

按斐波那契类准周期序列排列的铁电畴超晶格 二次谐波谱峰性质研究*

杨湘波

(广东工业大学数理系物理教研室, 广州 510090)
(1999 年 4 月 29 日收到; 1999 年 8 月 14 日收到修改稿)

在简介斐波那契类(Fibonacci-class)准晶($FC(n)$)的特征基础上,在小信号、平面波近似下详细地研究了通过 N 层按斐波那契类准周期序列排布的铁电畴超晶格的二次谐波光场的谱性质.发现其谱的极强峰在实空间,在不考虑介质色散效应的情况下,具有完美的自相似性.对于具有线性色散效应的铁电晶体,其谱在实空间也具有相同的结论,而对于具有非线性色散效应的铁电介质,极强峰的这种自相似性将被破坏.另外,二次谐波光的暗线处将存在缺级效应,亮线处则无缺级效应.

PACC: 7890; 4290

1 引 言

自从 Shechtman 等人^[1]于 1984 年在实验上发现准晶这种固体物质的第三种形态以来,到现在已有十五年了.其间,数学家们、物理学家们对准晶的电子性质、光学性质、磁学性质等进行了广泛而深入的研究,并逐步从对其理论结构性质的研究转到相应的实验材料性能的研究上来.

斐波那契(Fibonacci)准晶由于其结构具有丰富的物理内容,包含了准晶的一些最主要的性质,更主要的是由于其具有相对简单的特点,所以一直倍受人们青睐.在一维斐波那契准晶的研究方面,Merlin 等人^[2]于 1985 年报道了由 GaAs 和 AlAs 两种材料构成的按斐波那契准周期序列排布的超晶格系统 X 射线及拉曼散射谱性质的研究结果. Tamura 及 Wolfe^[3]在 1987 年从理论上研究了声光通过一种实际的按斐波那契序列排布的准周期超晶格系统的谱性质.随后朱永元、闵乃本等人^[4,5]研究了按斐波那契准周期序列排布的声学超晶格的超声波谱、光学超晶格的二次谐波谱的性质,并于近期利用 LiTaO_3 材料从实验上^[6]测量了该超晶格的准相位匹配二次谐波谱及其能量转化系数.

在斐波那契准晶和互生长模型^[7]准晶研究成

果的基础上,傅秀军、刘有延等人^[8]于 1997 年构造了一种包括一维斐波那契准晶链模型($FC(1)$)和互生长模型($FC(2)$)在内的一类能用严格的高维投影法得到的准晶模型($FC(n)$),即一维斐波那契类准晶(Fibonacci-class quasilattices).

由于 $FC(1)$ 准晶与 $FC(n)$ 准晶在结构特征上的这种特殊性与普遍性的密切关系,因此按 $FC(n)$ 准周期序列排列的铁电畴光学超晶格系统将具有什么样的二次谐波谱性质?它与 $FC(1)$ 的有何区别与联系?本文简介了一维 $FC(n)$ 准晶的结构特征,严格解析地分析了通过该系统的二次谐波光场的函数关系,讨论了二次谐波谱的极强亮线的自相似性规律,研究了二次谐波谱的缺级效应.

2 间接投影法构造的 $FC(n)$ 结构特征

傅秀军、刘有延等人^[8]用直接投影法构造的一维斐波那契类准晶($FC(n)$)各个原子的位置到原点的距离为

$$L_N = N \cos \theta + \sin \theta \lfloor N \tan \theta \rfloor, \quad (1)$$

其中 ' $\lfloor x \rfloor$ ' 表示对实数 x 的最大整数, θ 为投影角, N 为原子序数,且 θ 满足

*广东省高教厅基金(批准号:990045)资助的课题.

$$\sigma_n = \tan\theta = \frac{1}{2}(\sqrt{n^2+4} - n) = \frac{1}{n + \frac{1}{n + \frac{1}{n + \dots}}}, \quad (2)$$

σ_n 是方程

$$x^2 + nx - 1 = 0 \quad (3)$$

的正根. 由此法得到的准晶链与用生成法则为

$$B \rightarrow B^{n-1}A, A \rightarrow B^{n-1}AB, \quad (4)$$

生成的准晶链是一致的, 皆为

$$S_1 = B,$$

$$S_2 = B^{n-1}A,$$

$$S_3 = \underbrace{(B^{n-1}A)(B^{n-1}A)\dots(B^{n-1}A)}_{n-1} B^{n-1}AB,$$

$$S_h = S_{h-1}^n S_{h-2} \quad (h \geq 3), \quad (5)$$

其中 h 为 $FC(n)$ 的代数.

