

ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ДВУМЕРНОЙ РЕШЕТКИ ФИБОНАЧЧИ*Ю. Х. Векеров*, И. А. Гордеев, Э. И. Исаяев**Московский государственный институт стали и сплавов
117936, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 июня 1999 г.

В приближении сильной связи при помощи метода статистики уровней исследованы электронный спектр и волновые функции новой квазикристаллической структуры — двумерной решетки Фибоначчи. Это самоподобная структура, состоящая из трех элементарных структурных единиц. Рассмотрены «центровая» и «вершинная» декорации данной структуры. Показано, что энергетический электронный спектр двумерной решетки Фибоначчи содержит сингулярную часть, но, в отличие от одномерной решетки Фибоначчи, спектр не содержит иерархической щелевой структуры. Мера разрешенных состояний (мера Лебега) спектра ненулевая и для случая «центральной» декорации близка к единице. Исследован характер локализаций волновых функций и обнаружена их «критичность».

PACS: 71.23.F

1. ВВЕДЕНИЕ

Электронный спектр двумерной квазипериодической структуры изучался на примере паркета Пенроуза, построенного из двух структурных единиц [1]. Было показано, что плотность состояний сильно сингулярна, но мера разрешенных состояний спектра (мера Лебега) не равна нулю. В то же время, как и для одномерной квазикристаллической структуры, волновые функции критичны, т.е. не являются ни локализованными, ни делокализованными, а убывают по степенному закону. Кроме паркета Пенроуза представляется интересным рассмотреть и другие двумерные структурные квазикристаллические образования. В настоящей работе объектом исследования является двумерная квазипериодическая последовательность Фибоначчи. Построение модели проводится следующим образом. Откладывая на плоскости по осям в декартовой системе координат последовательность Фибоначчи, получаем решетку Фибоначчи, состоящую из трех структурных единиц (рис. 1). Площади трех элементарных структурных единиц соотносятся как 1, τ и $\tau^2 = \tau + 1$, где $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ — «золотое сечение». Так же как одномерная решетка Фибоначчи и паркет Пенроуза, двумерная решетка Фибоначчи является самоподобной. На практике подобную структуру можно получить, например, методом литографии.

К настоящему времени не существует достаточно общей методики исследования электронных свойств квазипериодических структур. В силу отсутствия у квазикристаллов трансляционной симметрии традиционные методы расчета зонной структуры твердых тел, основанные на теореме Блоха, непосредственно не применимы. Поэтому, как

* E-mail: vekilov@trf.misa.ac.ru

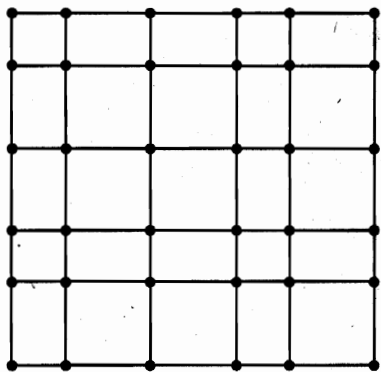


Рис. 1. Фрагмент двумерной решетки Фибоначчи, состоящей из коротких S и длинных L отрезков, $L/S = \tau$, где $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ — «золотое сечение»

это принято [2], объектом исследования были выбраны рациональные аппроксиманты двумерной решетки Фибоначчи. Двумерная решетка Фибоначчи рассматривалась как структурный предел последовательности рациональных аппроксимант с увеличивающимся периодом.

2. ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР

Электронные свойства двумерной решетки Фибоначчи исследовались в приближении сильной связи методом статистики уровней. Для минимизации числа свободных параметров задачи использовался гамильтониан с постоянными интегралами переноса для ближайших соседей. Как показывают результаты для одно-, двух- и трехмерных квазикристаллов, подобный вид гамильтониана позволяет воспроизвести характерные черты квазикристаллического объекта и качественно рассмотреть влияние квазипериодичности на электронную структуру квазикристалла соответствующей размерности [1–6]. В работе рассмотрена «центровая» и «вершинная» декорации аппроксимант атомами одного сорта: атомы с одной s -орбиталью на атом расположены в центрах или в узлах ячеек. Для этого случая гамильтониан системы можно написать в следующем виде:

$$H = \sum_j |j\rangle \varepsilon_j \langle j| + \sum_{j,j \neq i} |i\rangle t_{ij} \langle j|.$$

