

# 无序世界与物理学

李 沅 柏

我们的物质世界,到处是有序和无序世界。然而,稍细观察不难发现周围世界的无序性是更普遍而有序性只不过是局部的或特殊的。人们对这一无序性的研究历史悠久,但遇到的困难很大,直到本世纪 50 年代还看不出多大进展。

自从量子力学发展以来,物理学工作者就开始对有序的晶体材料进行了研究,并确立了它的物理学基础。但对无规则的无序系统的研究直到 1958 年安德逊(Anderson)发表他的一篇著名论文开始到 1968 年才引起了众多科学家的重视。很快就成了物理学中的一个热门课题,著名的局域化理论是首先由安德逊提出,并用格林函数自能展开来处理无序系统的问题。莫特在 1967 年提出的“迁移率边界”及“最低金属电导率”的概念,对于后来理论的发展起到了极为重要的作用。因而于 1977 年安德逊和莫特获得了诺贝尔物理学奖。后来,Edwards 等人也把格林函数方法应用到无序系统的问题。1961 年, Ziman 应用自由电子近似成功地解释了纯金属液体的电阻现象。自从电子计算机普及以来,Dean 等人将把无序系统的格点振动问题用计算机处理取得了较好结果,从而开辟了以计算机研究无序系统的新的道路。

## 1. 无序的分类

Ziman 认为“无序并不指单纯的‘混沌’,而是指具有缺陷的有序或不完整的有序”。在物理学中无序是指完整晶体中原子排列的高度有序状态的偏离。完整晶体的特点是原子排列具有严格的周期重复性,称为晶体结构的长程有序。当系统的周期性被破坏时,就失去了长程序,成为无序系统。

在物理学上无序系统可以分为四种类型,一类是晶胞型无序,或称置换型无序、成分型无序等。这是指晶格中原子所占的位置是有规则的,但占有格点的原子的成分表现为无序,即由  $AB$  两种原子组成的合金,每个原子占据一个确定的格点,但究竟  $A$  原子还是  $B$  原子表现为无序,属于这类的有:无序合金、混晶、含有杂质的半导体等。这类无序由图 1 的(a)所示。可见这里仍保持对原子位置的长程有序性,而原子的种类(或成分)对格点是无序的。原子种类的无序性,严

格说来,对长程有序也失去一定意义,但配位数和原子间距等短程有序性仍然保留着。如果把不同取向的自旋看作为不同的“原子”,则磁无序系统可归入这一类。

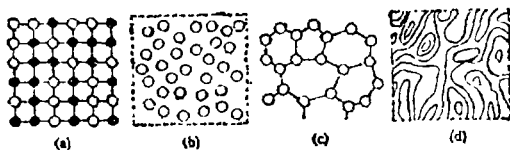


图 1

二类是构造型无序或称坐标无序。属于这类的有:液体和非晶态金属等。如图 1 的(b)所示,这一类型乍看是“完全无序”的,就像理想气体的情形一样。事实上在凝聚系统中(固体或液体)原子的凝聚力或结合力等化学性质对每个原子是固有的,它能控制短程结构,同时支配各个原子的短程有序性。“完全无序”的实现只能是密度很低,使原子的尺寸比原子间距忽略不计的情形,即将原子看做质点的极限,这就是相当于理想气体的情形了。构造型无序的短程有序也可以从对分布函数的实验结果(如液态镍和非晶态镍的实验)得到证实。

三类是拓扑型无序或称网络无序,属于这类的有:氧化物玻璃,非晶态半导体等。因为这是原子位置上的无序,实际属于构造型无序的一种。但认为形成共有键的网格状对系统的宏观物性起着重要作用,所以,特别区别于(b),称为拓扑型无序,如图(1)的(c)所示。这里也和二类情形一样,在一定原子间距范围内原子的排列仍保持一定的秩序(短程有序性),表现为配位数和原子间化学键的键长、键角等其平均不变。但是,原子间化学键的键长和键角的微小涨落的积累会破坏长程有序性。这是拓扑无序的本质所在。另外,含有高浓度位错的固体取向无规的微晶系统都属于拓扑无序类。

四类是连续性无序,如宏观上的无序媒质等,这大都是宏观尺度上的表现。如图(1)的(d)所示。图中所表示的无序曲线实际上是某种物理量(例如原子的

密度、电子的密度或电子所受的势,或者宏观尺度上的结构要素的密度等等)按一定的模式表示的一些等高线。

有时无序的类型也可以从无序随时间的变化即“动无序”(或称时间无序)和无序不随时间变化即“静无序”(或称空间无序)的情形来考虑。如图1的(a)中白圈和黑圈各自可对应于向上和向下的自旋。图(1)的(b)可看做是作布朗运动的各个原子在某一时刻的分布,这些都可看为无序随时间变化的情形。与此相反,静无序指的是无序被空间固定化或被“冻结”的情形。一般地无序问题是指静无序情形。但这不过是相对而说的。某种物性,实际上是由原子结构中各原子的位置所决定的。例如液体金属中涉及到扩散和粘滞性时,本质上原子随时间变化是决定因素,但涉及到电子的行为时,认为具有电子数千倍质量的原子是被固定的。