采用间接投影法, 使得各个原子的位置到原点的距离为

$$x_N = N + \frac{1}{\varphi_n} \left[\frac{N}{\varphi_n} \right], \quad (6)$$

其中

$$\varphi_n = \frac{1}{\sigma_n} = \frac{\sqrt{n^2+4} + n}{2} \quad (7)$$

是方程

$$x^2 - nx - 1 = 0 \quad (8)$$

的正根.

一方面为了研究问题的方便; 另一方面也由于每种准晶格的性质主要取决于晶格原子的排布序列, 而不取决于原子的大小(对于一维准晶格而言, 即“原子”线段的长度)故我们对上述方法中生成的 A, B “原子链”长度进行归一化处理, 从而使得长、短线段的长度之比为

$$\frac{l_A}{l_B} = \varphi_n, \quad (9)$$

而其生长规则与(4)式相同.

3 二次谐波的光电场 E_2

在小信号、平面波近似条件下, 当单束激光束照射在按斐波那契类准周期序列排布的铁电畴表面时, 基波光电场 E_1 和二次谐波光电场 E_2 将满足

$$\frac{dE_2(x)}{dx} = \frac{-i32\pi\omega^2}{k^2\omega_c^2\Delta k} d(x) E_1^2 e^{i(k^{2\omega} - 2k^\omega)x}, \quad (10)$$

其中

$$d(x) = \begin{cases} d_{33}(\text{正畴}); \\ -d_{33}(\text{负畴}), \end{cases} \quad (11)$$

ω 为基频波的圆频率, 2ω 为二次谐波的圆频率, k^ω 为基频波波数, $k^{2\omega}$ 为二次谐波的波数, c 为真空中的光速.

由(10)式可知, 二次谐波光场通过 N 层按 $FC(n)$ 准周期序列排布的铁电畴系统之后将变为

$$E_2(N) = \frac{-64\pi\omega^2}{k^2\omega_c^2\Delta k} d_{33} E_1^2 \left(\sum_{j=0} e^{i\Delta k x_{2j+1}} - \sum_{j=0} e^{i\Delta k x_{2j}} \right), \quad (12)$$

其中

$$\Delta k = k^{2\omega} - 2k^\omega. \quad (13)$$

一般地

$$|\Delta k| = |k^{2\omega} - 2k^\omega| = \frac{4\pi}{\lambda} (n_2 \cos\theta_2 - n_1 \cos\theta_1)^{[9]}, \quad (14)$$

其中 n_2 为介质对二次谐波光的折射率, n_1 为介质对基频光波的折射率, θ_2 为二次谐波光的折射角, θ_1 为基频光波的折射角, λ 为基频光在真空中的波长. 特殊情形下, 垂直入射时, $\theta_2 = \theta_1 = 0$, 则

$$\Delta k = |\Delta k| = |k^{2\omega} - 2k^\omega| = \frac{4\pi}{\lambda} (n_2 - n_1). \quad (15)$$

由 Pokrovsky 等人^[10]的研究结果可知

$$x = \lfloor x \rfloor + \{x\}, \quad (16)$$

其中 $\{x\}$ 为 x 的小数部分, 则

$$\lfloor x \rfloor = x - \{x\}, \quad (17)$$

由(6)(17)两式可得

$$x_N = N + \frac{1}{\varphi_n} \left(\frac{N}{\varphi_n} - \left\{ \frac{N}{\varphi_n} \right\} \right),$$

即

$$x_N = N \left(1 + \frac{1}{\varphi_n^2} \right) - \frac{1}{\varphi_n} \left\{ N \frac{1}{\varphi_n} \right\}. \quad (18)$$

又由(7)式可得

$$\varphi_n \left(1 + \frac{1}{\varphi_n^2} \right) = \sqrt{n^2 + 4},$$

即

$$\frac{1}{\varphi_n} = \frac{1 + \frac{1}{\varphi_n^2}}{\sqrt{n^2 + 4}}. \quad (19)$$

