

КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ВЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

Д.В.Олениев¹⁾, Ю.Х.Векилов

Московский государственный институт стали и сплавов
117936 Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 сентября 1996 г.

В приближении сильной связи исследован характер локализации волновых функций икосаэдрического квазикристалла. Обнаружено "критическое" поведение волновых функций, не являющихся ни локализованными, как при андерсоновской локализации, ни делокализованными, как в случае блоховских состояний.

PACS: 61.44.+р

Квазикристаллы являются чрезвычайно интересными объектами физики твердого тела со сложной атомной структурой и необычными электронными свойствами [1, 2]. Среди известных моделей структуры квазикристаллов распространенной является модель, основанная на квазипериодической укладке двух элементарных структурных единиц – двухфрагментарная 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 и образуемое "острыми" и "тупыми" ромбоэдрами.

Отсутствие периодичности при наличии дальнего порядка приводит к экзотическим электронным свойствам квазипериодических объектов. Так, в одномерном квазикристалле (цепочка Фибоначчи) энергетический спектр содержит самоподобную структуру энергетических щелей и является канторовским множеством меры ноль, волновые функции ведут себя критически, не являясь ни локализованными, как в случае андерсоновской локализации, ни делокализованными, как в случае блоховских состояний [3]. Согласно классификации по нормировочному интегралу [4], волновые функции считаются делокализованными, если $\int_{|\mathbf{r}| < R} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \sim R^d$, где d – размерность пространства, локализованными, если существует нормировка $\int_{\infty} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$; волновые функции, которые не могут быть нормированными в бесконечной системе, но не являются делокализованными, считаются "критическими".

В двумерном случае энергетический спектр содержит сингулярную (негладкую) часть и большинство волновых функций являются критическими [4, 5]. В наиболее интересном для практических приложений случае трехмерных квазикристаллов также наблюдается наличие сингулярной части в энергетическом спектре [6]. Это позволяет высказать предположение о критическом поведении волновых функций трехмерного квазикристалла [6, 7]. Однако имеющиеся результаты исследования локализационного поведения волновых функций трехмерных квазикристаллов неоднозначны. Так, Маркус при изучении волновых

¹⁾e-mail: olenev@trf.misa.ac.ru

функций трехмерных квазикристаллов не обнаружил существенного отличия от кристаллического случая, заключив, что они являются делокализованными [8]. Ниизеки и Акаматсу, напротив, предположили, что волновые функции в трехмерном квазикристалле могут быть критическими [9].

В настоящей работе исследованы волновые функции икосаэдрического квазикристалла в рамках двухфрагментарной структурной модели в приближении сильной связи. Объектами исследования выбраны оптимальные кубические аппроксиманты икосаэдрических квазикристаллов, состоящие из "острых" и "тупых" ромбоэдров. К понятию подобных аппроксимант проще всего прийти при помощи проекционного метода, суть которого заключается в следующем [10–12]. 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 [12], 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 ортогональным срезом "трубы проецирования" и представляет собой ромбический триаконтаэдр.

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 ортогональный срез "трубы 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 (для $\bar{\tau} = q/r$ период равен $L = 2\eta(q\tau + r)$) и тем лучше она будет "аппроксимиовать"

квазикристалл. Поэтому принято называть данные структуры периодическими аппроксимантами икосаэдрических квазикристаллов. При использовании в качестве τ отношения последовательных чисел из ряда Фибоначчи аппроксиманты получаются оптимальными в смысле, обсуждаемом в [12]. Итак, икосаэдрический квазикристалл можно рассматривать как структурный предел последовательности оптимальных кубических аппроксимант с растущим периодом.

В работе рассмотрена "центровая" декорация оптимальных аппроксимант атомами: атомы с одной s-орбиталью на атом расположены в центрах ромбоэдров. Уравнение Шредингера для системы в приближении сильной связи имеет вид

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

где интегралы переноса положены не равной нулю константе ($t_{ij} = -1$) только для ближайших соседей – для атомов, принадлежащих ромбоэдрам, имеющим общую грань (учет последующих соседей не вносит качественно нового, а только усложняет расчет). Для анализа электронных свойств трехмерного квазикристалла мы провели численную диагонализацию в точке $k = 0$ (являющейся основной для квазикристалла) матрицы гамильтониана уравнения (4) при наложенных периодических граничных условиях.

