et al., *Astrophys. J. Lett. Ed.*, **234** (1979), L219.
- [6] 赵克功等,计量学报,1-1(1980),99.
- [7] J. Helmcke, *PTB-Bericht*, Me-13, (1977), 13.
- [8] K. G. Zhao, M. Glaeser and J. Helmcke, *IEEE Trans. Instrum. Meas.*, IM-29-4 (1980), 354.
- [9] F. Spieweck *IEEE Catalog*, CH 1497-7 IM-80 (1980), 261.
- [10] *Document CCDM 82-34*, (1980), BIPM Paris.
- [11] 赵克功等,光学学报,3-8(1983),673.
- [12] 赵克功等,物理,2-4(1973),202.
- [13] 中国计量科学研究院激光组,物理,2-1(1973),35.