(19)式代入(18)式可得

$$x_N = N \left(1 + \frac{1}{\varphi_n^2} \right) - \frac{1}{\varphi_n} \left\{ N \left(1 + \frac{1}{\varphi_n^2} \right) \right\} \left[\frac{1}{\sqrt{n^2 + 4}} \right]$$

$$= Nf(\varphi_n) + g[Nf(\varphi_n)], \quad (20)$$

其中

$$f(x) = 1 + \frac{1}{x^2}, \quad g(x) = -\frac{1}{\varphi_n} \left\{ \frac{x}{\sqrt{n^2 + 4}} \right\} \quad (21)$$

则原子位置由(20)式确定的晶格在倒空间的傅里叶变换式,即其布拉格衍射峰的位置由下式的波数 k 决定^[10-12]

$$k_{pq} \equiv \frac{2\pi}{1 + \frac{1}{\varphi_n^2}} \left(p + \frac{q}{\varphi_n} \right), \quad (22)$$

或

$$k_{pq} \equiv \frac{2\pi(q + p\varphi_n)}{\varphi_n + \frac{1}{\varphi_n}}, \quad (23)$$

其中 p 和 q 为任意整数.

由于二次谐波光场的所有性质只决定于该铁电畴系统的畴的排布序列,而与其各畴层的绝对厚度尺寸无关,只与两种畴层的相对厚度尺寸有关,故可令

$$D = \varphi_n + \frac{1}{\varphi_n} = \varphi_n l_A + l_B, \quad (24)$$

其中畴层的厚度为^[5]

$$\begin{aligned} l_A &= l_{A1} + l_{A2} = l + l(1 + \eta) = l(2 + \eta), \\ l_B &= l_{B1} + l_{B2} = l + l(1 - \varphi_n \eta) = l(2 - \varphi_n \eta), \end{aligned} \quad (25)$$

如图 1、图 2 所示,则

$$D = \varphi_n l(2 + \eta) + l(2 - \varphi_n \eta) = 2l(1 + \varphi_n), \quad (26)$$

其中 l 为结构参量厚度,根据实验需要,其绝对数值可以改变; η 为结构序列调整参量,可根据系统的序列性质需要适当调整.本系统的序列性质由于(24)式的限定,故

$$\frac{l_A}{l_B} = \frac{l(2 + \eta)}{l(2 - \varphi_n \eta)} = \varphi_n, \quad (27-1)$$

则

$$\eta = \frac{\varphi_n - 1}{1 + \varphi_n^2} = \frac{3\sqrt{n^2 + 4} + n - 6}{2n + 3}. \quad (27)$$

由(24)式代入(23)式可得

$$k_{pq} \equiv \frac{2\pi(q + p\varphi_n)}{D}. \quad (28)$$

由(18)式与(22)式可得

$$ik_{pq}x_N = i2\pi \left(p + \frac{q}{\varphi_n} \right) N - ik_{pq} \frac{1}{\varphi_n} \left\{ \frac{N}{\varphi_n} \right\}, \quad (29)$$

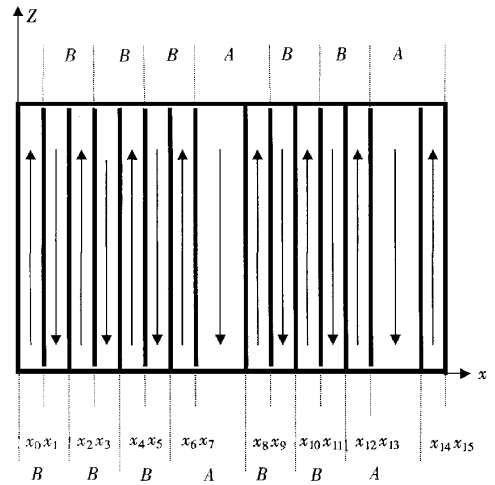


图 1 按斐波那契类中的 FCC(3) 准周期序列排布的铌酸锂铁电畴超晶格系统(箭头表示铁电畴的自发极化方向; x 表示光电场的传播方向; x_i 表示各铁电畴畴壁沿 x 方向的位置坐标)

