

广义的一维 Fibonacci 结构*

胡 安 蒋树声 彭茹雯 张春生 冯 端

南京大学固体微结构物理国家实验室, 南京, 210008

1991 年 2 月 12 日收到

本文提出一维 k 组元的 Fibonacci 结构。它包含 k 个无公度的基本长度, 是具有两个基本长度的标准 Fibonacci 结构的自然推广。投影理论被用来处理它的 X 射线衍射花样及其指标化问题。理论模拟被用于验证投影理论的结果。值得注意的是, 对于有限的链长, 当 k 足够大时, 它的衍射谱将趋于混沌。

PACC: 6100; 6865; 6110

一、引 言

近年来, 人们对一维准周期系统怀有浓厚的兴趣, 并做了大量的理论和实验研究工作^[1-7]。在理论方面, 兴趣主要来源于这样一个事实: 尽管准晶是完全有序的, 但它不具有平移对称性, 因而 Bloch 定理不能应用。在某种程度上, 它是介于周期性和无序系统之间的一种结构, 其能谱具有多分形性和自相似性, 即为一 Cantor 集合。在实验方面, 薄膜技术的进步使得人工制备一维准周期超晶格成为可能。由于制备准周期超晶格比生长适合于物性研究的大块准晶体要容易得多, 而且生长参数和序列可以人为地选择, 因此在准晶物理性质的研究中, 准周期超晶格起了很重要的作用。1985 年 Merlin 等人^[4]首次报道制备了准周期 (Fibonacci) GaAs-AlAs 异质结构, 并完成了 X 射线衍射和光散射研究。标准的 Fibonacci 序列可由迭代规则 $A \rightarrow AB$ 和 $B \rightarrow A$ 得到, 其中两个无公度的基本长度之比 d_A/d_B 恰是黄金分割数 $\tau = \sqrt{5} + 1/2$ 。继 Merlin 之后, 报道了许多关于准周期超晶格的实验工作。但据我们所知, 迄今大多数工作都是基于 Fibonacci 序列, 而只有少数实验是基于非 Fibonacci 结构的, 例如 Thue-Morse 超晶格^[8], 其增殖的迭代规则是 $A \rightarrow AB$ 和 $B \rightarrow BA$, 它属于一种所谓的自动序列。在某种意义上, 这种结构介于准周期和无序之间。最近 Birch 等人^[9]报道了一种由迭代规则 $A \rightarrow A^m B$ 和 $B \rightarrow A$ 产生的准周期超晶格, 其中 m 为整数。但是, 所有上述结构都只包含两个基本长度单元 d_A 和 d_B 。本文提出包含 k 个基本长度单元的一维 k 组元 Fibonacci 结构, 并用投影理论对其衍射问题作了解析处理。这种结构具有许多吸引人的优点, 因为只要适当地选择 k 的取值, 它可以是周期性的、准周期性的, 甚至是混沌的。这无疑对于理论研究和实验研究都是很有意义的。

* 国家自然科学基金资助的课题。

二、一维 k 组元 Fibonacci 点阵

为了构造一维 k 组元 Fibonacci 点阵, 首先定义 k 个基本单元 $A_1, A_2, \dots, A_k$, 对应于 k 个无公度长度 $d_1, d_2, \dots, d_k$, 然后按照迭代规律

$$A_1 \rightarrow A_1 A_k, A_k \rightarrow A_{k-1}, \dots, A_i \rightarrow A_{i-1} \dots, A_2 \rightarrow A_1, \quad (1)$$

构成一维点阵. 上述迭代规律可以用一个 $k \times k$ 的矩阵 M 表示为

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_k \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_k \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

同时, 这个序列也可以用有限代 $S^{(k)}$ 的迭代来描述:

$$\begin{cases} S^{(k)} = S^{(k)}_1 + S^{(k)}_k, \\ S^{(k)}_1 = \{A_1\}, S^{(k)}_k = \{A_1 A_2\}, \\ S^{(k)}_k = \{A_1, A_k, A_{k-1}, \dots, A_3 A_2\}. \end{cases} \quad (4)$$

假定 $|A_i|_r$ 表示 A_i 在 $S^{(k)}$ 中出现的次数, 并且定义一组比值

$$\eta_i = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{|A_i|_r}{|A_1|_r} \quad (i = 1, 2, \dots, k),$$

