

● 非线性科学丛书 ●

准 晶 体

刘有延 傅秀军 著

上海科技教育出版社

本书出版由上海市新闻出版局
学术著作出版基金资助

非线性科学丛书

准晶体

刘有延 傅秀军 著

上海科技教育出版社

内 容 提 要

准晶体是 1984 年在实验中发现的。这种新型结构的物质引起了科学工作者极大的兴趣，并得到了广泛的研究。本书介绍关于准晶体的基本理论及十多年来在低维准晶方面的主要研究成果，包括准晶体的构造方法、各类点阵模型、理论研究手段及不同类型准晶结构的各种独特的物理性质。本书作为该领域从基础到当前科学研究前沿课题的入门书，可供理工科大学教师、研究生以及相关专业的科技工作者参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

准晶体 / 刘有延, 傅秀军著. — 上海: 上海科技教育出版社, 1999.12

(非线性科学丛书 / 郝柏林主编)

ISBN 7-5428-1675-6

I. 准… II. ①刘… ②傅… III. 准晶体 IV. 0753

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (1999) 第 30991 号

非线性科学丛书

准 晶 体

刘有延 傅秀军 著

上海科技教育出版社出版发行

(上海市延生园路 393 号 邮政编码: 200233)

各地新华书店经销 上海商务联西印刷厂印刷

开本: 850×1168 1/32 印张: 6.25 字数: 159 000

1999 年 12 月第 1 版 1999 年 12 月第 1 次印刷

印数: 1-3000

ISBN 7-5428-1675-6/O·173 定价: (精装本) 13.20 元

非线性科学丛书编辑委员会

主 编：郝柏林

副主编：郑伟谋 吴智仁

编 委：(按姓氏笔画为序)

丁 鄂 江	文 志 英	朱 照 宣
刘 式 达	刘 寄 星	孙 义 燧
杨 清 建	李 邦 河	张 洪 钧
张 景 中	陈 式 刚	周 作 领
赵 凯 华	胡 岗	顾 雁
倪 皖 荪	徐 京 华	郭 柏 灵
陶 瑞 宝	谢 惠 民	蒲 富 恪
霍 裕 平	魏 荣 爵	

出版说明

现代自然科学和技术的发展,正在改变着传统的学科划分和科学研究的方法。“数、理、化、天、地、生”这些曾经以纵向发展为主的基础学科,与日新月异的新技术相结合,使用数值、解析和图形并举的计算机方法,推出了横跨多种学科门类的新兴领域。这种发展的一个重要特征,可以概括为“非”字当头,即出现了以“非”字起首而命名的一系列新方向和新领域。其中,非线性科学占有极其重要的位置。这决非人们“想入非非”,而是反映了人类对自然界认识过程的螺旋式上升。

曾几何时,非线性还被人们当作个性极强,无从逾越的难题。每一个具体问题似乎都要求发明特殊的算法,运用新颖的技巧。诚然,力学和数学早就知道一批可以精确求解的非线性方程,物理学也曾经严格地解决过少数非平庸的模型。不过,这些都曾是稀如凤毛麟角的“手工艺”珍品,人们还没有悟出它们的普遍启示,也没有看到它们之间的内在联系。

20世纪60年代中期,事情从非线性现象的两个极端同时发生变化。一方面,描述浅水波运动的一个偏微分方程的数值计算,揭示了方程的解具有出奇的稳定和保守性质。这启发人们找到了求解一大类非线性偏微分方程的普遍途径,即所谓“反散射”方法。反散射方法大为扩展了哈密顿力学中原有的可积性概念,反映了这类方程内秉的对称和保守性质。到了80年代,反散射方法推广到量子问题,发现了可积问题与统计物理中严格可解模型的联系。

60年代初期还证明了关于弱不可积保守系统普遍性质的KAM定理。于是,非线性问题的可积的极端便清楚勾划出来,成为一个广泛的研究领域。虽然这里的大多数进展还只限于时空维数较低的系统,但它对非线性科学发展的促进作用是不可估量的。

另一方面,在“不可积”的极端,对KAM定理条件的“反面文章”,揭示了保守力学系统中随机性运动的普遍性,而在耗散系统中则发现了一批奇怪吸引子和混沌运动的实例。这些研究迅速地融成一片,一些早年被认为是病态的特例也在新的观点下重新认识。原来不含有任何外来随机因素的完全确定论的数学模型或物理系统,其长时间行为可能对初值的细微变化十分敏感,同投掷骰子一样地随机和不可预测。然而,混沌不是无序,它可能包含着丰富的内部结构。