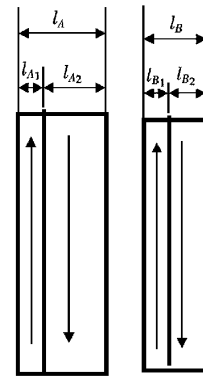


图 2 该准周期铁电畴超晶格系统的两种结构单元示意图(A 单元和 B 单元皆由正、负铁电畴层所组成,其畴层厚度及厚度所满足的关系式见(25)式(27-1)式)

则

$$e^{ik_{pq}x_N} = e^{i2\pi \left(p + \frac{q}{\varphi_n} \right) N} e^{i2\pi q \frac{k_{pq}}{\varphi_n} \left\{ \frac{N}{\varphi_n} \right\}}, \quad (30)$$

第一个因子的值为 1,第二个因子的值属于 $[0, iX_{pq}]$ 其中

$$X_{pq} \equiv 2\pi q - \frac{k_{pq}}{\varphi_n}. \quad (31)$$

由于

$$0 \leq \left\{ \frac{N}{\varphi_n} \right\} < 1, \quad (32)$$

由(30)式和(32)式可推出

$$\begin{aligned}
 I(k_{pq}) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\sum_{j=0}^N e^{ik_{pq}x_j} \right) = \frac{1}{X_{pq}} \int_0^{X_{pq}} e^{iy} dy = \frac{e^{iX_{pq}} - 1}{iX_{pq}} \\
 &= \frac{\sin\left(\frac{X_{pq}}{2}\right)}{\left(\frac{X_{pq}}{2}\right)} e^{\frac{iX_{pq}}{2}} = \frac{\sin Y_{pq}}{Y_{pq}} e^{iY_{pq}}, \quad (33)
 \end{aligned}$$

其中

$$Y_{pq} \equiv \pi q - \frac{k_{pq}}{2\varphi_n} = \frac{\pi\varphi_n}{1+\varphi_n} (q\varphi_n - p), \quad (34)$$

则对于有限个原子的 $FC(n)$ 系统

$$I(k) = \sum_{j=0} e^{ikx_j} \approx \sum_{pq} e^{iY_{pq}} \frac{\sin Y_{pq}}{Y_{pq}} \delta(k - k_{pq}), \quad (35)$$

由(35)式即可得出

$$I(x_{2j+1}) = \sum_{j=0} e^{ikx_{2j+1}} \approx \sum_{pq} e^{iY_{pq}} \frac{\sin Y_{pq}}{Y_{pq}} \delta(k - k_{pq}). \quad (36)$$

由图 1 可知

$$x_{2j} = x_{2j+1} - l_{A1} = x_{2j+1} - l, \quad (37)$$

所以

$$I(x_{2j}) = \sum_{j=0} e^{ikx_{2j}} = \sum_{j=0} e^{ikx_{2j+1}} e^{-ikl} = e^{-ikl} I(x_{2j+1}). \quad (38)$$

由(36)式和(38)式可得

$$\begin{aligned}
 I(x_{2j+1}) - I(x_{2j}) &= I(x_{2j+1}) (1 - e^{-ikl}) \\
 &= I(x_{2j+1}) 2 \sin\left(\frac{kl}{2}\right) e^{i\frac{\pi-k l}{2}}, \quad (39)
 \end{aligned}$$

将(36)式和(39)式代入(12)式可得

$$\begin{aligned}
 E_2(N) &\approx \frac{-128\pi\omega^2}{k^2\omega_c^2\Delta k} d_{33} E_1 e^{i\frac{\pi-\Delta k l}{2}} \sin\left(\frac{\Delta k l}{2}\right) \\
 &\cdot \sum_{pq} e^{iY_{pq}} \frac{\sin Y_{pq}}{Y_{pq}} \delta(\Delta k - k_{pq}), \quad (40)
 \end{aligned}$$

这就是严格解析得出的从该准周期铁电畴超晶格系统出射的二次谐波光场的函数表达式。

4 二次谐波谱的极强亮线的自相似性

由(40)式的二次谐波光场函数式可以看出,由于 δ 函数的限制作用,使得二次谐波光场的峰值(亮线)出现在

$$\Delta k = k_{pq} \equiv \frac{2\pi(q + p\varphi_n)}{D} = \frac{\pi(q + p\varphi_n)}{l(1 + \varphi_n)} \quad (41)$$