При наличии в системе атомов только одного компонента диагональные элементы ε_j можно положить равными нулю. В этом случае уравнение Шредингера в приближении сильной связи запишется следующим образом:

$$\sum_j t_{ij} \psi_j = E \psi_i, \quad (1)$$

где интегралы переноса пропорциональны r^{-2} (r — расстояние между атомами) только для ближайших соседей — для атомов, расстояние между которыми не превышает τ (учет последующих соседей не вносит качественно нового и усложняет расчет). Для анализа электронных свойств исследуемого объекта была проведена численная диагонализация матриц гамильтониана уравнения (1) для различных аппроксимант при на-

ложенных периодических граничных условиях и исследовано распределение энергетических уровней.

Гладкость энергетического спектра исследовалась методом статистики уровней (*LS*-метод) [1, 5, 6]. Ключевыми здесь являются два соотношения. Первое — доля соседних межуровневых промежутков с шириной $\Delta E \leq BN^\beta$:

$$D(\beta) = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \theta \left(\beta - \lg_N \left(\frac{\varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j}{B} \right) \right), \quad (2)$$

где N — число атомов в базе аппроксиманты, $B = \varepsilon_N - \varepsilon_1$ — общая ширина зоны, θ — тета-функция Хевисайда. Второе — доля заполнения зоны межуровневыми промежутками с шириной $\Delta E \leq BN^\beta$:

$$F(\beta) = \frac{1}{B} \sum_{j=1}^{N-1} (\varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j) \theta \left(\beta - \lg_N \left(\frac{\varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j}{B} \right) \right). \quad (3)$$

Если $B = \text{const}$, то в термодинамическом пределе вне зависимости от степени гладкости спектра эти функции должны удовлетворять следующим условиям [1, 5, 6]:

$$D(\beta) = 1 \text{ при } \beta > -1 \text{ и } F(\beta) = 0 \text{ при } \beta < -1.$$

Для кристаллических и аморфных систем (с гладкими спектрами) кривые $D(\beta)$ и $F(\beta)$ в термодинамическом пределе испытывают скачок от 0 до 1 при $\beta = -1$ [1, 5, 6]. Поэтому считается, что энергетический спектр является негладким или сингулярным, если в термодинамическом пределе зависимость величины межуровневых промежутков от размера системы отличается от закона $1/N$.

Локализационное поведение волновых функций двумерной решетки Фибоначчи изучалось методом статистики $2p$ -норм волновых функций [1, 5]. Последняя определяется следующим образом:

$$\|\psi\|_{2p} \equiv \frac{\sum_n |\psi_n|^{2p}}{\left(\sum_n |\psi_n|^2\right)^p}, \quad (4)$$

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

Рассматривая двумерную решетку Фибоначчи как структурный предел ряда аппроксимант с растущим периодом, можно найти термодинамический предел в поведении кривых, описывающих статистику распределения $2p$ -норм собственных векторов гамильтониана уравнения (1). Статистический анализ распределения $2p$ -норм волновых функций осуществлялся расчетом величины $I_{2p}(\gamma)$ [1, 5], описывающей долю состояний, у которых $2p$ -нормы $\|\psi\|_{2p} \leq N^\gamma$, т. е.

$$I_{2p}(\gamma) \equiv \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \theta(\gamma - \lg_N \|\psi^{(n)}\|_{2p}). \quad (5)$$

Классификация волновых функций проводилась по нормировочному интегралу [1]. 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».

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В работе исследовались четыре аппроксиманты двумерной решетки Фибоначчи: $5/3$, $8/5$, $13/8$, $21/13$. При вершинной декорации элементарные ячейки данных аппроксимант содержат в базисе соответственно 64, 169, 441, 1156 атомов. При центральной декорации элементарные ячейки аппроксимант содержат в базисе соответственно 49, 144, 400, 1089 атомов. На рис. 2 показаны графики интегральной плотности состояний, рассчитанные по значениям энергетических уровней в 21 k -точке, для аппроксимант $8/5$, $13/8$, $21/13$ решетки Фибоначчи.