同时,由于计算科学特别是图形技术的长足进步,人们得以理解和模拟出许多过去无从下手研究的复杂现象。从随机与结构共存的湍流图象,到自然界中各种图样花纹的选择与生长,以及生物形态的发生过程,都开始展现出其内在的规律。如果说,混沌现象主要是非线性系统的时间演化行为,则这些复杂系统要研究的是非线性地耦合到一起的大量单元或子系统的空间组织或时空过程。标度变换下的不变性、分形几何学和重正化群技术在这里起着重要作用。

在由上述种种方面汇成的非线性科学洪流中,许多非线性数学中早已成熟的概念和方法开始向其他学科扩散,同时也提出了新的深刻的数学问题。物理学中关于对称和守恒,对称破缺,相变和重正化群的思想,也在日益增多的新领域中找到应用。“非线性”一词曾经是数学中用以区别于“线性”问题的术语,非线性科学正在成为跨学科的研究前沿。各门传统学科中都有自己的非线性篇章,非线性科学却不是这些篇章的总和。非线性科学揭示各种非线性现象的共性,发展处理它们的普适方法。

这样迅猛发展的跨学科领域,很难设想用少数专著加以概括,

何况学科发展的不少方面还未成熟到足以总结成书的地步。于是,有了动员在前沿工作的教学和研究人员,以集体力量撰写一套“非线性科学丛书”的想法。在上海科技教育出版社的大力支持下,这一计划得以付诸实现。

这套“非线性科学丛书”不是高级科普,也不是大块专著。它将致力于反映非线性科学各个方面的基本内容和最新进展,帮助大学高年级学生、研究生、博士后人员和青年教师迅速进入这一跨学科的新领域,同时为传统自然科学和工程技术领域中的研究和教学人员更新知识提供自学教材。非线性科学的全貌将由整套丛书刻划,每册努力讲清一个主题,一个侧面,而不求面面俱到,以免失之过泛。在写作风格上,作者们将努力深入浅出,图文并茂,文献丰富;力求有实质内容,无空洞议论,以真刀真枪脚踏实地武装读者。从读者方面,自然要求具备理工科大学本科的数学基础,和读书时自己主动思索与推导的习惯。

“非线性科学丛书”的成功,取决于读者和作者的支持。我们衷心欢迎批评和建议。

郝柏林

1992年4月30日于北京中关村

前 言

准晶体的实验发现，被认为是固体物理学近几十年来的一项重大突破。约二百年来，物理学家一直认为固态物质可分为晶态和非晶态（玻璃态）两大类。当用 X 射线照射固态物质时，只有晶体才会产生明锐的布喇格衍射斑纹。这是由于原子在晶体中的周期排列使得衍射束具有高度的相干性，导致出现很强的衍射峰。而非晶态物质只能产生弥散的较弱的衍射谱。晶体的周期性或长程平移不变性的直接结果，是在晶体中不能存在 5 次及大于 6 次的旋转对称性。这一禁戒的直观几何表述方式是：我们不能用正五边形铺满整个平面而不留间隙，也不能用具有 5 次旋转对称轴的正多面体不留间隙地铺满三维空间。

可是，1984 年的一项实验发现，却戏剧性地改变了我们的上述传统观念。美国国家标准局谢其曼 (D. Shechtman) 等人在致力于寻找一种新的更轻更强的铝合金时，意外地发现了一种 Al-Mn 合金具有明锐的二十面体对称性衍射峰。有人把这一发现看作是固体结构在布喇格衍射实验之后的最大突破。我国郭可信研究组亦几乎同时独立地发现 Ti-V-Ni 急冷合金具有二十面体对称性。经过十几年的努力，现已发现，准晶态广泛地存在于许许多多类型的多元合金之中。

准晶体的发现，一方面极大地深化了我们对晶体学、衍射物理和凝聚态物理的认识，另一方面，准晶体的各种独特性质

使准晶体具有潜在的应用价值. 因而, 自 1984 年准晶结构被实验发现以后, 国际国内均曾形成一个准晶体研究的高潮.

准晶物理的研究内容十分广泛. 原则上, 晶态和非晶态物理所涉及的各个方面, 都是准晶物理的研究内容. 因而, 不可能在本书有限的篇幅内, 对准晶物理作面面俱到的叙述. 从目前来看, 在准晶物性理论研究方面的主要和成熟的工作均集中在低维准晶的电子和声子性质上, 因此我们将着重介绍迄今为止国内外学术界在这方面的研究成果. 至于在其他物理性质方面的工作, 有兴趣的读者可参阅本书所列文献.

