力学所等找到玻璃玻色峰的方向序

作者：writer 来源：中国科学院

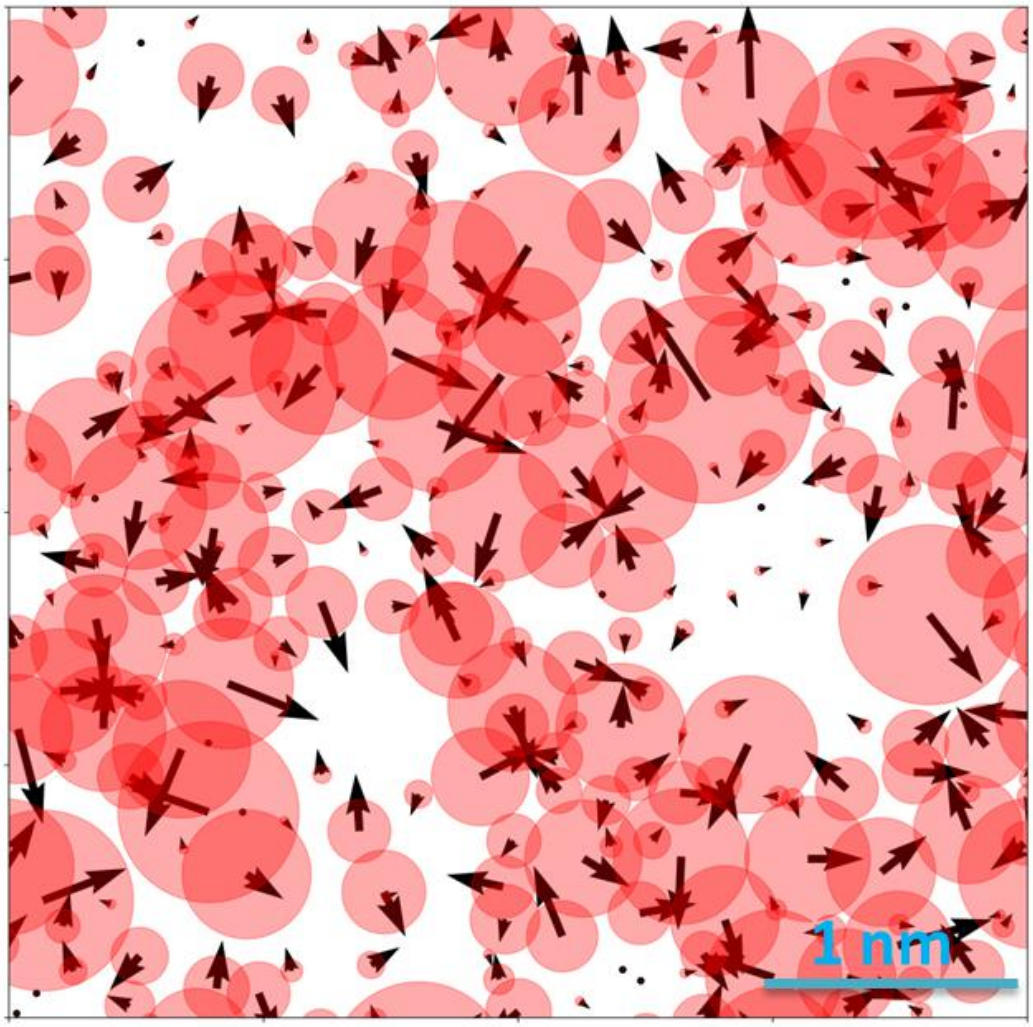
本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/3649.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

力学所等找到玻璃玻色峰的方向序。有序晶体的原子振动可描述为一系列格波，而声子则是这些格波的能量量子化。在太赫兹(THz)低频段，格波可近似为连续介质弹性波，其振动能级态密度正比于频率的平方，服从经典的德拜模型。但是，对于所有的无序玻璃态固体，它们的低频振动总是偏离德拜模型预测而出现态密度过剩，形成反常的“玻色峰(Boson peak)”现象。作为玻璃本征特征之一，玻色峰的物理本质在凝聚态物理领域一直存在很大争议，而澄清这一争议的关键在于找到玻色振动反常与玻璃无序结构的定量关系。近期，中国科学院力学研究所与美国约翰霍普金斯大学、英国剑桥大学合作在这一方面取得新进展。

研究人员以典型CuZr金属玻璃体系作为广义无序玻璃态固体模型，基于分子动力学模拟和短程序结构统计分析，找到了控制玻色峰强度与特征频率的微观结构参量：方向序(Orientational order)。首先，通过Voronoi多面体分割考察了体系内所有振动原子所处的不同短程序环境。紧接着，通过计算各原子的速度自相关函数，得到处于不同局域环境原子的振动态密度以及玻色峰。研究发现，所有原子都参与了玻色峰振动，证实了玻色峰的声子本质。但是，处于不同局域振动环境的原子对于体系玻色峰的贡献不一样。为此，通过定义一个新的物理量：方向振动均方位移，考察了原子振动的各向异性。结果表明，原子低频振动总是倾向于从原子中心到其所处Voronoi多面体的最远顶点。这个结构矢量被定义为玻色峰的方向序：玻色峰的强度与方向序的模长呈线性正相关，而方向序的空间分布呈现了玻色峰的准局域振动特性，并决定了玻色峰的特征频率。最后，上述发现还得到其它11种玻璃体系的广泛验证，表明了玻色峰方向序的普适性。

近日，该研究成果以Structural Parameter of Orientational Order to Predict the Boson Vibrational Anomaly in Glasses 为题，发表于Physical Review Letters(《物理评论快报》)。力学所2015级硕士研究生杨杰为该论文第一作者，研究员蒋敏强、王云江为通讯作者。该项研究工作得到国家优秀青年科学基金、国家自然科学基金重大项目、中科院青促会等资助。



图：玻璃“玻色峰”的方向序。其中，原子(红色圆圈)的大小代表了玻色峰强度，黑色箭头的长度代表了方向序的模长。方向序的空间分布呈现了玻色峰的准局域振动特性。

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发