则可以证明这组比值 $\{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_k\}$ 满足下列方程组:

$$\begin{aligned} \eta_1^k + \eta_k &= 1, \\ 1 : \eta_k &= \eta_k : \eta_{k-1} = \dots = \eta_3 : \eta_2. \end{aligned} \quad (5)$$

很容易证明, 所有 η_i , 除 $\eta_1 = 1$ 外, 都是位于区间 $(0, 1)$ 内的无理数, 并且 η_k 恰恰是矩阵 M 的特征方程 $|\lambda I - M| = 0$ 的特征根的倒数. 对于 $k = 3$ 的情况,

$$\begin{aligned} \eta_3 &= \sqrt[3]{1/2 + 1/2\sqrt{31/27}} + \sqrt[3]{1/2 - 1/2\sqrt{31/27}}, \\ \eta_2 &= \frac{1}{3} + \sqrt[3]{29/54 + \frac{1}{2}\sqrt{31/27}} + \sqrt[3]{29/54 - \frac{1}{2}\sqrt{31/27}}, \\ \eta_1 &= 1. \end{aligned} \quad (6)$$

三、投影理论

根据投影理论, 低维准周期结构总可以看作是 高维周期结构在低维空间的投影^[10,11]. 一维 k 组元准周期点阵可以由 k 维超空间的规则周期性点阵向一维空间投影得到. 为了

表述简洁起见,先处理 $k=3$ 的情况,然后推广到任意 k 的普遍情况。

考虑三维空间中具有单位点阵参数的立方点阵,取任一格点为坐标原点,建立正交坐标系,使三个坐标轴 $x_i (i=1,2,3)$ 分别沿立方点阵的基矢方向。过原点选择一条投影

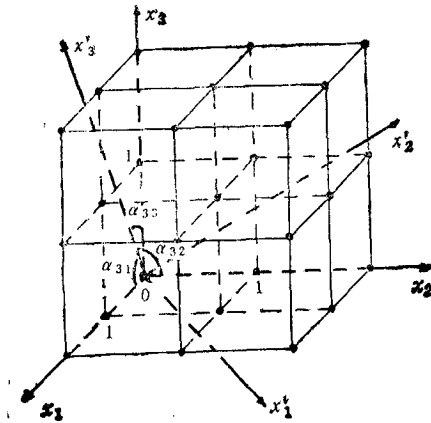


图1 一维三组元准周期结构投影示意图
 x'_3 为投影轴

轴 x'_3 , 分其正交的另外两条轴分别为 x'_1, x'_2 . x'_j 与 $x_i (i, j=1, 2, 3)$ 的夹角为 α_{ji} , 如图1所示。如果投影轴 x'_i 的方向余弦满足

$$\cos \alpha_{31} : \cos \alpha_{32} : \cos \alpha_{33} = 1 : \eta_2 : \eta_3, \quad (7)$$

那么根据有理指数定理,在投影轴上,除了坐标原点外,没有任何其它格点,而投影点的分布一定是非周期性的。三个无公度的基本长度之比满足

$$d_1 : d_2 : d_3 = \cos \alpha_{31} : \cos \alpha_{32} : \cos \alpha_{33} = 1 : \eta_2 : \eta_3. \quad (8)$$

三维立方点阵可以用点的密度函数

$$U_0(x_1, x_2, x_3)$$

表示为

$$U_0(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{8\pi^3} \sum_{n_1, n_2, n_3} \delta(x_1 - n_1) \delta(x_2 - n_2) \delta(x_3 - n_3), \quad (9)$$

其中 n_1, n_2, n_3 取所有整数。考虑围绕 x_3 的小柱体范围内格点的投影,准周期的点列可以表示为

$$Q(x'_3) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} R(x'_1, x'_2) U_0(x'_1, x'_2, x'_3) dx'_1 dx'_2, \quad (10)$$

其中投影函数

$$R(x'_1, x'_2) = \begin{cases} 1 & \text{当 } |x'_1| \leq W_0, |x'_2| \leq V_0 \\ 0 & \text{其它情况} \end{cases} \quad (11)$$

$$U_0(x'_1, x'_2, x'_3) = U_0(x'_1 \cos \alpha_{11} + x'_2 \cos \alpha_{21} + x'_3 \cos \alpha_{31}, \\ x'_1 \cos \alpha_{21} + x'_2 \cos \alpha_{22} + x'_3 \cos \alpha_{32}, \\ x'_1 \cos \alpha_{31} + x'_2 \cos \alpha_{23} + x'_3 \cos \alpha_{33}).$$

