

# 一维准晶的振动性质

徐 文 兰

(中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083)

本文简单介绍了准晶的概念和一维 Fibonacci 准晶的结构, 研究了一维准晶链所特有的 Cantor-like 积分振动态密度。在准晶的振动本征态中, 除了低频区的扩展态和禁带中的局域态外, 还有一种以往周期及无序结构中都没有的临界态。文章还讨论了在准晶中引入掺杂和错位等无序后对准晶原子链振动的影响。以上的研究为一种人工准晶体——准晶超晶格的振动研究提供了理想的模型。

## 一、五边形的木板能铺地板吗?

上一世纪固体物理学家就发现, 在晶体中不存在五次对称轴, 这是因为晶体是由某种形状的单元通过空间平移构成的, 具有五次对称轴的单元无法平移构成晶体。比如相同形状的 20 面体就不能不留空隙地充满整个空间。同样, 也可以用正三角形、正四边形和正六边形的木板去铺房间的地, 却永远不能用相同形状的正五边形木板不留空隙地铺满整个平面。

1983年美国国家标准局的科学家在研究高强度铝合金时, 得到的一种铝、锰急冷合金在电子显微镜的衍射图样中竟然发现有五次对称的 20 面体。由于与传统固体物理学概念相违背, 这一发现使科学家们大为惊讶, 不可思议! 直到 1984 年 11 月, 他们才向全世界公布了这一发现。其实自然界是存在天然五次对称单元组成的物体的, 例如, 医学界早就发现引起扁桃腺炎和小儿麻痹症病毒的蛋白质衣壳就是个 20 面体。可是 20 面体是怎样不留间隙地充满整个空间的呢? 或者换言之, 具有  $\pi/5$  整数倍角度的多边形是怎样铺满一个平面的呢? 人们打开了记忆的闸门, 想起了 1974 年一个名叫 Penrose 的数学家就发现可以用两种具有  $\pi/5$  整数倍角度的四边形不留间隙地铺满整个平面。文献[1]给出了一种用所谓的“风筝”和“飞标”构成的 Penrose 图形。图 1 则给出了另一种 Penrose

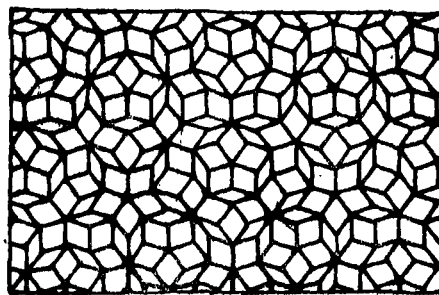


图 1 Penrose 图形

堆积。不论哪一种 Penrose 图形, 都有以下三个特点: (1) 平面上确实存在五次对称, 并不留任何间隙。(2) 平面上不存在通常意义下的周期有序性, 可这也与无序完全不同。(3) 两种四边形面积之比为  $\tau = 2 \cos \pi/5 = (\sqrt{5} + 1)/2$ , 两种四边形个数之比也为  $\tau$ 。科学家们就把这样一类即非周期有序, 又非绝对无序的结构称为准晶。由此可见, 五边形的木板是铺不满地板的, 但有五次对称的木板就可以用来铺你的地板。聪明的读者也一定可以想象具有五次对称的单元如何不留空隙地充满整个空间。

## 二、一种最简单的人工准晶体

准晶的发现给科学家们开启了一个新的窗

口。人们争先恐后地去研究它,并试图制造它。近年来,超晶格的理论意义和实用价值使这一领域的工作方兴未艾。所谓超晶格就是用两种层状晶体 A 和 B,在垂直于层的方向 ABAB... 周期性地叠合而成。这样的结构在二维方向上保持了原来晶格的周期,而在垂直于层的方向上却扩大了原来的周期。超晶格的“超”可能就来源于此。物理学家们是聪明的,他们善于触类旁通,很快就做出了准晶超晶格。即用所谓的准晶序代替原来的周期排列来叠合层状晶体。那么,什么是准晶序呢?现在举一个 Fibonacci 序列为例子,这是一个以数学家的名字命名的序列。有许多生成这种序列的方法。最简单、最形象的一种方法是假设有两只兔子 A 和 B, A 是大兔子, B 是小兔子。大兔子会生小兔子,  $A \rightarrow AB$ ; 小兔子会长成大兔子,  $B \rightarrow A$ 。于是一代代传下去,产生了这样的序列:

AB  
ABA  
ABAAB  
ABAABABA  
.....