На рисунке 2 видно, что кривые интегральной плотности состояний довольно быстро сходятся и не обнаруживают наличия иерархической щелевой структуры, характерной для канторова множества спектра одномерного квазикристалла. Для аппроксимант $8/5$, $13/8$ и $21/13$ были рассчитаны величины $D(\beta)$ и $F(\beta)$. Расчеты свидетельствуют, что кривые $D(\beta)$ для этих трех аппроксимант почти сходятся к термодинамическому пределу в области $\beta < -1$. Это означает, что ширина всех межуровневых промежутков в пределе $N \rightarrow \infty$ меньше, чем в традиционных системах (для кристаллических и аморфных систем в термодинамическом пределе зависимость величин этих промежутков от размера системы определяется соотношением $\Delta E \sim 1/N$ [1]). Расчет зависимости $F(\beta)$ для упомянутых аппроксимант в районе $\beta > -1$ показывает, что конечная доля зоны заполнена более широкими межуровневыми промежутками, чем в традиционных системах. Итак, полученные результаты показывают, что при $N \rightarrow \infty$ энергетический спектр решетки Фибоначчи содержит сингулярную часть.

Расчет плотности состояний для аппроксимант $8/5$, $13/8$, $21/13$ был выполнен при помощи метода треугольников с использованием 21 k -точки неприводимой части зоны Бриллюэна соответствующей аппроксиманты. На рисунках 3, 4 показаны кривые плотности электронных состояний. Как следует из рис. 4, для случая вершинной декорации вид спектра зависит от «четности» номера аппроксиманты, что свидетельствует о наличии некоторой топологической особенности двумерной решетки Фибоначчи. Кривые плотности электронных состояний с ростом порядка аппроксиманты становятся менее гладкими и более «пиковыми». Это подтверждает вывод о присутствии в энергетическом спектре рассматриваемой структуры сингулярной части, так как в противном случае наблюдалась бы сходимости плотности электронных состояний к гладкой кривой. Гладкость спектра зависит от энергетического диапазона: энергетический спектр более гладкий в области малых энергий спектра, а сильные осцилляции присутствуют, в основном, при высоких энергиях в спектре. Однако с ростом порядка аппроксиманты длина гладкого участка энергетического спектра уменьшается. Поэтому можно полагать, что в термодинамическом пределе (квазикристалл) сильные осцилляции плотности состояний, отражающие наличие сингулярной части в спектре, присутствуют во всем

