

ОБ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВАХ ТРЕХМЕРНОГО КВАЗИКРИСТАЛЛА СО СЛАБЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

A.Yu.Kitaev

В приближении слабой связи рассмотрена задача о движении электрона в трехмерном икосаэдрическом квазикристалле. Показано, что даже идеальный квазикристалл обладает конечной проводимостью. Для времени свободного пробега получена оценка $\tau \sim V_0^{-1} \cdot \exp((V_0/E_F)^{-1/4})$, где V_0 – эффективный атомный потенциал.

Задача о движении электрона в одномерном квазипериодическом потенциале рассматривалась в ¹⁻³. При любой силе потенциала спектр имеет нулевую меру, волновые функции осцилируют на всех масштабах, сопротивление степенным образом зависит от длины. В настоящей работе мы показываем (в рамках приближения слабой связи), что в трехмерном случае электрон рассеивается на слабых гармониках потенциала так же, как на примесях. Это противоречит результатам работы ⁴, основанной на теории возмущений.

1. Мы будем исходить из одноэлектронного гамильтониана $\mathcal{H} = e(p) + V(x)$, где $V(x) \ll \ll E_F$ (слабая связь). Можно ожидать, что это приближение применимо для квазикристалла Al_6CuLi_3 , так как все компоненты этого соединения – хорошие металлы. В k -представлении квазикристаллический потенциал V записывается в виде ⁵

$$V(k) = \sum_{m_1, \dots, m_6} V_{m_1, \dots, m_6} \delta [k - k_{m_1, \dots, m_6}], \quad (1)$$

где $V_m = V_0 F(k_m^*)$.

Здесь k_m, k_m^* – проекции шестимерного вектора обратной решетки на реальное (R^3) и дуальное (R^{3*}) подпространства, $F(k^*)$ – формфактор трубы. Атомным формфактором для простоты пренебрегаем. В приближении слабой связи $V_0 \ll E_F$.

Для ответа на вопрос о конечности проводимости квазикристалла оказывается важна асимптотика функции $F(k^*)$ при $|k^*| \rightarrow \infty$. Для идеального квазикристалла поперечное сечение трубы представляет собой многогранник T в R^{3*} , в простейшей модели – триаконтаэдр ⁶. Основной вклад в асимптотику $F(k^*)$ вносят вершины многогранника T . Вклад от одной вершины равен

$$F(k^*) \sim |(c_1, k^*) (c_2, k^*) (c_3, k^*)|^{-1} \quad (2)$$

при $|(c_1 k^*)| \gg 1, |(c_2 k^*)| \gg 1, |(c_3 k^*)| \gg 1$, где c_1, c_2, c_3 – ребра многогранника T , выходящие из данной вершины.

2. Начнем рассмотрение с теории возмущений в k -пространстве. К каждому состоянию с импульсом p примешивается доля состояний с импульсами вида $p + k_m$, где k_m – квазикристаллический вектор. Эта доля велика лишь в том случае, когда состояния p и $p + k_m$ находятся в резонансе, т.е. $|\epsilon(p) - \epsilon(p + k_m)| < |V_m|$.

Для заданных p ($|p| \sim p_F$) и $V < V_0$ обозначим через $n(V)$ плотность по шкале энергий величин $\epsilon(p + k_m)$, таких что $|V_m| > V$. Иначе говоря, вероятность того, что существует состояние с импульсом $p + k_m$, такое что $|V_m| > V$ и $E_F < \epsilon(p + k_m) < E_F + dE$, равна $n(V)dE$. Для $n(V)$ получается следующее выражение:

$$n(V) = b V^{-1} \ln^2(V_0/V), \text{ где } b \sim V_0/E_F \ll 1. \quad (3)$$

Среднее количество состояний, находящихся в резонансе с данным состоянием, по порядку величины равно $N \sim \int V dn(V)$. Отвлекаясь от конкретного выражения (3) для $n(V)$, разберем два случая.

Допустим, что $N \ll 1$. Тогда электрон локализован в импульсном пространстве: каждое собственное состояние гамильтонiana представляет собой суперпозицию небольшого числа состояний с импульсами вида $p + k_m$. Влияние потенциала решетки сводится лишь к перенормировке спектра. Рассеяние отсутствует, проводимость бесконечна.

Если же $N \gg 1$, то теория возмущений неприменима. Электрон может неограниченное число раз рассеиваться на гармониках потенциала решетки, т.е. происходит делокализация электрона в импульсном пространстве (более точный критерий делокализации см. ниже, формула (8)). В каждом состоянии с определенным импульсом электрон находится в течение некоторого времени τ , которое можно отождествить с временем свободного пробега. Проводимость оценивается по формуле Друде. Для квазикристалла реализуется именно этот случай.