对 $Q(x'_3)$ 作傅里叶变换,可以得到相应的倒点阵。该傅里叶变换为一卷积。令 $S(p, k)$ 和 $M(x'_3, p, k)$ 分别为 R 和 U_0 的变换,则

$$Q(x'_3) = \iint dp dk S(-p, -k) M(x'_3, p, k). \quad (12)$$

它的傅里叶变换 $F(q)$ 为

$$F(q) = \iint dp dk S(-p, -k) V(q, p, k), \quad (13)$$

其中

$$V(q, p, k) = \sum \delta(k - 2\pi k_{n_1, n_2, n_3}) \delta(p - 2\pi p_{n_1, n_2, n_3}) \\ \cdot \delta(q - 2\pi q_{n_1, n_2, n_3}), \quad (14)$$

$$S(p, k) = 4 \frac{\sin pW_0 \sin kV_0}{pk}, \quad (15)$$

于是

$$F(q) = \sum S(p_{n_1 n_2 n_3}, k_{n_1 n_2 n_3}) \delta(q - q_{n_1 n_2 n_3}), \quad (16)$$

其中

$$k_{n_1 n_2 n_3} = \begin{vmatrix} n_1 \cos \alpha_{21} & \cos \alpha_{31} \\ n_2 \cos \alpha_{22} & \cos \alpha_{32} \\ n_3 \cos \alpha_{23} & \cos \alpha_{33} \end{vmatrix}, \quad (17)$$

$$p_{n_1 n_2 n_3} = \begin{vmatrix} \cos \alpha_{11} & n_1 & \cos \alpha_{31} \\ \cos \alpha_{12} & n_2 & \cos \alpha_{32} \\ \cos \alpha_{13} & n_3 & \cos \alpha_{33} \end{vmatrix}, \quad (18)$$

$$q_{n_1 n_2 n_3} = \begin{vmatrix} \cos \alpha_{11} & \cos \alpha_{21} & n_1 \\ \cos \alpha_{12} & \cos \alpha_{22} & n_2 \\ \cos \alpha_{13} & \cos \alpha_{23} & n_3 \end{vmatrix}. \quad (19)$$

另有正交条件:

$$\begin{vmatrix} \cos \alpha_{11} & \cos \alpha_{21} & \cos \alpha_{31} \\ \cos \alpha_{12} & \cos \alpha_{22} & \cos \alpha_{32} \\ \cos \alpha_{13} & \cos \alpha_{23} & \cos \alpha_{33} \end{vmatrix} = 1. \quad (20)$$

方程 (16) 表明三组元准周期结构的傅里叶变换是在倒空间位于 $q_{n_1 n_2 n_3}$ 的 δ 函数。利用 (19) 和 (20) 式可得到

$$q_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \cos \alpha_{31} + n_2 \cos \alpha_{32} + n_3 \cos \alpha_{33}. \quad (21)$$

再利用 (7) 和 (8) 式得到

$$q_{n_1 n_2 n_3} = 2\pi \bar{D}^{-1} (n_1 + n_2 \eta_2 + n_3 \eta_3), \quad (22)$$

其中平均点阵参数:

$$\begin{aligned} \bar{D} &= \frac{1}{\cos \alpha_{31}} = \frac{\cos^2 \alpha_{31} + \cos^2 \alpha_{32} + \cos^2 \alpha_{33}}{\cos \alpha_{31}} \\ &= \cos \alpha_{21} + \eta_2 \cos \alpha_{32} + \eta_3 \cos \alpha_{33} \\ &= d_1 + d_2 \eta_2 + d_3 \eta_3. \end{aligned} \quad (23)$$

于是当衍射矢量 $S = q_{n_1 n_2 n_3}$ 时, 有衍射极大。每一个衍射峰必须用三个指标去标志, 记为 $\begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix}$, 衍射强度依赖于权重因子 $S(k, p)$, 它与投影范围 W_0, V_0 有关。很容易证明, 最强峰满足

$$n_1 : n_2 : n_3 \cong 1 : \eta_2 : \eta_3. \quad (24)$$

这样最强峰的指标 $\begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix}$ 与一组广义的 Fibonacci 数 (a_n, a_{n-2}, a_{n-1}) 对应。该广义的 Fibonacci 数列 $\{a_i\}$ 满足

$$\begin{aligned} a_i &= a_{i-1} + a_{i-2}, \\ a_1 &= a_2 = 0, a_3 = 1. \end{aligned} \quad (25)$$

