

ОСОБЕННОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

Д.В.Оленев¹⁾, Ю.Х.Векилов

*Московский государственный институт стали и сплавов
Кафедра теоретической физики,
117936 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 20 декабря 1995 г.

В рамках приближения сильной связи исследован характер энергетического спектра икосаэдрического квазикристалла. Обнаружено, что спектр не содержит иерархической щелевой структуры, характерной для канторова множества. Исследование гладкости энергетического спектра методом статистики уровней показало наличие в спектре сингулярной части. Сделаны предположения о виде волновых функций.

PACS 61.44.+p

С момента открытия квазикристаллов [1,2] основную проблему представлял вопрос об их атомной и электронной структуре. Среди предложенных структурных моделей, по-видимому, самой распространенной следует считать модель, основанную на квазипериодической укладке двух элементарных структурных единиц – двухфрагментарную модель. Для одномерного квазикристалла данная модель приводит к последовательности Фибоначчи коротких и длинных отрезков. В двумерном случае двухфрагментарная модель представляет собой паркет Пенроуза, составленный из двух типов ромбов с острыми углами при вершинах 36° и 72° ("узкий" и "широкий" ромбы, соответственно), а в трехмерном – обобщение паркета Пенроуза, именуемое иначе сетью Аммана–Маккея, образуемого "острыми" и "тупыми" ромбоэдрами.

Электронная структура двухфрагментарной модели квазипериодических объектов изучена довольно хорошо в случае одномерного и двумерного квазикристаллов. Энергетический спектр одномерной квазирешетки (цепочки Фибоначчи) представляет собой канторово множество меры ноль, волновые функции ведут себя критически, не являясь ни локализованными, ни делокализованными [3]. В двумерном случае энергетический спектр содержит сингулярную часть и большинство волновых функций являются критическими [4].

Электронная структура (прежде всего, характер спектра и вид волновых функций) трехмерных квазикристаллов изучена менее подробно, и выводы существующих исследований противоречивы. Так, Маркус при исследовании электронных свойств трехмерного квазикристалла в приближении сильной связи не обнаружил принципиальных отличий от кристаллического случая, заключив, что энергетический спектр имеет гладкий характер и волновые функции электронов делокализованы [5]. Ниизеки и Акаматсу, напротив, предположили существование в трехмерном случае критических волновых функций и экзотического вида энергетического спектра, имеющего сингулярно непрерывный характер [6].

В настоящей работе методом статистики уровней (LS-методом) в приближении сильной связи и однозонной модели исследованы особенности энергетического спектра икосаэдрического квазикристалла на основе двухфрагментарной структурной модели. Полученные результаты позволяют высказать предположения о виде волновых функций электронов. Статья построена следующим

¹⁾e-mail: olenev@trf.misa.ac.ru

образом: в первом разделе работы обсуждаются структурные аспекты задачи, во втором – приведено объяснение терминологии, изложен LS-метод и результаты расчетов. Третья часть посвящена выводам.

1. Проекционный метод и периодические аппроксиманты икосаэдрических квазикристаллов. Существует три основных способа построения сети Аммана–Маккея, являющейся структурной моделью икосаэдрических квазикристаллов: проекционный метод, метод мультигридов и метод, использующий свойство самоподобия квазипериодической структуры [4, 7, 8]. Наиболее распространенным является проекционный метод. Для построения сети Аммана–Маккея используется целочисленная гиперрешетка в шестимерном пространстве и трехмерные подпространства – параллельное и перпендикулярное, ориентированные иррациональным образом к решетке. Узлы решетки, близкие к параллельному подпространству, проектируются в него, и эта проекция представляет собой модель квазикристалла. Узел шестимерной гиперрешетки r присутствует на проекции в параллельном подпространстве, если $n(r) = 1$, где $n(r)$ – функция формы проекции элементарной ячейки гиперрешетки на ортогональное подпространство (функция формы равна 1 внутри проекции и 0 вне ее). Внутренняя часть гиперячейки удовлетворяет условию $r = \sum_{i=1}^6 x_i a_i$, $0 < x_i < 1$, где a_i – базисные векторы шестимерной кубической решетки. Поэтому

$$n(r_{\perp}) = \begin{cases} 1, & \text{если } r_{\perp} = \sum_{i=1}^6 x_i a_{i\perp}, \quad 0 < x_i < 1 \\ 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases} \quad (1)$$