看!传到第四代,已有大小八只兔子——八个单元的排列。显然这样的排列并没有 ABAB... 那样的周期性,可也不是完全无规可循和无序的。在这样一种排列中,当单元的个数趋于无限大时, A, B 两种单元个数之比就是第一小节中提到的那个无理数  $\tau$ 。在这种排列中,我们还可以看到一些有趣的特点:如把上一代的单元添到这一代的排尾,就会变成下一代的排列。在每一代的排列中,结构上存在对称性,即第  $i$  个单元与第  $F_n - i - 2$  个单元是一样的。这里  $F_n$  称为第  $n$  代的 Fibonacci 数,即传到第  $n$  代时单元的总数,  $i = 1, 2, \dots$ 。

目前,物理学家们已经按这种 Fibonacci 的准晶序作出了 Si-GeSi<sup>[2]</sup>, GaAs-AlAs<sup>[3]</sup> 等准晶超晶格。由于准晶超晶格的晶格振动在某些生长方向上,其纵振动和横振动是非耦合的。一维准晶原子链就提供了一个研究准晶超晶格的理想模型。图 2 画出了一种 GaAs-AlAs 准晶

超晶格的结构。

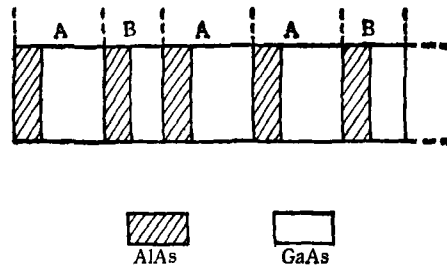


图 2 GaAs-AlAs 准晶超晶格 (A, B 两种单元分别由不同厚度的 GaAs 和 AlAs 组成)

### 三、一把撕碎了的梯子

晶体中的原子都在其平衡位置附近作振动,这就是晶格振动。晶格振动与物体的许多性质(如固体比热、热膨胀和光吸收等)都有直接的关系。在晶格振动中,人们用声子这一概念去描述晶格的集体振动模式,而用声子态密度描写这些振动模式按频率分布的情况。

文献[4]用负本征值理论求解了一维 Fibonacci 准晶原子链的振动本征方程,作出的声子积分态密度  $D(\omega^2)$  如图 3 所示。图中三条

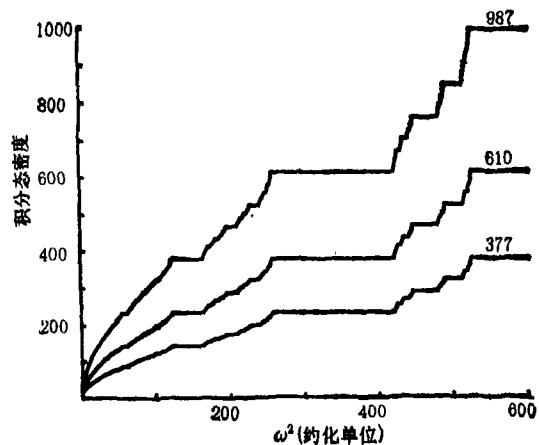


图 3 原子总数为 987, 610, 377 的一维准晶链的积分态密度曲线自上而下分别为原子总数是 987, 610, 377 的一维准晶链的积分态密度。横坐标是振动圆频率的平方  $\omega^2$ , 纵坐标就是低于某个  $\omega^2$  值的声子数——积分态密度。可以看到这个图有几个特点: (1) 每条曲线像一把撕碎了的梯子。

整条曲线上有许多的平坦部分,在这个频率范围内不存在声子,称为禁带。由此可见,声子的分布是准连续的。(2)曲线有自相似性质。即在曲线中取下一段,再放大就会再现整条曲线的性质。(3)不同数目原子链的积分态密度曲线是相类似的(如图3所示),甚至当准晶链原子数不是 Fibonacci 数时,也会具有相同形状的积分态密度曲线。像图3这样形状的曲线在数学上属于一种特殊的点的集合——Cantor-like 集合。

#### 四、是扩展态还是局域态?

在求出了声子的谱分布后,很自然的问题是要研究晶格振动本征态。在一维原子链中,有多少个原子就有多少个本征态。图4形象地给出了一个由987个原子组成的准晶链的几个本征态。在详细研究准晶链的本征态前,有必要回顾一下以前人们早就研究过的一维周期链和一维无序链的本征态。在一维周期链中,所有的本征态都是延展态,振幅分布如图4(a)

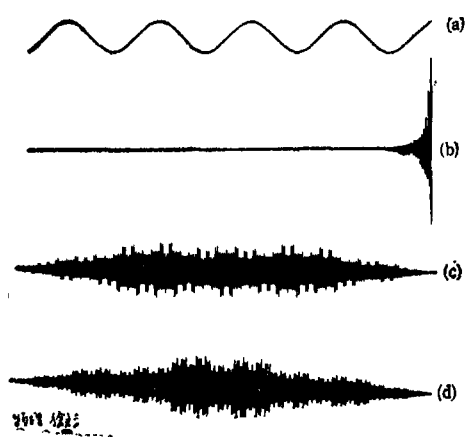


图4 一维准晶链的本征态的振幅分布  
(a) 低频扩展态; (b) 局域态; (c) 禁带下方的临界态;  
(d) 禁带上方的临界态

所示。而在一维无序链中,除 $\omega = 0$ 外的状态都是局域态。即在某个原子处振幅特别大,而随着离这个原子距离增大,振幅很快衰减至零,如图4(b)所示。在准晶链的本征态中,除了扩展态和局域态外,还有一种所谓的临界态[见