Движение электрона в k -пространстве происходит на множество состояний с импульсами $p + k_m$ ($p = \text{const}$), таких что:

$$|\epsilon(p) - \epsilon(p + k_m)| < \tau^{-1}. \quad (4)$$

Это множество, если изобразить его в шестимерном пространстве, неограничено вдоль R^3 *. Вероятность возврата в исходное состояние при диффузии на таком множестве отлична от единицы, поэтому, если мы интересуемся только порядками величин, ее можно пренебречь. Мы приходим к задаче о диффузии на решетке без циклов, т.е. на дереве. Данное приближение неприменимо для одно- и двумерных квазикристаллов, так как могут оказаться существенными эффекты слабой локализации (в k -пространстве).

3. Сформулируем задачу об электроне на дереве и укажем способ ее решения. Гамильтониан включает в себя потенциалы в вершинах E_α и перескоки между соседними вершинами $V_{\alpha\beta}$, являющиеся случайными величинами. Потенциалы E_α равномерно распределены в очень широком интервале энергий E_0 . Количество ветвей, выходящих из данной вершины, не ограничено. Вероятность того, что из данной вершины выходит ветвь с амплитудой перескока в интервале $(V, V + dV)$, входящая в вершину с потенциалом в интервале $(E, E + dE)$, равна $dn(V)dE$.

Выберем некоторую вершину в качестве корня дерева и поместим ее на нулевой уровень, вершину, с которыми она соединена, поместим на первый уровень и т.д. Фиксируем некоторую энергию ϵ . Пусть α – некоторая вершина уровня j . Рассмотрим поддерево, состоящее из вершины α и всех вершин выше ее. Обозначим через G_α функцию Грина $G_{\alpha\alpha}(\epsilon)$ на этом поддереве. Выразим G_α через функции Грина G_{α_i} вершин α_i уровня $j+1$, соединенных с вершиной α :

$$G_\alpha^{-1} = \epsilon - E_\alpha - \Sigma_\alpha, \quad \Sigma_\alpha = \sum_i |V_{\alpha\alpha_i}|^2 G_{\alpha_i}. \quad (5)$$

Считая G_α , Σ_α случайными величинами, можно получить связь между их функциями распределения на уровнях j и $j+1$. В бесконечном дереве эти функции распределения должны совпадать, поэтому получается замкнутая система уравнений.

Пусть $\Sigma = \beta - i\gamma$ ($\gamma \geq 0$), а $g(\gamma)$ — функция распределения γ . По порядку величины γ^{-1} равно времени нахождения электрона на одной вершине. В случае локализации $g(\gamma) = \delta(\gamma)$, а в случае делокализации $g(\gamma) \neq 0$ при $\gamma > 0$.

Вводя вспомогательную функцию $\varphi(z) = \langle \exp(-izV^2 \operatorname{Im} G) \rangle_G$, получаем систему уравнений

$$\begin{aligned}\varphi(z) &= \iiint (e^{i\alpha z} - 1) K_V(\alpha, \gamma) g(\gamma) d\alpha d\gamma dn(V), \\ g(\gamma) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(\varphi(z)) e^{-i\gamma z} dz,\end{aligned}\quad (6)$$

где $K_V(\alpha, \gamma) = \begin{cases} V\gamma^{1/2} \alpha^{-3/2} (1 - \alpha\gamma/V^2)^{-1/2}, & \text{при } \alpha\gamma < V^2 \\ 0, & \text{при } \alpha\gamma \geq V^2 \end{cases}$

Учет конечности интервала энергий E_0 приводит к обрезанию функции $K_V(\alpha, \gamma)$:

$$(V/E_0)^2 < \alpha/\gamma < (E_0/V)^2.$$

Используя разложение $\exp(\varphi(z)) \approx 1 + \varphi(z)$, можно получить критерий делокализации

$$\int V \ln(E_0/V) dn(V) > \frac{1}{4}.$$

Для $n(V)$ вида (3) этот критерий выполнен.

Решение уравнений (6) с $n(V)$ вида (3) дает функцию $g(\gamma)$ с острым максимумом в точке

$$\gamma_0 \sim V_0 \exp(-\lambda b^{-1/4}), \quad (9)$$

где λ — числовая константа. Тем самым получена оценка для времени свободного пробега электрона: $\tau \sim \gamma_0^{-1}$.

Автор выражает искреннюю благодарность В.Л.Покровскому за постоянное внимание к работе и полезные обсуждения.

Литература

1. Калугин П.А., Китаев А.Ю., Левитов Л.С. ЖЭТФ, 1986, 91, 692.
2. Kohmoto M., Sutherland B., Chao Tang. Phys. Rev. B, 1987, 35, 1020.
3. Kohmoto M., Sutherland B. Phys. Rev. B, 1987, 36, 5877.
4. Sokoloff J.B. Phys. Rev. Lett., 1986, 57, 2223.
5. Калугин П.А., Китаев А.Ю., Левитов Л.С. Письма в ЖЭТФ, 1985, 41, 119.
6. Duneau M., Katz A. Phys. Rev. Lett., 1985, 54, 2688.