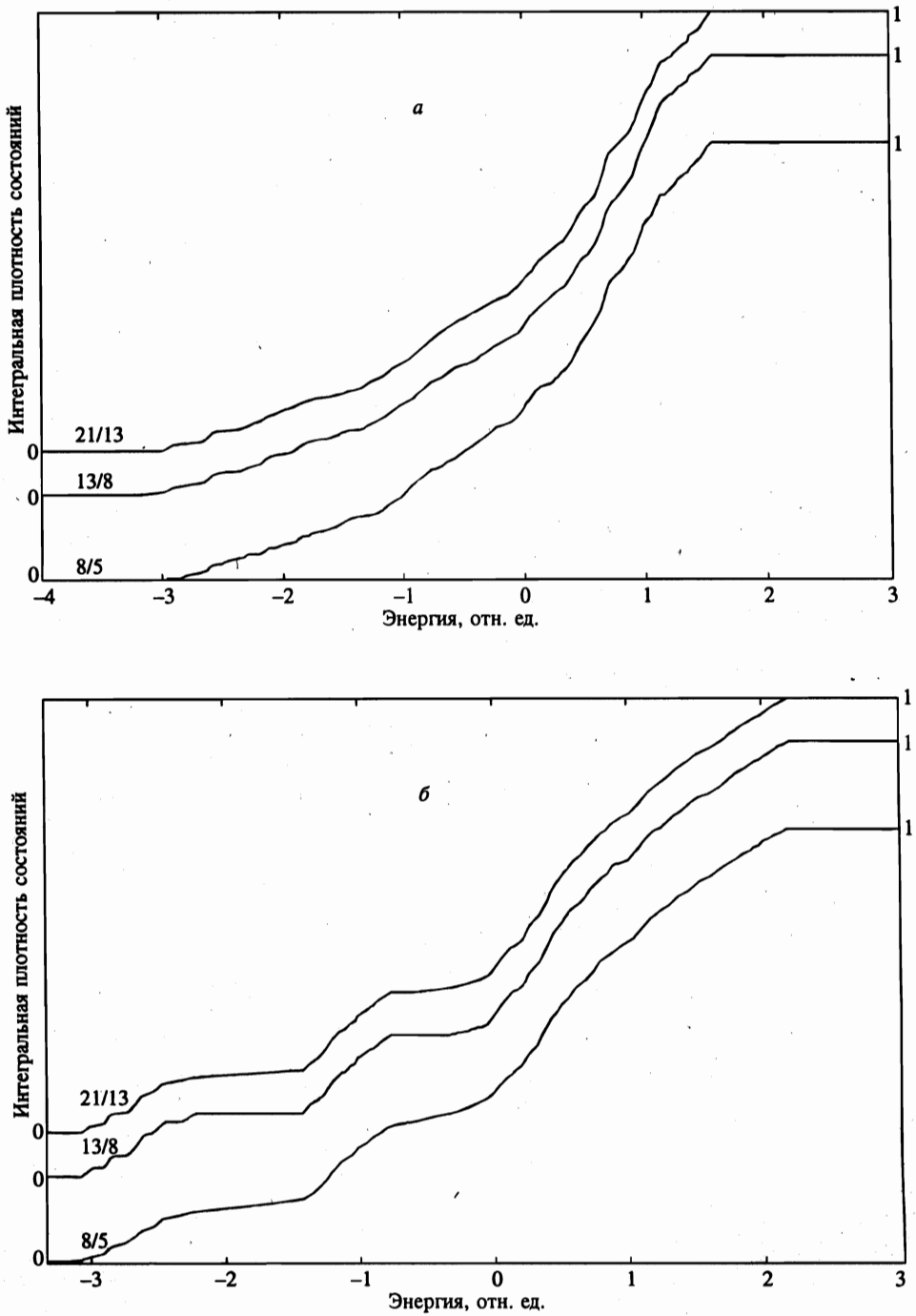


Рис. 2. Интегральная плотность состояний для периодических аппроксимант 8/5, 13/8, 21/13 двумерной решетки Фибоначчи при центральной декорации (а) и узловой декорации (б)

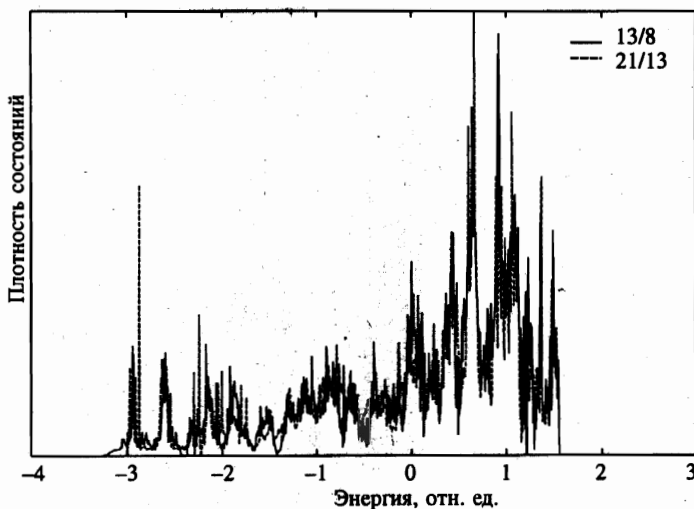


Рис. 3. Плотность состояний для периодических аппроксимантов 13/8, 21/13 двумерной решетки Фибоначчи при центральной декорации

диапазоне энергий электронного спектра, свидетельствуя о том, что энергетические зоны являются плоскими, практически бездисперсными, с нулевой групповой скоростью электронов.

Расчет плотности электронных состояний позволил определить меры Лебега энергетических спектров соответствующих аппроксимантов. Мера Лебега энергетического спектра рассчитывалась как общая длина разрешенных участков спектра. Нормированные на величину $B = \varepsilon_N - \varepsilon_1$ меры Лебега энергетических спектров аппроксимантов 5/3, 8/5, 13/8, 21/13 составили 1.0, 0.94, 0.98, 1.0 для случая центральной декорации и 0.70, 1.0, 0.69, 0.99 для случая вершинной декорации. Таким образом, мера разрешенных участков спектра является конечной и для центральной декорации близкой к единице.