最强峰满足自相似性

$$q(a_{n+3}, a_{n+1}, a_{n+2}) = q(a_{n+2}, a_n, a_{n+1}) + q(a_n, a_{n-2}, a_{n-1}). \quad (26)$$

上述结果很容易推广到普遍的一维 k 组元准周期结构, 即

1. 一维 k 组元准周期结构可以由一个 k 维超空间的规则周期结构向一维空间投影得到, 只要投影轴的方向余弦满足

$$\cos \alpha_{k_1} : \cos \alpha_{k_2} : \cdots : \cos \alpha_{k_k} = 1 : \eta_2 : \eta_3 : \cdots : \eta_k, \quad (27)$$

它的 k 个无公度的基本长度满足

$$d_1 : d_2 : \cdots : d_k = 1 : \eta_2 : \eta_3 : \cdots : \eta_k. \quad (28)$$

2. 一维 k 组元 Fibonacci 点阵的傅里叶变换是在倒空间位于

$$q(n_1, n_2, \cdots, n_k) = 2\pi \bar{D}^{-1} \sum_{i=1}^k n_i \eta_i \quad (29)$$

的 δ 函数, 其中平均晶格参数 $\bar{D} = \sum_{i=1}^k \eta_i d_i$.

3. 每一个衍射峰必须用 k 个指标 $(n_1, n_2, \cdots, n_k)$ 标志, 最强峰的指标满足

$$n_1 : n_2 : \cdots : n_k \cong 1 : \eta_2 : \eta_3 : \cdots : \eta_k. \quad (30)$$

它与一组广义 Fibonacci 数对应, 该数列 $\{a_i\}$ 为

$$\begin{aligned} a_i &= a_{i-1} + a_{i-k}, \\ a_1 &= a_2 = a_3 = \cdots = a_{k-1} = 0, \\ a_k &= 1 \end{aligned} \quad (31)$$

定义.

4. 衍射峰的自相似性可表示为

$$\begin{aligned} & q(a_{n+k}, a_{n+1}, a_{n+2}, \cdots, a_{n+k-1}) \\ &= q(a_{n+k-1}, a_n, a_{n+1} + \cdots + a_{n+k-2}) + q(a_n, a_{n-k+1}, a_{n-k+2}, \cdots, a_{n-1}). \end{aligned} \quad (32)$$

但是对于有限的链长, 当 k 足够大时, 由于系统趋于一定确定性的随机系统, 衍射峰的自相似性将变模糊, 并趋于混沌.

四、理论模拟

为了验证上述投影理论, 设想一组完全相同的二维原子点阵面, 在垂直于点阵面的方向按 k 组元 Fibonacci 序列排布, 每一原子面的平均散射因子取为 1. 当衍射矢量垂直于层面时, X 射线衍射强度可表示为

$$I \propto \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin \theta \sin 2\theta} \sum_{j=1}^m \exp\left(i \frac{4\pi}{\lambda} z_j \sin \theta\right), \quad (33)$$

其中 z_j 为第 j 层原子面的位置, m 为总原子面层数, 对于 $k=3$ 和 $k=277$ 的情况进行理论模拟计算. 在 $k=3$ 的情形中, $\eta_3 \cong 0.6823$, 我们的模型包含 15 代, 总厚度约为 7000 Å. 模拟结果如图 2(a) 所示, 衍射谱是典型的准周期谱, 每一衍射峰有三个指标标志

志为 $\begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix}$, 并满足自相似条件 (26) 式, 与投影理论很好地一致. 在 $k=277$ 的情况下,

$\eta_{277} \cong 0.985$, 取 $d_1 = 106.6 \text{ \AA}$, 总厚度约为 $21.8 \mu\text{m}$. 模拟结果如图 2(b) 所示. 它是类混沌谱, 因为自相似性几乎消失, 但它又不同于由完全独立的随机系统 (例如完全无序的非晶态) 所产生的白噪声. 白噪声是连续的平谱, 没有任何谐波结构. 混沌谱是基本连续的但不是平谱, 它来源于具有确定性的随机性.