Следуя [9], будем пользоваться следующим набором базисных векторов в перпендикулярном и параллельном подпространствах:

$$\begin{aligned} a_{1\perp} &= \eta(1, 0, -\tau), & a_{2\perp} &= \eta(1, 0, \tau), \\ a_{3\perp} &= \eta(-\tau, 1, 0), & a_{4\perp} &= \eta(0, -\tau, 1), \\ a_{5\perp} &= \eta(0, \tau, 1), & a_{6\perp} &= \eta(-\tau, -1, 0) \end{aligned} \quad (2)$$

и

$$\begin{aligned} a_{1\parallel} &= \eta(\tau, 0, 1), & a_{2\parallel} &= \eta(\tau, 0, -1), \\ a_{3\parallel} &= \eta(1, \tau, 0), & a_{4\parallel} &= \eta(0, 1, \tau), \\ a_{5\parallel} &= \eta(0, -1, \tau), & a_{6\parallel} &= \eta(1, -\tau, 0), \end{aligned} \quad (3)$$

где $\eta = (2 + \tau)^{-1/2}$ и $\tau = (1 + 5^{1/2})/2$ ("золотое сечение"). Полиэдр, описывающий область ненулевых значений $n(r_{\perp})$ в (1), является ромбическим триаконтаэдром, иногда эту область называют "трубой проецирования".

Оставляя прежним базисный набор (3), изменим набор (2) на базисные векторы $\bar{a}_{i\perp}$, $i = 1, \dots, 6$, полученные из $a_{i\perp}$ равенств (2) заменой τ его рациональным приближением (отношением двух последовательных чисел Фибоначчи), равным $\bar{\tau} = q/r$ (q и r – целые). В этом случае "труба проецирования" будет представлять искаженный ромбический триаконтаэдр и, как следствие, методика проецирования приведет к построению в параллельном подпространстве кубических структур, локально изоморфных сети Аммана–Маккея. Чем ближе к τ его рациональное приближение $\bar{\tau}$, тем больше будет период получающейся кубической структуры (как показано в [9], для $\bar{\tau} = q/r$ период равен $L = 2\eta(q\tau + r)$) и тем лучше она будет "аппроксимировать" квазикристалл. Поэтому принято называть данные структуры периодическими аппроксимантами икосаэдрических квазикристаллов. При использовании в качестве $\bar{\tau}$ отношения последовательных чисел из ряда Фибоначчи аппроксиманты получаются

оптимальными в смысле, обсуждаемом в [9]. Итак, икосаэдрический квазикристалл можно рассматривать как структурный предел последовательности оптимальных кубических аппроксимант с растущим периодом.

2. Энергетический спектр икосаэдрических квазикристаллов. В силу отсутствия у квазикристаллов трансляционной симметрии традиционные методы расчета зонной структуры твердых тел становятся неприменимыми. Методы, не требующие трансляционной инвариантности системы (например, рекурсионный метод и подобные ему), к сожалению, мало пригодны для исследования особенностей энергетического спектра [5]. К настоящему времени не существует достаточно общей методики исследования электронных свойств квазипериодических структур. Поэтому объектом исследования данной работы выбраны оптимальные кубические аппроксиманты икосаэдрических квазикристаллов, состоящие из уже упомянутых "острых" и "тупых" ромбоэдров. Мы рассмотрели "центровую" декорацию аппроксимант атомами: атомы с одной s -орбиталью на атом расположены в центрах ромбоэдров. Уравнение Шредингера для системы в приближении сильной связи запишется следующим образом:

$$\sum_j t_{ij} \psi_j = E \psi_i, \quad (4)$$

где интегралы переноса положены не равной нулю константе ($t_{ij} = -1$) только для ближайших соседей (для атомов, принадлежащих ромбоэдрам, имеющих общую грань). Для анализа электронных свойств трехмерного квазикристалла мы провели численную диагонализацию гамильтониана уравнения (4) при наложенных периодических граничных условиях и исследовали распределение энергетических уровней в точке $k=0$. На рис.1 показаны графики интегральной плотности состояний для трех кубических аппроксимант икосаэдрических квазикристаллов: $2/1$, $3/2$, $5/3$ (запись " m/n аппроксиманта" означает, что τ при построении искаженной "трубы проецирования" заменено на m/n). Элементарные ячейки указанных аппроксимант содержат в базисе 136, 576 и 2440 атомов, соответственно. Как видно из рис.1, кривые интегральной плотности состояний довольно быстро сходятся и не обнаруживают наличия иерархической щелевой структуры, характерной для канторова множества спектра одномерного квазикристалла. Для исследования гладкости энергетического спектра икосаэдрических квазикристаллов мы использовали так называемый LS-метод [4, 10]. Ключевыми здесь являются два соотношения. Первое – доля межуровневых промежутков (МУ-промежутков) с шириной $\Delta E \leq BN^\beta$:

$$D(\beta) = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \theta \left[\beta - \log_N \left(\frac{\epsilon_{j+1} - \epsilon_j}{B} \right) \right], \quad (5)$$