Локализационное поведение волновых функций икосаэдрического квазикристалла исследовалось методом статистики $2p$ -норм волновых функций [4, 5]. $2p$ -норма волновой функции определяется следующим образом:

$$\|\psi\|_{2p} \equiv \frac{\sum_n |\psi_n|^{2p}}{\left(\sum_n |\psi_n|^2\right)^{p}}, \quad (5)$$

где ψ_n – амплитуды электронной волновой функции (коэффициенты разложения волновой функции по базису сильной связи).

Рассматривая икосаэдрический квазикристалл как структурный предел ряда оптимальных кубических аппроксимант с растущим периодом, можно попытаться найти термодинамический предел в поведении кривых, описывающих статистику распределения $2p$ -норм собственных векторов гамильтониана уравнения (4). Следуя [4, 5], введем величину $I(\gamma)$, описывающую долю состояний, у которых $2p$ -нормы $\|\psi\|_{2p} \leq N^\gamma$, то есть

$$I_{2p}(\gamma) \equiv \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \theta(\gamma - \log_N \|\psi^{(n)}\|_{2p}), \quad (6)$$

где N – число атомов в базисе рассматриваемой аппроксиманты, θ – функция Хевисайда.

На рис. 1 показаны кривые $I_8(\gamma)$, рассчитанные для четырех оптимальных кубических аппроксимант икосаэдрических квазикристаллов: $1/1$, $2/1$, $3/2$, $5/3$ (запись " m/n аппроксиманта" означает, что τ при построении искаженной "трубы проецирования" заменено на m/n). Элементарные ячейки указанных аппроксимант содержат в базисе 32, 136, 576 и 2440 атомов, соответственно. Рис.1 свидетельствует о наличии термодинамической сходимости кривых $I_8(\gamma)$ в области $\gamma \approx -2.25$. Кроме того, из рис.1 видно, что с ростом номера аппроксиманты кривые $I_8(\gamma)$ приближаются к ступенчатой функции со

ступенькой, расположенной при $\gamma \approx -2.25$. Это означает, что в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) $2p$ -нормы ($p = 4$) почти всех волновых функций икосаэдрического квазикристалла зависят от размера системы, как $\|\psi\|_8 \approx N^\gamma$, где $\gamma \approx -2.25$.

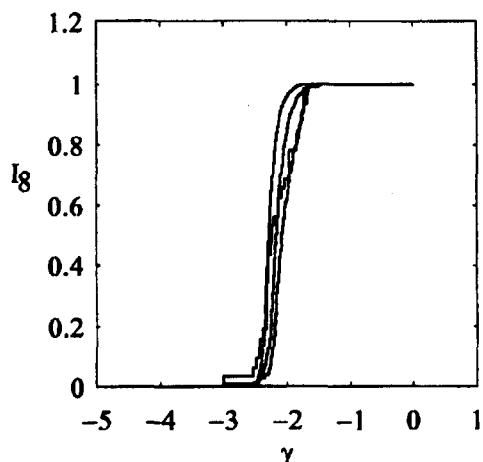


Рис.1. Кривые $I_8(\gamma)$, показывающие долю состояний, у которых $\|\psi\|_8 \leq N^\gamma$ для четырех периодических аппроксимант $1/1$, $2/1$, $3/2$, $5/3$. Более гладкие кривые соответствуют более высокому порядку аппроксиманты

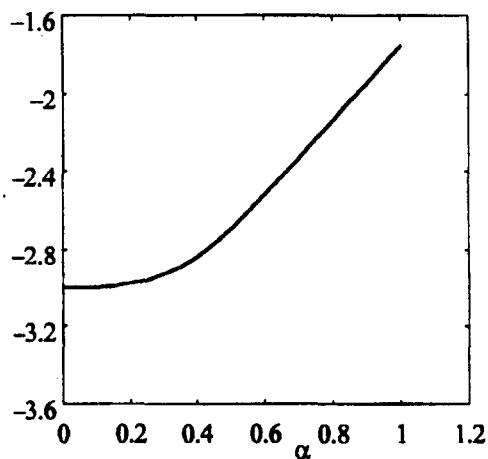


Рис.2. Кривая зависимости $\gamma(p, \alpha)|_{p=4}$ при $-3 \leq \gamma \leq -1.7$