## 2. 无序系统问题的特点及其难度

在有序系统,如完整晶体中,原子的排列是长程有序的。描述电子状态的波函数可以用三维波矢  $k$  表示成  $\psi(r) = \exp(ik \cdot r)u(r)$ 。这意味着若在晶胞内能解出薛定谔方程的解,则只要通过适当修正位相就可以求得系统的全部知识。这就是布洛赫定理(Bloch theorem),根据这一定理能很好地解释固体所具有的种种物理性质,尤其重要的是它阐明了能量领域中所存在的导带和禁带,成功地解释了为什么有些固体是导体,有些固体却是绝缘体或半导体。在无序系统问题中,显然不可能允许上述的布洛赫定理,使问题简化。在这里一个电子的运动会受到众多离子(或原子)( $N \approx 10^{23}$  个数量级)的影响,显然这是一个地地道道的多体问题,不可能去求得准确的解,这是无序系统问题的一个难点。另一个难点是对应于同一个宏观态的微观状态不是唯一的,即某种条件如给定密度或成分的浓度比等后满足这些条件的微观原子分布可能是复数个,这复数个中实际实现的是那一种分布,从宏观测量中所得到的物性中是无法判别的。因此,要使理论上求得宏观物性,首先需知可能的微观原子分布和各个分布出现的几率。由此构成一个系综并对系综求平均而得所要求的量,系综平均意味着,对几个局域的物理量,其观测值相当于空间平均而空间平均可由系综平均代替,这是某种各态历经假设的结果。对不满足各态历经性的物性则需要用几率论来讨论,这就意味着无序度达到一定的临界值就会消失各态历经性。因此,可以认为各态历经性与非各态历经性的转变是无序系统中的普遍现象。如何去研究非各态历经性的情况下的无序问题,目前尚无定论,还处于摸索中,是今后需要解决的重要课题之一。

## 3. 能求严格解的模型和近似方法

能求严格解模型,首先是一维的无序系统。因为

它所用的数学方法上的优势,使问题变得简单,采用一些方法,可以求得在无序一维势中的电子本征值分布和一维无序振动物子系的频率分布等。在二维系统中,对于有动涨落的无序系统-易兴自旋模型的温色格的严格解是著名的。在浸透问题中,对于某种二维格点,保持格点的特征,可以严格计算出临界浸透浓度。正像一维严格解是依据一维特有的数学上的简化一样,对于二维系统的严格解也是仅仅依靠某种平面格点的特殊性的,然而对于较复杂的二维格点和一般三维系统的推广是行不通的。

在近似方法中首先要介绍的是所谓的微扰论方法,将把无序系统中某些无序效果看做对有序系统的某种微扰。这实际上是一种有序系统中处理个别无序性的方法,在大部有序的系统中含有某种形式的局部的弱的无序性,如低的杂质浓度、微弱势等。这时,将把低杂质浓度或微弱势做为扰动参数,作微扰展开,然后从低次项开始寻找无序的状况,低杂质浓度的极限情形(稀薄合金)是含有一个杂质原子的系统,如图2所示。这时可以求出严格的解,用对一个杂质的散射矩阵可以表示出掺入杂质而引起的效果。事实上,一个杂质对整个系统来讲只有  $N^{-1} \approx 10^{-23}$  程度的影响,本身没多大实际意义,以上可以看出低次项的微扰论方法只能在一定的参数范围才是妥当的。为了扩大近似的适用范围,不少人曾试图将微扰展开的级数中含有更多的项,而取得了相应的成果。

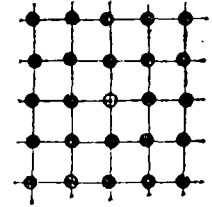


图 2

另一种近似方法是平均场近似或有效媒质近似法。它考虑的方法是将把整个无序系统的不规则性都留给系统中的某一小部分  $\Omega$ , 而  $\Omega$  周围的媒质则具有所要求的平均性质,并求出在媒质中  $\Omega$  的平均行为,从而决定未知的媒质性质。采取这种方法求得的近似中最出名的是磁性的分子场近似,现在考虑如图3的(a)所示的置换型二元合金。这合金由具有局域势  $v_A, v_B$  的两种原子 A 和 B, 以  $c_A$  和  $c_B$  的比例混合而成。现设对于 A, B 成分的无序排列的系综平均以某种形式的有效媒质代替(图3的(b)所示),这有效媒质