物理

图4(c)和(d)],它既不是局域的,也不是扩展的。仔细观察这种态就会发现,在禁带下方的振动态,其振幅分布是对称的[图4(c)]。这与前面提到的 Fibonacci 链结构上表现的对称性是一致的;但禁带上方的那个态,其振幅分布就是反对称的了[图4(d)]。在其他禁带的两侧,也出现这种振动态对称性突变。这使人联想起周期晶格振动态在禁带两侧振动特性的突变。

当今,关于振动态的局域性质的描述可说是五花八门。但从许多局域态的描述上都可以见到随频率增高,准晶临界态的局域性是增加的。高频振动相对来说不容易在整个准晶链上传播。临界态是准晶特有的振动态,遗憾的是到目前为止人们对于临界态的认识还十分肤浅。如何描写临界态?临界态的起源是什么?这都是人们今后应该着重考虑的问题。

#### 五、准晶中来一点无序情况会怎样?

周期晶格中的无序如掺杂、错位等,引得多少科学家魂牵梦萦,四十年来得到了不少世人瞩目的成果。在准晶中也出现一些无序,例如掺杂、错排。一种简单的错排就是在该放A单元的地方放了B单元,那么准晶链的振动会受到什么影响呢?低频的振动态对此可谓“无动于衷”。因为这些态是长波振动态,对于一个单元的错排并不敏感。至于局域态,则要看错排的单元位置是否离振幅极大处近。近,则影响大,局域态会有所扩散;远,则也看不出有多少影响。至于临界态,一旦有错排单元,就会“牵一发而动全身”,那种或对称,或反对称的特征将荡然无存!

准晶中的无序问题现在研究得还比较少,这可能是由于准晶的研究还刚刚起步。但是由于准晶在生长过程中难免会偏离理想准晶结构,又由于无序向来是晶格振动研究的一个重要方面,物理学家们必然会在不久的将来曲径通幽,去领略这一领域的无限春光。

正是由于人工一维准晶体的出现,以及它与一维准晶晶格动力学的相互促进,推动了这

# 星系形成和宇宙的大尺度结构

## ——观测对现有理论提出严重挑战

邓祖淦

(中国科学技术大学研究生院, 北京 100039)

夏晓阳

(天津师范大学物理系, 天津 300074)

本文介绍了近年来在观测宇宙学研究中取得的一系列重要成果——微波背景辐射普朗克谱和高度各向同性的证实, 星系分布中超大尺度结构, 星系的大尺度流动和巨大吸引体, 星系红移分布中的规则性的发现。这些结果对现有理论模型提出了严重的挑战。这可能预示着在未来若干年内新的观念或理论上的突破即将产生。

Recently, research on observational cosmology has found a series of important results: verification of the Planck spectrum and highly isotropic features of the microwave background radiation, the existence of super-large scale structure in the distribution of galaxies, the large scale streaming of galaxies and so-called great attractor, and the regularity in the redshift distribution of galaxies. These facts severely challenge the existing theoretical models and may indicate that a new breakthrough in the concept or theory of cosmology will come within the next few years.

自然科学发展的最主要的推动力是已有理论和认识与实验或观测事实间的矛盾和冲突。近年来, 观测宇宙学取得的一系列新的观测结果向现有理论模型提出了严重的挑战。这可能预示着在未来若干年内新的观念或理论上的突破即将产生。

目前人们普遍接受的所谓标准宇宙学模型“ $\Lambda$ ”要解决的最困难的问题是星系形成问题。

微波背景辐射的高度各向同性表明了早期宇宙中重子物质和辐射场的分布是十分均匀的。而今天观测到的星系和星系分布的不均匀, 表明现在物质分布的极不均匀。这种物质由均匀演化到不均匀和星系及宇宙大尺度结构的形成是密切联系的。在本文中, 我们将介绍近年来观测上的发现和它们给现有理论模型所带来的困难。

一领域的工作。目前关于准晶的晶格动力学计算已与拉曼散射实验密切配合, 得出不少可喜的结果。相信随着研究的深入, 准晶振动的研究必将推动物理新概念的产生和新材料的应用。

粗糙地说, 准晶是介于晶态和非晶态之间的一种凝聚态, 但是它的产生和发展给我们开辟了一方新天地。这又一次说明了科学发展到

了今天, 正是在一些古老领域的“边缘”, “夹缝”处会生长出一些瑰丽无比的奇葩, 服务于人类。

- [1] 姜小龙、陈延国、胡素辉, 物理, 16-7(1987), 405.
- [2] G. C. Aers et al., *Phys. Rev.*, B39-2, (1989), 1092.
- [3] R. Merlin et al., *Phys. Rev. Lett.*, 55-17, (1985), 1768.
- [4] Wenlan Xu et al., *J. Phys: Condens. Matter*, 1-48, (1989), 9533.