где N – число атомов в базисе аппроксиманты; $B = \epsilon_N - \epsilon_1$ – общая ширина зоны; θ – тета-функция Хевисайда. Второе – доля заполнения зоны МУ-промежутками с шириной $\Delta E \leq BN^\beta$:

$$F(\beta) = \frac{1}{B} \sum_{j=1}^{N-1} (\epsilon_{j+1} - \epsilon_j) \theta \left[\beta - \log_N \left(\frac{\epsilon_{j+1} - \epsilon_j}{B} \right) \right]. \quad (6)$$

Поскольку ширина зоны B практически не зависит от размера системы (см. рис. 1), то в термодинамическом пределе, вне зависимости от степени гладкости спектра, эти функции должны удовлетворять следующим условиям [4]:

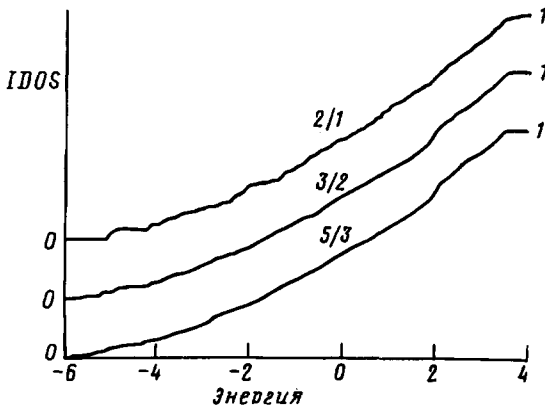


Рис.1. Кривые интегральной плотности состояний (IDOS) для периодических аппроксимант 2/1, 3/2, 5/3 икосаэдрического квазикристалла. Единицы - условные

$D(\beta) \rightarrow 1$ при $\beta > -1$ и $F(\beta) \rightarrow 0$ при $\beta < -1$. В работе [4] было показано, что для кристаллических и аморфных систем (с безусловно гладкими спектрами) кривые $D(\beta)$ и $F(\beta)$ в термодинамическом пределе испытывают скачок от 0 до 1 при $\beta = -1$. Поэтому принято считать, что энергетический спектр является негладким или сингулярным, если зависимость от размера системы величин МУ-промежутков подчиняется закону $1/N^\beta$ с $\beta \neq 1$. На рис.2 и 3 показаны кривые $D(\beta)$ и $F(\beta)$, рассчитанные для трех икосаэдрических аппроксимант 2/1, 3/2 и 5/3. Из рис.2 видно, что кривые $D(\beta)$ для этих трех аппроксимант почти сошлись к термодинамическому пределу в районе $\beta < -1$. Это означает, что термодинамическое количество МУ-промежутков при $N \rightarrow \infty$ имеет ширину, меньшую, нежели в традиционных системах (для кристаллических и аморфных систем зависимость средней величины МУ-промежутка от размера системы определяется соотношением $\Delta E \sim 1/N$ [4]). Рис.3 показывает сходимость кривых $F(\beta)$ для упомянутых аппроксимант в районе $\beta > -1$, что свидетельствует о том, что конечная доля зоны заполнена более широкими, чем в традиционных системах, МУ-промежутками. Итак, полученные результаты показывают, что при $N \rightarrow \infty$ энергетический спектр икосаэдрического квазикристалла содержит сингулярную часть. Как и в двумерном случае [4], результаты данной работы не могут определить наличие регулярной части в энергетическом спектре икосаэдрического квазикристалла. Однако присутствие сингулярной части в спектре может качественным образом ответить на вопрос о виде волновых функций для икосаэдрического квазикристалла. Действительно, в работе [3] высказывалась мысль о соответствии между характером спектра и волновыми функциями электронов. Следствием наличия сингулярного вклада в спектр является критическое поведение волновых функций. В то же время, результаты исследования [11] говорят о том, что волновые функции электронов в квазикристалле могут быть либо делокализованными, либо критическими. Единственным непротиворечивым выводом является предположение о том, что большинство волновых функций икосаэдрического квазикристалла является критическими.