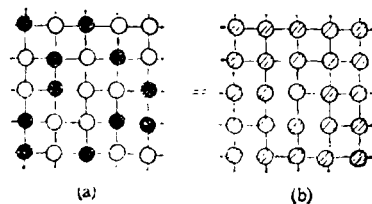


图 3

是由具有某有效势 $\sigma$ (相干势)的原子构成,并认为它具有与原来无序合金相同形式的周期的晶体结构,这一问题的严格解一般是不可能的,但作为一种近似可以考虑如"4所示,当在有效媒质中X点的原子以A

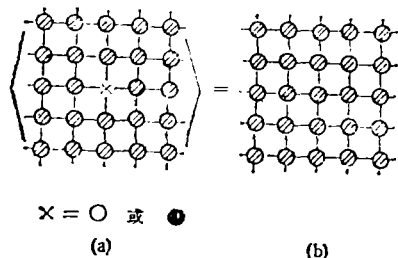


图 4

原子或B原子代换时,考虑对电子的散射效果,平均为零的条件,从而求出未知的相干势 $\sigma$ 。以上所述的近似通常叫作相干势近似(CPA)。CPA虽然基于简单的平均场近似或有效媒质近似方法,但它还能满足种种的必要条件,其应用范围较广,并且很多例子说明具体计算结果与实验符合很好。虽然,CPA具有比其它近似优越的特点,但它仍然还是一种近似而不是严格解,所以它自然有自己的适用范围。有几种物性是CPA所无法解释的,如CPA对态密度的整个情况能给出比预料还好的结果,但在态密度中出现的某种精细结构不一定给出满意的结果。因为精细结构的不少的是由集团散射引起的,但CPA却基于单格点的近似,因此作为改善CPA的一个方向,必须考虑其集团效应。事实上有人已考虑到集团散射效应,取得了几种新的结果。CPA或广义的有效媒质近似方法也可推广到结构型无序类,结构型无序系统,尤其是液态金属和非晶态金属中,对于弱的离子散射情形(单纯金属)、近自由电子模型近似可以给出很好的结果。所以这里不需要有效媒质近似,对于结构型无序系统,有效媒质近似真正发挥作用是强离子散射的非单纯金属液态(过渡金属和稀土类金属)情形。

对于拓扑型无序至今尚未涉及有效媒质近似方法。这是因为作为有效媒质的原子结构,选什么样的结构才合适,还不清楚。前面已看到对于晶胞型无序情形,有效媒质选定为相应的有规则晶格。但拓扑型结构中因化学键的存在起着重要作用,所以作为有效媒质必须考虑明显形式能保留化学键的网格,如果这一网格是有规则的,则作为反映拓扑型无序的有效媒质是不合适的。但如果考虑无规则网格,则会联想起无限连结的连续无规网格,这又是不能唯一确定,其整个行为也不易确定的。因此,这一问题的解决在于如何定义对应于拓扑型无序的有效媒质。

#### 4. 电子局域化问题

在无序系统中电子局域化问题,过去二十多年来

引起了人们的很大兴趣。我们在这里着重介绍局域化理论中的重要概念,如局域态和扩展态、迁移率边界和最小电导率、安德逊转变等,最后还介绍理论中的争议及今后趋向等问题。

安德逊认为在无序系统中,当无序程度超过某限度时,所有的态都变为局域态,而找不到一个扩展态,这里的局域态和扩展态是由波函数的形状所决定的。在无序系统中电子的波函数作指数衰减,称为局域化波函数,这种波函数与有序系统的波函数完全不同。有序系统的波函数是布洛赫波,它是全空间都存在的,而局域化波函数有一个中心点,离开中心点就指数衰减,变得很小。局域化波函数只在无序系统中存在,在安德逊模型中,当 $W/V \gg 1$ 时( $W/V$ 为无费纳的参数称无序度),波函数的形状是一个局域态,如图5的(a)所示;当 $W/V \ll 1$ 时,波函数的形状是一个扩展态,如图5的(b)所示。

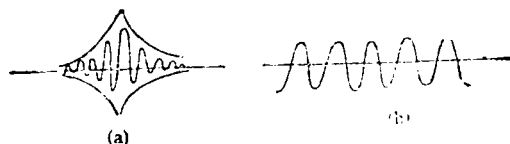


图 5

莫特指出在三维无序系统中既存在扩展态又存在局域态,扩展态分布于能带中心,局域态在带尾部分,并有一个划分扩展态与局域态的能量分界线 $E_c$ 。如图6所示:当 $|E| < |E_c|$ 时为扩展态, $|E| > |E_c|$ 时为局域态,当温度趋于0K时局域态中电子迁移率趋于零,而扩展态中迁移率为有限值。由此,将 $E_c$ 称为迁移率边界。