本书内容安排如下: 在第 1 章中, 介绍准晶体的构造方法, 包括匹配拼砌法, 高维投影法, 广义对偶法和自相似变换法. 第 2 章介绍准晶的点阵模型, 从一维菲波那契序列、广义菲波那契序列到菲波那契类序列. 还将介绍三元准周期模型和图厄 - 莫尔斯模型. 二维准晶模型包括彭罗斯 5 次、8 次、10 次和 12 次旋转对称点阵. 从第 3 章开始, 介绍准晶体的研究方法和物理性质. 第 3 章结合菲波那契模型介绍研究一维准晶的 KKT 重整化群方法、多分形分析法、分解 - 消元方法以及格林函数重整化群方法. 第 4 章至第 7 章依次介绍菲波那契类准晶、广义菲波那契模型、三元准周期模型以及图厄 - 莫尔斯模型的物理性质. 第 8 章讨论电子能谱和电子态局域性的有关问题. 第 9 章介绍二维彭罗斯准晶的物理性质. 最后, 在第 10 章, 对准晶物理研究作一展望. 我们希望本书会是一本对读者有用的书.

作者所在的华南理工大学准晶研究组已有十年以上的研究历史, 书中许多内容都是他们的研究成果. 除作者外, 先后参加这项工作的还有马鹏辉博士、黄秀清博士、郑大昉博士、邓

文基博士、蔡敏博士、刘正猷博士、杨湘波硕士、王仕忠硕士等。本书在某种意义上是这个集体的研究工作的结晶。此外，本书在成书过程中得到黄秀清博士、杨湘波硕士的许多帮助，作者对他们和研究组其他成员表示由衷的感谢。

在这里我们应该指出，在本书的许多内容及课题的研究中存在严格解析解和数值解两种方法。前者往往用很高深的数学(如数论，法国数学物理学家 J.Bellissard 等人可作为代表)，而后者则主要基于物理原理，根据问题的物理性质来进行物理分析和数值计算。我们基本上是工作于后一种方式。它很依赖于物理直觉，许多问题先是从物理上感觉到规律的存在，然后用推导及计算来找到它。典型的例子如能隙标记定理的发现，我们用物理图象清晰的分解-消元法证明了它，在论文发表后才知道，几乎同时平行地 J.Bellissard 等人用数论方法严格地证明这个定理的存在。非波那契类结构的存在也是先猜测，然后再找出的。做模型理论的人大概都有这种“凭着感觉走”的经历。一旦猜测变成现实，所得出的规律或图象出现在笔下或屏幕上时，那种兴奋难以名之。

爱因斯坦经常引用某哲人的话“真理的追求比真理的占有更可贵”，崇尚一种求真的精神。这亦应该是科学工作者的一种职业精神。不追求真理还算是科学工作者吗？但许多现象应该引起我们的警惕。且不论那种剽窃、抄袭等劣行，一个计算程序修修改改出十篇八篇物理内容雷同的文章不但是自欺欺人，实质上也是在浪费自己的科学生命。问君能有几多岁月？黄昆先生曾说过，做研究要解决物理问题。确实言简而意赅，值得我国中青年物理学工作者共勉。

整个研究工作曾先后受到国家自然科学基金重大项目“准

晶结构与性能”(1989~1991), 重点项目 “准晶结构与物性研究” (1992~1995), 国家科委 “八五攀登计划” 子课题 “准晶理论” (1992~1996) 的资助, 在此一并致谢.

刘有延 傅秀军

1998 年 8 月于广州 华南理工大学

Abstract

Since the experimental discovery of quasicrystals in 1984, this new kind of materials has attracted much attention and has been extensively studied. In this book, basic theories on quasicrystals and main results obtained in the past decade are introduced, including the construction methods, lattice models, research approaches and their distinctive physical properties.