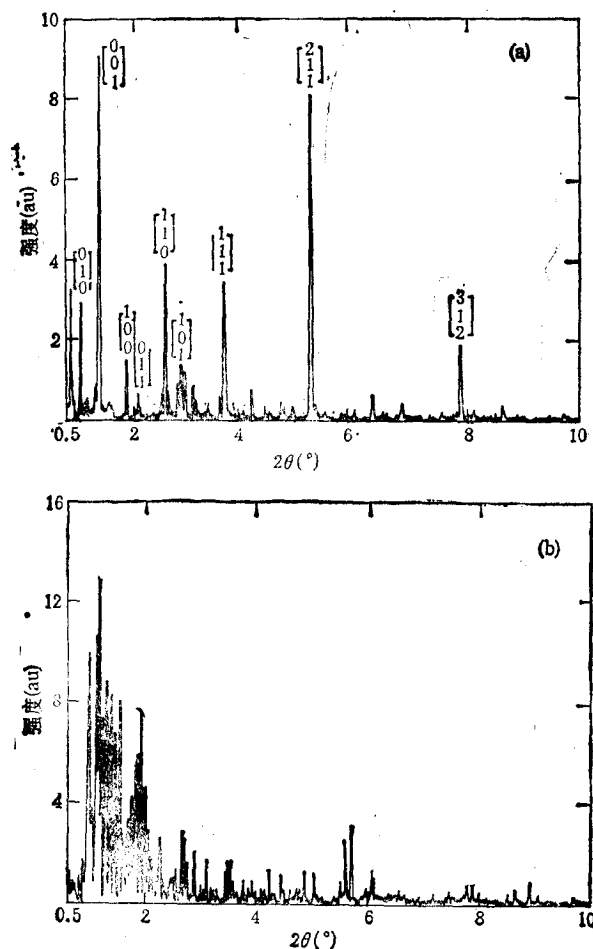


图 2 X射线衍射花样理论模拟示意图

(a) 为 $k=3$. 最强峰满足自相似条件

$$q(a_{n+3}, a_{n+1}, a_{n+1}) = q(a_{n+2}, a_n, a_{n+1}) + q(a_n, a_{n-2}, a_{n-1});$$

(b) 为 $k=277$. 显示类混沌谱

五、结 论

一维 k 组元的 Fibonacci 结构可以通过 k 维超空间的周期结构向一维空间投影得到. 投影轴的方向余弦和衍射谱与 $(k-1)$ 个无理数相联系. 每一衍射峰必须用 k 个整数去标志. 有趣的是周期性结构和标准的 Fibonacci 结构仅仅是它的简并情况, 分别对应于 $k=1$ 和 $k=2$. 而且对于一个有限的序列, 只要 k 足够大, 它将趋于混沌. 这种结构为准周期超晶格的研究提供一种统一的模型.

- [1] B. Simon, *Adv. Appl. Math.*, **3**(1982), 463.
- [2] S. Ostlund and R. Pandit, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 1394.
- [3] D. Levine, P. J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 2477.
- [4] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F. -Y. Juang, P. K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.*, **55**(1985), 1768.
- [5] A. Hu, C. Tien, X. Li, Y. Wang and D. Feng, *Phys. Lett.*, **A119**(1986), 313.
- [6] M. W. C. Dharma-wardana, A. H. MacDonald, D. J. Lockwood, J. -M. Baribeau, D. C. Houghton, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1761.
- [7] Zhu Ming, Hu An, Jiang Shusheng, Qui Yan, Feng Duan, *Chin. Phys. Lett.*, **6**(1989), 469.
- [8] Z. C. Chen, R. Savit, R. Merlin, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 4375.
- [9] J. Birch, M. Severin, U. Wahlstrom, Y. Yamamoto, G. Radnoci, R. Riklund and J. -E. Sundgren, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 10398.
- [10] V. Elser, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 4892.
- [11] R. K. P. Zia and W. J. Dallas, *J. Phys. A*, **18**(1985), L341.

EXTENDED ONE-DIMENSIONAL FIBONACCI STRUCTURES

HU AN JIANG SHU-SHENG PENG RU-WEN ZHANG CHUN-SHENG FENG DUAN

National Laboratory of Solid State Microstructures, Nanjing University, Nanjing, 210008

(Received 12 February 1991)

ABSTRACT

A one-dimensional k -component Fibonacci structure, which includes k incommensurate intervals, is the natural extension of the Fibonacci structure with two intervals. The projection method is applied to deal with the pattern and indexing problems of X-ray diffraction. The theoretical simulation is performed to prove the projection method for this extended Fibonacci structures. The diffraction spectrum will lead to chaos for a finite chain provided that k is sufficiently large.

PACC: 6100; 6865; 6110