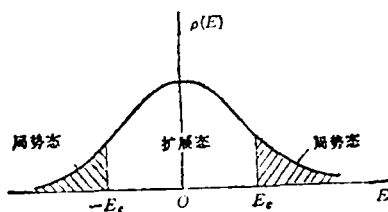


图 6

莫特还进一步提出了安德逊转变的概念,如果在 $S_i$ 晶体中掺入施主杂质磷,由于施主杂质分布是无规的,就形成无序系统。无序性将导致有一个迁移率边界,设导带电子的费米能 $E_F$ 位于迁移率边界之下(从导带低看)。此时系统中电子态都是局域态,可认为是个“绝缘体”,如果继续掺杂使费米能级通过迁移率边界,位于它的上面,系统将表现出“金属性”,因为在扩展态上占有电子,这里发生了从绝缘体向金属的转变,称为安德逊转变。

应当指出,莫特模型仍然存在争议,争论的焦点

# 著名物理学家谈超弦

## 三、M. 格林的谈话

米歇尔·格林 (Michael Green) 是英国伦敦玛丽皇后学院物理系教授。做为现代弦理论的创始人之一,通过他与施瓦兹合作所完成的工作,把这一课题推进到了物理学的前沿。

问: 请问您是怎样开始卷入弦理论的, 当时您正在做什么呢?

答: 弦理论有着非常奇妙的历史, 因为它是在一个完全不同于今天人们对其普遍感兴趣的物理领域中开创的。六十年代末, 继意大利的 G. 维内吉阿诺的开创性工作之后, 很多物理学家对于用弦描写象质子和中子那样的强相互作用粒子发生了浓厚的兴趣。当时, 我正在做博士论文, 这些有趣的新思想立即把我吸引过去。

把  $\pi$  介子看做是一个夸克和一个反夸克由一条弦束缚在一起, 而质子中三个夸克由三条弦束缚在一起,

这种图象部分地解释了为什么不能分离出单独的夸克。这样一种想法在维内吉阿诺的最原始的工作中也还没有形成, 他当时只是对强相互作用粒子碰撞时发生的现象提出了一些猜测。这些猜测吸引了很多物理学家对他提出的模型进一步做了研究。大约过了两、三年, 这种类弦结构才得以形成。那时人们才真正认识到他的猜测的基础恰恰是把粒子看做是一些弦。

问: 为什么弦理论会有这种魅力呢?

答: 这是因为弦理论包含某种我们在漂亮的量子理论中熟悉的类似的结构。例如, 理论物理学家都喜欢规范理论, 象电动力学、强力的量子色动力学以及爱因斯坦的引力理论都属于规范理论。大家都认为它们是优雅的理论, 因为它们所具有的称为规范原理的对称性保证了理论的完全自治性, 也就是说使这些理论只能有如此结构而不会成为其它形式。

在于是否存在迁移率边界。根据莫特的观点随着无序度 ( $W/V$ ) 的增大系统的电导率将减小, 在临界值 ( $W/V_c$ ) 处电导率有一个跳跃, 从有限值变为零。在这里存在着扩展态的最小电导率  $\sigma_{\min}$ 。目前, 关于是否有

$\sigma_{\min}$  的问题在实验和理论上都还存在分歧, 是一个尚未清楚的一个问题。

近年来人们把无序系统的局域态与扩展态类比的看成两相, 借助于处理相变的临界现象的有力工具发展了安

德逊局域化的标度理论。证明了在一维无序系统中任何小的无序都会导致局域化, 在二维情况下理论也肯定了局域态, 至于有无扩展态, 尚有争议, 有一种意见认为有准扩展态在三维情况下一般都认为有局域态, 还有扩展态, 如图 7 所示。安德逊的局域化问题及与其有关的迁移率边界和最小电导率等问题, 在无序系统问题中是较难题、尚未确立系统的方法论。除上述的标度理论外, 最近 10 年来把重整化群方法引入到这一领域, 引起了人们的兴趣。

安德逊局域化理论目前仍然是一个十分活跃的课题, 电子局域化理论实际是单个电子在位势中的能量结构, 然而电子与电子间有库仑相互作用, 若要将把局域化与库仑相互作用同时考虑, 将会引出许多有趣的物理结果。但问题将遇到更大的困难, 目前对这方面的研究似乎刚刚开始。

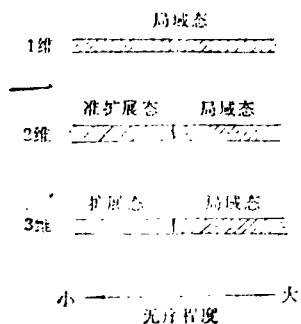


图 7