目 录

非线性科学丛书出版说明

前 言

第 1 章 准晶体的构造方法	1
§1 匹配拼砌法	4
§2 高维投影法	5
§3 广义对偶法	10
§3.1 基本原理	10
§3.2 彭罗斯局域同构类	12
§4 自相似变换法	16
§4.1 二维彭罗斯拼砌	16
§4.2 一维情形下的替代和迭代法	20
第 2 章 准晶的点阵模型	23
§5 一维准晶模型	24
§5.1 准周期性与自相似性	24
§5.2 广义菲波那契序列	27
§5.3 菲波那契类序列	30
§5.4 三元准周期模型	33
§5.5 图厄 - 莫尔斯模型	34
§6 彭罗斯以外的二维准晶模型	36
第 3 章 菲波那契准晶的电子性质及理论方法	39
§7 迁移模型和座模型	39
§8 KKT 重整化群方法	41
§9 多分形分析法	46
§10 分解 - 消元法	51

§ 10.1	能谱结构	52
§ 10.2	能隙标记性质	58
§ 11	格林函数重整化群方法	65
第 4 章	菲波那契类准晶的物理性质	69
§ 12	电子能谱的自相似性	69
§ 13	能隙标记性质	74
§ 14	波函数多分形性质	78
§ 15	光透射性质	80
第 5 章	广义菲波那契模型的物理性质	88
§ 16	动力学映射、能谱和波函数	88
§ 17	孪生子模型	94
§ 17.1	无限多扩展态的存在性	94
§ 17.2	迁移率边的套层结构	98
第 6 章	三元准周期模型的物理性质	106
§ 18	多分形的能谱结构	106
§ 19	迁移矩阵的赝七循环	111
第 7 章	图厄 - 莫尔斯模型的电子性质	115
§ 20	图厄 - 莫尔斯模型的电子性质	115
第 8 章	电子能谱和电子态局域性的讨论	120
§ 21	能谱的类型及电子态局域性的严格解	122
§ 22	数值计算结果的讨论	127
§ 23	准周期系统的透射态	130
§ 24	准周期结构与能谱和局域性的关系	136
第 9 章	二维彭罗斯准晶的物理性质	139
§ 25	彭罗斯晶格的电子结构	139
§ 26	电子态的局域性	143
§ 27	包含多近邻相互作用的电子性质	146
§ 28	二维准晶的晶格振动	153

第 10 章 准晶物理性质研究展望	160
参考文献	165

Contents

Preface

Chapter 1 Construction methods of quasicrystals

.....	1
§ 1 Matching and tiling method	4
§ 2 High-dimensional projection method	5
§ 3 Generalized dual method	10
§ 3.1 Basic principles	10
§ 3.2 Penrose local isomorphic class	12
§ 4 Deflation-Inflation method	16
§ 4.1 Two-dimensional Penrose tilings	16
§ 4.2 Substitution and iteration methods in one-dimensional cases	20

Chapter 2 Lattice models of quasicrystals.....23

§ 5 One-dimensional models	24
§ 5.1 Quasiperiodicity and self-similarity	24
§ 5.2 Generalized Fibonacci sequences	27
§ 5.3 Fibonacci-class sequences	30
§ 5.4 Three-tile quasilattice	33
§ 5.5 Thue-Morse model	34
§ 6 Other two-dimensional quasicrystal models	36

Chapter 3 Electronic properties of Fibonacci

quasilattice and theoretical approaches	39
§ 7 Transfer model and on-site model	39
§ 8 KKT renormalization-group method	41
§ 9 Multifractal analysis	46
§ 10 Decomposition-decimation method	51

§ 10.1 Spectral structures	52
§ 10.2 Gap-labeling properties	58
§ 11 Renormalization-group approach for Green's function	65
Chapter 4 Physical properties of Fibonacci-class	
quasilattices	69
§ 12 Self-similarity of the electronic energy spectra	69
§ 13 Gap-labeling properties	74
§ 14 Multifractal properties of wavefunctions	78
§ 15 Transmission properties of light	80
Chapter 5 Physical properties of generalized	
Fibonacci quasilattices	88
§ 16 Dynamical map, energy spectra and wave- functions	88
§ 17 The Twins model	94
§ 17.1 Existence of infinite number of extended states	94
§ 17.2 Hierarchical mobility edges	98
Chapter 6 Physical properties of the three-tile	
quasiperiodic model	106
§ 18 Multifractal energy spectrum	106
§ 19 Pseudo-seven cycle of transfer matrices	111
Chapter 7 Electronic properties of Thue-Morse	
model	115
§ 20 Electronic properties of Thue-Morse model	115
Chapter 8 Discussion on the electronic spectra	
and localization of electronic states	120
§ 21 Rigorous results on the spectral type and localization of electronic states	122
§ 22 Discussion on numerical results	127
§ 23 Transparent states in quasiperiodic systems	130