В случае центральной декорации зависимость меры Лебега энергетического спектра от порядка аппроксимантов для двумерной решетки Фибоначчи слабая в отличие от одномерного квазикристалла, где наблюдается уменьшение меры Лебега по степенному закону в зависимости от размера системы. Довольно малое различие мер Лебега энергетических спектров для двух последних рассчитанных аппроксимантов свидетельствует о том, что энергетический спектр двумерной решетки Фибоначчи занимает на энергетической шкале область конечной ширины. Кроме того, близкие к единице значения нормированных мер Лебега энергетических спектров говорят о том, что в спектре решетки Фибоначчи при центральной декорации нет щелей существенной величины.

При вершинной декорации наблюдается сильная зависимость от четности аппроксимантов. Для нечетных аппроксимантов мера Лебега, так же как и для случая центральной декорации, близка к единице. Для четных аппроксимантов мера Лебега близка к 0.7, что позволяет утверждать наличие в спектре щелей значительной величины. Полученные результаты отличаются от мер Лебега аппроксимантов паркета Пенроуза. Последние составляют примерно 0.62 [1]. В соответствии с этим следует ожидать различий в проводящих свойствах этих двух структур.

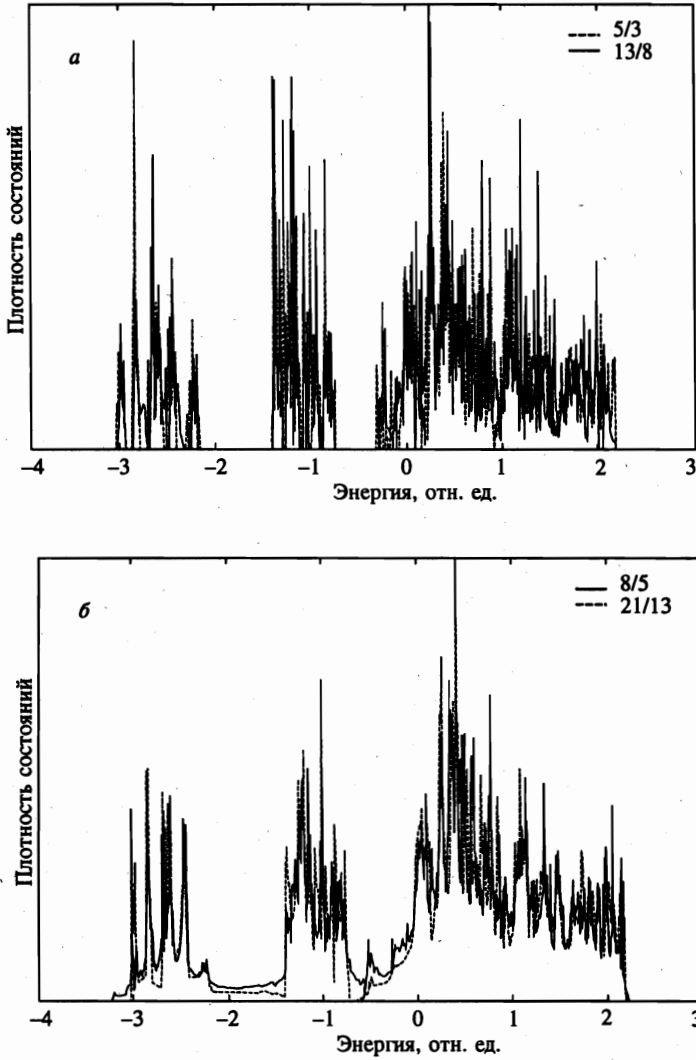


Рис. 4. Плотность состояний для четных периодических аппроксимант 5/3, 13/8 (а) и нечетных периодических аппроксимант 8/5, 21/13 (б) двумерной решетки Фибоначчи при вершинной декорации

Для трех аппроксимант решетки Фибоначчи, 8/5, 13/8, 21/13, были рассчитаны величины $I_8(\gamma)$. Расчеты свидетельствуют о сходимости в термодинамическом пределе кривых $I_8(\gamma)$ в малой области $\gamma \approx -2.2$ для центральной и $\gamma \approx -2.3$ для вершинной декораций. Кроме того, с ростом номера аппроксиманты кривые $I_8(\gamma)$ приближаются к ступенчатой функции со ступенькой, расположенной около $\gamma \approx -2.3$. Это означает, что в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) $2p$ -нормы ($p = 4$) почти всех волновых функций решетки Фибоначчи зависят от размера системы как $\|\psi\|_8 \approx N^\gamma$, где $\gamma \approx -2.3$.