В данной работе в рамках приближения сильной связи исследован характер энергетического спектра трехмерного (икосаэдрического) квазикристалла, рассматриваемого как структурный предел ряда кубических аппроксимант с растущим периодом. Обнаружено, что спектр икосаэдрического квазикристалла не содержит иерархической щелевой структуры, характерной для канторова множества спектра одномерного квазикристалла. Исследование гладкости энергетического спектра LS-методом показало, что данный спектр содержит сингу-

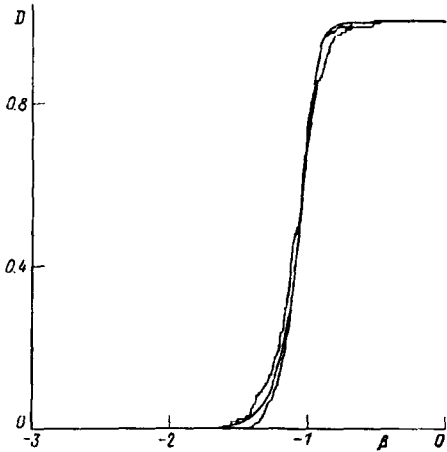


Рис.2. Кривые, показывающие долю $D(\beta)$ МУ-промежутков с шириной $\Delta E \leq BN^\beta$ для трех периодических аппроксимант икосаэдрического квазикристалла $2/1$, $3/2$, $5/3$. Более гладкие кривые соответствуют более высокому порядку аппроксиманты. Общая ширина зоны принята равной в расчетах предельной величине $B_\infty = 9.69$

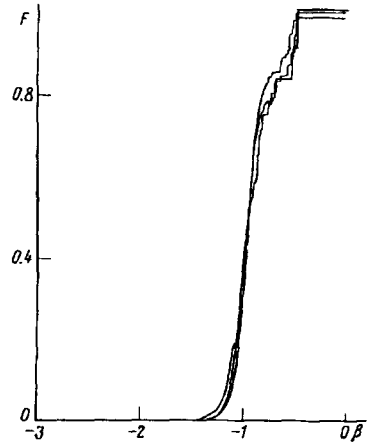


Рис.3. Кривые $F(\beta)$, показывающие в данном случае в термодинамическом пределе долю заполнения зоны икосаэдрического квазикристалла МУ-промежутками с шириной $\Delta E \leq BN^\beta$. Расчет сделан для трех периодических аппроксимант икосаэдрического квазикристалла $2/1$, $3/2$, $5/3$. Более гладкие кривые соответствуют более высокому порядку аппроксиманты. Общая ширина зоны в расчетах принята равной $B_\infty = 9.69$

лярную часть. Это позволило сделать предположение о том, что большинство волновых функций рассматриваемой системы имеет критический характер.

В заключение авторы благодарят П.А.Коржавого, Э.И.Исаева и Д.В.Ливанова за внимание к работе и ряд ценных замечаний. Работа выполнена в рамках программы Международного центра фундаментальной физики в Москве при финансовой поддержке INTAS, грант 93-2492, и частично Международного научного фонда, грант MQQ300.

1. D.Shechtman, I.Blech, D.Gratias, and J.W.Cahn, Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
2. N.Wang, H.Chen, and K.H.Kuo, Phys. Rev. Lett. **59**, 1010 (1987); L.Bendersky, Phys. Rev. Lett. **55**, 1461 (1985); H.Chen, D.X.Li, and K.H.Kuo, Phys. Rev. Lett. **60**, 1645 (1988).
3. П.А.Калугин, А.Ю.Китаев, Л.С.Левитов, Письма в ЖЭТФ **41**, 119 (1985); M.Kohmoto, B.Sutherland, and C.Tang, Phys. Rev. B **35**, 1020 (1987).
4. H.Tsunetsugu, T.Fujiwara, K.Ueda, and T.Tokihiro, Phys. Rev. B **43**, 8879 (1991).
5. M.A.Marcus, Phys. Rev. B **34**, 5981 (1986).
6. K.Niizeki and T.Akamatsu, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 2759 (1990).
7. V.Elser, Phys. Rev. B **32**, 4892 (1985).
8. C.L.Henley, Phys. Rev. B **34**, 797 (1986).
9. L.J.Shaw, V.Elser, and C.L.Henley, Phys. Rev. B **43**, 3423 (1991).
10. S.Yamamoto and T.Fujiwara, Phys. Rev. B **51**, 8841 (1995).
11. Ю.Х.Векилов, П.А.Коржавый, Д.В.Оленев, Письма в ЖЭТФ **62**, 349 (1995).