的地方。由(40)式可知,二次谐波光场 E_2 的极大峰值(极强谱线)出现在

$$Y_{pq} = \frac{\pi\varphi_n}{1 + \varphi_n} (q\varphi_n - p) \rightarrow 0^\pm \Rightarrow \frac{p}{q} \rightarrow \varphi_n \quad (42)$$

处。和斐波那契准晶格相类似,由傅秀军等人^[8]的研究结果知道,对于所有的自然数 p 和 q ,只有当它们分别为相邻两代的斐波那契类准晶格的原子序数时,其比值 p/q 才是最接近于无理数 φ_n 的值的有理数近似。即此时

$$\begin{aligned}
 (p, q) &= (FC(n)_h, FC(n)_{h-1}) (h \geq 2), \\
 \text{初始值 } (FC(n)_2, FC(n)_1) &= (n, 1), \quad (43)
 \end{aligned}$$

其中 h 为用生成法得到的 $FC(n)$ 准晶格链的原子数为 p 的代数。

由上述讨论知道,二次谐波光场的极大峰值(极强亮线)出现在同时满足(41)式和(43)式的地方。

在实空间,考虑结构参量厚度与二次谐波谱峰的关系时,即考虑给定波长 λ_0 的基频光,则相应的基频光和二次谐波光的折射率 n_1 和 n_2 皆保持不变。例如,对于 LiNbO_3 晶体,在室温时,对于波长 $\lambda_0 = 1.318 \mu\text{m}$ 的基频光,则相应的基频光和二次谐波光的折射率分别为

$$n_1 = 2.1453, n_2 = 2.1970 (\lambda_0 = 1.318 \mu\text{m}), \quad (44)$$

由(15)式和(41)式可得

$$(\Delta k)_{pq} = \frac{\pi(q + p\varphi_n)}{l(1 + \varphi_n)} = \frac{4\pi}{\lambda_0} (n_{20} - n_{10}),$$

即

$$l_{pq} = \frac{\lambda_0(q + p\varphi_n)}{4(n_{20} - n_{10})(1 + \varphi_n)}. \quad (45)$$

对于二次谐波光场的极大峰值(极强亮线)由(43)式可以推出

$$q + p\varphi_n = \varphi_n^h (h \geq 2), \quad (46)$$

其中 h 为用生成法得到的 $FC(n)$ 准晶格链的原子数为 q 的代数。则(46)式代入(45)式可求出二次谐波光的极大峰值(极强亮线)处的结构参量厚度满足

$$l_{pq} = \frac{\lambda_0 \varphi_n^h}{4(n_{20} - n_{10})(1 + \varphi_n)} = l_n \quad (h \geq 2). \quad (47)$$

(47)式的结果在 $n=1$, 即对于斐波那契准周期超晶格系统 $FC(1)$ 的情形与文献[2,5]的相应结果很不一致,而与文献[3]的相应结果相似。

由(47)式可以证明

$$l_h + nl_{h+1} = l_{h+2} \quad (h \geq 2), \quad (48)$$

显示出二次谐波光的极大峰值(极强亮线)以结构参

量厚度为变量时在实空间的自相似特性.

在倒空间考虑到色散效应对二次谐波谱的影响, 则

$$l_h + nl_{h+1} \neq l_{h+2} \quad (h \geq 2), \quad (49)$$

或

$$\left(\frac{1}{\lambda}\right)_h + n\left(\frac{1}{\lambda}\right)_{h+1} \neq \left(\frac{1}{\lambda}\right)_{h+2} \quad (h \geq 2) \quad (50)$$

故此类情形下的二次谐波光场的极大峰值(极强亮线)的自相似性被破坏.