В случае делокализованного состояния зависимость $2p$ -нормы волновой функции от размера системы, как следует из (4), равна $\|\psi\|_{2p}^{ext} \approx N^{1-p}$, экспоненциально ло-

кализованные волновые функции характеризуются $2p$ -нормой $\|\psi\|_{2p}^{exp.loc} \approx 1$. Найденная зависимость $2p$ -норм ($p = 4$) волновых функций решетки Фибоначчи 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 убыванием квадратов модулей амплитуд [1, 5] ($\alpha \geq 0$ — локализационный показатель, причем случаи $\alpha = 0$ и $\alpha \rightarrow \infty$ следует отнести, соответственно, к делокализованному состоянию и к состоянию экспоненциальной локализации). Поэтому было предположено, что

$$|\psi|^2 \sim |r|^{-2\alpha}. \quad (6)$$

На основе вычисленной $2p$ -нормы волновой функции (6) для достаточно больших квазипериодических фрагментов рассчитана зависимость $\gamma(p, \alpha)|_{p=4}$ при $-3 \leq \gamma \leq -1.7$. Результаты были получены численно для аппроксиманты 34/21 решетки Фибоначчи — до сходимости к термодинамическому пределу. Выполненные расчеты показывают, что $\gamma \approx -2.3$ соответствует локализационному показателю $\alpha \approx 0.48$ и $\alpha \approx 0.44$ соответственно для центральной и вершинной декораций. 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 двумерном случае может быть осуществлена только при $\alpha > 1$.

Таким образом, в случае центральной декорации энергетический спектр не содержит больших щелей, квазипериодичность структуры приводит к сильным осцилляциям во всем диапазоне энергий. Большинство волновых функций двумерной решетки Фибоначчи критичны и проявляют степенной характер уменьшения квадратов модулей амплитуд в зависимости от расстояния. Локализационный показатель α равен 0.48 (центровая декорация) и 0.44 (вершинная декорация) и по порядку величины совпадает с локализационным показателем $\alpha \approx 0.5$, полученным в работе [1] для паркета Пенроуза. В энергетическом спектре паркета Пенроуза присутствует сингулярная часть, спектр более гладкий в области низких энергий и сильно осциллирующий в области высоких энергий. С ростом порядка аппроксиманты спектр становится более «пиковым» [1]. Это хорошо согласуется с результатами настоящей работы, что позволяет сделать вывод об общности свойств электронного спектра различных квазипериодических двумерных структур, таких как паркет Пенроуза и двумерная решетка Фибоначчи, хотя их проводящие свойства могут быть различными.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты исследования показывают, что электронный спектр двумерной решетки Фибоначчи имеет такие же особенности, как и спектр паркета Пенроуза. Спектр содержит сингулярную часть, но не является самоподобным. Большинство волновых функций «критичны», т. е. не являются ни локализованными, ни делокализованными и убывают с расстоянием по степенному закону. Мера разрешенных участков спектра, в отличие от одномерной структуры, конечна. Очевидно, что общие свойства спектров различных двумерных квазипериодических структур должны быть похожи. Различия в спектрах рассмотренной структуры и паркета Пенроуза существуют только в локализационных показателях волновых функций и мере разрешенных промежутков. Волно-

вые функции двумерной решетки Фибоначчи менее локализованы, а мера разрешенных промежутков при центральной декорации близка к единице. Последнее указывает на возможность экспериментального наблюдения закона Ома.

В заключение авторы благодарят Д. В. Оленеву за внимание к работе и ценные замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке Шведской Королевской Академии Наук.

Литература

1. H. Tsunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda, and T. Tokihiro, *Phys. Rev. B* **43**, 8879 (1991).
2. Д. В. Оленев, Э. И. Исаев, Ю. Х. Векилов, *ЖЭТФ* **113**, 1009 (1998).
3. П. А. Калугин, А. Ю. Китаев, Л. С. Левитов, *Письма в ЖЭТФ* **41**, 119 (1985).
4. M. Kohmoto, B. Sutherland, and C. Tang, *Phys. Rev. B* **35**, 1020 (1987).
5. H. Tsunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda, and T. Tokihiro, *J. Phys. Soc. Jap.* **55**, 1420 (1986).
6. L. Yamamoto and T. Fujiwara, *Phys. Rev. B* **51**, 8841 (1995).