Для случая делокализованного состояния зависимость $2p$ -нормы волновой функции от размера системы, как следует из (5), равна $\|\psi\|_{2p}^{\text{est.}} \approx N^{1-p}$, экспоненциально локализованные волновые функции характеризуются $2p$ -нормой $\|\psi\|_{2p}^{\text{exp. loc.}} \approx 1$. Поэтому найденная зависимость $2p$ -норм ($p = 4$) волновых функций икосаэдрического квазикристалла от размера системы исключает случаи как делокализации, так и экспоненциальной локализации состояний. Тем не менее, известно, что зависимость $2p$ -нормы волновой функции от размера системы вида $N^{\gamma(p, \alpha)}$ выполняется для волновых функций со степенным спадом квадратов модулей амплитуд [4, 5] ($\alpha \geq 0$ – локализационный показатель, причем случаи $\alpha = 0$ и $\alpha \rightarrow \infty$ следует отнести к делокализованному состоянию и состоянию экспоненциальной локализации, соответственно). Поэтому, аналогично случаю двумерных квазикристаллов [4, 5], в настоящей работе предположено, что

$$|\psi|^2 \sim |r|^{-2\alpha}. \quad (7)$$

При вычислении $2p$ -нормы волновой функции (7) на достаточно больших квазипериодических фрагментах обнаружено, что кривая $\gamma(p, \alpha)|_{p=4}$ при $-3 \leq \gamma \leq -1.7$ описывается графиком, изображенным на рис. 2. Из рис. 2 видно, что $\gamma = -2.25$ соответствует локализационному показателю $\alpha \approx 0.75$. Согласно классификации по нормировочному интегралу, волновые функции с подобным поведением следует отнести к критическим, так как нормировка функций с $|\psi|^2 \sim |r|^{-2\alpha}$, $\alpha > 0$, в трехмерном случае может быть осуществлена только при $\alpha > 3/2$.

Следует отметить, что при показателе локализации $\alpha \approx 0.75$, характеризующем слабый степенной спад квадрата модуля волновых функций икосаэдрического квазикристалла, зависимость электрической проводимости от температуры должна быть вида $\sigma \sim T^{2\alpha/3} \approx T^{0.5}$ [13,14], что согласуется с экспериментом в низкотемпературной области [13] и является, таким образом, следствием идеальной квазипериодичности структуры.

В заключение авторы благодарят П.А.Коржавого и Э.И.Исаева за внимание к работе и ряд ценных замечаний. Работа выполнена в рамках Международной соросовской программы образования в области точных наук (ISSEP), грант а96-150 и Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), грант 96-02-16143-а.

-
1. D.Schectman, I.Blech, D.Gratis, 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.Китасев, 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.Tokihiko, Phys. Rev. B **43**, 8879 (1991).
 5. H.Tsunetsugu, T.Fujiwara, K.Ueda, and T.Tokihiko, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 1420 (1986).
 6. Д.В.Оленев, Ю.Х.Бекилов, Письма в ЖЭТФ **63**, 101 (1996).
 7. Ю.Х.Бекилов, П.А.Коржавый, Д.В.Оленев, Письма в ЖЭТФ **62**, 349 (1995).
 8. M.A.Marcus, Phys. Rev. B **34**, 5981 (1986).
 9. K.Niiseki and T.Akamatsu, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 2759 (1990).
 10. V.Elser, Phys. Rev. B **32**, 4892 (1985).
 11. C.L.Henley, Phys. Rev. B **34**, 797 (1986).
 12. L.J.Shaw, V.Elser, and C.L.Henley, Phys. Rev. B **43**, 3423 (1991).
 13. S.J.Poon, Adv. Phys. **41**, 303 (1992).
 14. N.F.Mott, *Conduction in Non - Crystalline Materials*, Oxford: Clarendon Press 1987.