5 二次谐波谱的缺级效应

由(40)式可知, 二次谐波光场的振幅由于正弦因子 $\sin(\Delta kl/2)$ 的调制作用, 当 $\sin\left(\frac{\Delta kl}{2}\right) = 0$ 即

$$\frac{\Delta kl}{2} = m\pi \quad (51)$$

时, 原有的二次谐波光谱线将缺级, 其式中的 m 为整数. 由(51)式和(41)式可知缺级效应发生的条件为

$$\Delta k = \frac{2\pi m}{l} = \frac{2\pi(q + p\varphi_n)}{2l(1 + \varphi_n)},$$

即

$$q + p\varphi_n = 2m(1 + \varphi_n). \quad (52)$$

对于任意整数 m 和任意大于等于 2 的正整数 h 而言, 方程

$$2m(1 + \varphi_n) = \varphi_n^h \quad (53)$$

无解, 故由(53)式(52)式和(46)式可知, 满足条件(53)式的二次谐波光谱的缺级效应只发生在其较弱的峰值(暗线)处, 而不会发生在其极大峰值(亮线)处.

6 结 论

本文首先简介了用间接投影法生成的斐波那契类准晶 $(FQ(n))$ 的基本结构特征. 然后在小信号、平面波近似的条件下详细地研究了通过 N 层按斐波那契类准周期系列排布的铁电畴超晶格系统的二次谐波光场, 并得到其严格的解析函数式. 接着, 利用其解析式的 δ 函数和正弦函数的调制作用, 详尽地研究了二次谐波光的谱性质. 发现其谱的极强峰在实空间, 具有完美的自相似性; 当考虑色散效应时极强峰的这种自相似性将被破坏. 另外, 二次谐波光的暗线处将存在缺级效应, 亮线处则无缺级效应.

- [1] D. S. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984), 1951.
- [2] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F. Y. Juang, P. K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985), 1768.
- [3] S. Tamura, J. P. Wolfe, *Phys. Rev.* **B36** (1987), 3491.
- [4] Y. Y. Zhu, N. B. Ming, W. H. Jiang, *Phys. Rev.* **B40** (1989), 8536.
- [5] Y. Y. Zhu, N. B. Ming, *Phys. Rev.* **B42** (1990), 3676.
- [6] S. N. Zhu, Y. Y. Zhu, Y. Q. Qin, H. F. Wang, C. Z. Ge, N. B. Ming, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997), 2752.
- [7] X. Q. Huang, Y. Y. Liu, D. Mo, *Solid State Commun.* **87** (1993), 601.
- [8] X. J. Fu, Y. Y. Liu, P. Q. Zhou, W. Sritrakool, *Phys. Rev.* **B55** (1997), 5555.
- [9] F. T. Arecchi, E. O. Schulz-Du Bois, *Laser Handbook* (North-Holland, 1972) p. 42.
- [10] V. L. Pokrovsky, A. L. Talapov, *Theory of Incommensurate Crystals*, Soviet Science Reviews, Harwood Academic, Chur, Switzerland (1985).
- [11] P. Bak, *Rep. Prog. Phys.* **45** (1981), 587.
- [12] D. Levine, P. J. Steinhardt, *Phys. Rev.* **B34** (1986), 596.

THE STUDIES ON THE PROPERTIES OF THE SPECTRAL PEAKS FOR THE SECOND HARMONIC LIGHT THROUGH THE FERROELECTRIC DOMAINS CONSTRUCTED FOLLOWING THE FIBONACCI-CLASS QUASILATTICE SEQUENCE^{*}

YANG XIANG-BO

(*Physics Group ,Department of Mathematics and Physics ,Guangdong University of Technology ,Guangzhou 510090 ,China*)

(Received 29 April 1999 ; revised manuscript received 14 August 1999)

ABSTRACT

On the basis of a brief presentation of the characteristic for the Fibonacci-class quasilattices ($FC(n)$), the properties of the spectra were studied for the second harmonic light (SHL) through the N layers ferroelectric superlattices constructed following $FC(n)$ by means of the small-signal approximation. It was found that in the real space there existed perfect self-similarity for the most intense spectral peaks of SHL. On the other hand, the self-similarity for the spectra will be broken if the refractive dispersion is taken into account. The effect of vacancies which was valid only for the SHL's dim spectra lines but invalid for the bright ones is also discussed.

PACC : 7890 ; 4290

^{*}Project supported by the Advanced Education Department of Guangdong Province Science Foundation (Grant No. 990045) China.