

研究快讯

二维单原子斐波那契类准晶电子能谱特性研究*

杨湘波¹⁾ 邢 达²⁾ 刘有延³⁾

¹⁾ 华南师范大学激光生命科学研究所以, 广州 510631; 华南理工大学物理系, 广州 510640; 广东工业大学, 广州 510090)

²⁾ 华南师范大学激光生命科学研究所以, 广州 510631)

³⁾ 华南理工大学物理系, 广州 510640)

(2001 年 3 月 21 日收到, 2001 年 7 月 5 日收到修改稿)

利用单电子、紧束缚、最近邻座模型, 在重整化群的基础上, 用分解-消元法分析了二维单原子斐波那契类准晶 $FC(n)$ 的电子能谱分裂规律, 数值计算了其电子能谱值, 发现在一级近似下, 该类二维准晶格中全部都只存在 $n \times n, n \times (n+1), (n+1) \times (n+1)$ 等三种原子簇分子, 相应的能谱按 Y_{m-n-l} 方式分裂, 得出了其电子能谱的能级数目通式, 发现描述其能级数目的参量存在所谓的“斐波那契类数集合”, 并且确定了该集合的前 11 个整数的稳定值, 找出了有关斐波那契类数集合的经验公式, 分析结果与数值计算值相符.

关键词: 斐波那契类, 准晶, 电子能谱, 重整化群

PACC: 7170, 7125C

1 引 言

Schechtman 等人于 1984 年发现准晶^[1]以来, 准晶的许多物理特性得到了广泛研究, 对准晶电子能谱性质的研究就是其中的热点之一. 人们发现一维斐波那契(Fibonacci)准晶的电子能谱是套层结构(cantor-like set)的, 具有严格的自相似性, 这主要是由于一维斐波那契链具有套层结构的原因^[2-5]. 二维喷入斯(Penrose)准晶也具有套层结构, 但较前者复杂得多, 因此, 其电子谱结构也具有较复杂的套层结构. 二维 Ni-Cr 十二次准晶也具有非常有趣而独特的电子性质^[6]. 对于具有一种原子、两种键长的二维单原子斐波那契准晶格, Ueda 等人^[7]定量地计算了它的电子能谱和导电性; Ashraff 等人^[8]定性地分析了它的电子谱、电子态密度及动力学响应函数的性质, 并用数值解进行验证; 傅秀军和刘有延^[9]应用他们提出的分解消元法(decomposition-decimation)研究了它的电子能谱分裂规律, 文献 [10, 11] 曾利用该方法详细研究了具有三种原子、一种键长的二维

斐波那契准晶的电子能谱分裂规律.

在斐波那契准晶和互生长模型(intergrowth sequence)准晶^[12]研究成果的基础上, 傅秀军、刘有延等人^[13]于 1997 年构造了一种包括一维斐波那契准晶模型(记为 $FC(1)$)和互生长模型(记为 $FC(2)$)在内的一类、能够用严格的高维投影法得到的准晶链模型, 他们称之为斐波那契类准晶(Fibonacci-class quasilattices, 记为 $FC(n)$). 这种一维准晶链的电子能谱特性已经由傅秀军等人^[13]进行了较为详尽的研究, 发现了许多重要的性质. 我们已经详细地研究了按该种准周期序列排列的多层光学介质系统的光传输性质^[14], 发现了该系统存在的重要的光开关特性, 我们还于近期解析地探求了按 $FC(n)$ 准周期序列排列的铁电畴超晶格系统的二次谐波谱的规律^[15]. 但对二维单原子斐波那契类准晶的电子能谱性质的研究目前还未见报道. 本文构造了一类二维单原子斐波那契类准晶, 使用重整化群方法, 研究了该类二维准晶的电子能谱性质, 发现它们的电子能谱具有许多非常有趣的共同特性.

Niu 和 Nori^[16]曾通过弱键近似, 应用重整化群

* 国家自然科学基金(批准号: 10004003)和广东省高教厅基金(批准号: 990045)资助的课题.

研究了一维斐波那契准晶链的电子能谱.在此基础上,刘有延等人^[17]发展了一种分解-消元法研究斐波那契链电子能谱分裂规律,此法可给出一幅简明清晰的电子能谱物理图像.其优点在于:既可以计算大的原子簇,研究高层亚能带结构;又可避免遇到高阶微扰计算带来的困难.本文应用此法来研究该类二维单原子斐波那契类准晶的电子能谱分裂规律.本文介绍该类二维单原子准晶的构造方法.利用座模型和分解-消元法等工具研究该类二维准晶的电子能谱分裂规律.

2 二维单原子斐波那契类准晶的构造

本文研究的二维单原子斐波那契类准晶,每种都是由相应的一维斐波那契类准晶链 $FC(n)$ 按纵横两个方向拼砌而成的网状结构.具体规则如下.

1) 首先,按照斐波那契类准晶的生成规则^[13]

$$S_0 = B,$$

$$B \rightarrow B^{n-1}A, A \rightarrow B^{n-1}AB, \quad (1)$$

写出一条横向斐波那契类准晶格中的某种 $FC(n)$ 链

$$\underbrace{B \dots B}_{n-1 \text{ 个}} A \dots \dots \underbrace{B \dots B}_{n \text{ 个}} A \dots \dots \quad (2)$$

2) 然后,设定上述用生成规则得到的(2)式链中的“B”单元决定该种二维单原子准晶格的横向链的原子间距为“短”(2)式链中的“A”单元决定其原子间距为“长”.

3) 最后,按照第2)步骤中的横向链相同的序列得出纵向链,则可得到该种二维单原子准晶格.

如图1所示为用上述规则得到的 $FC(2)$ 二维单原子准晶格,图2为 $FC(3)$ 二维单原子准晶格.

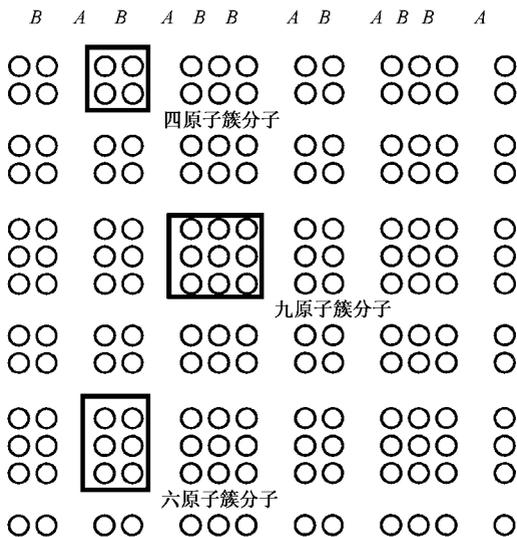


图1 二维单原子 $FC(2)$ 准晶格

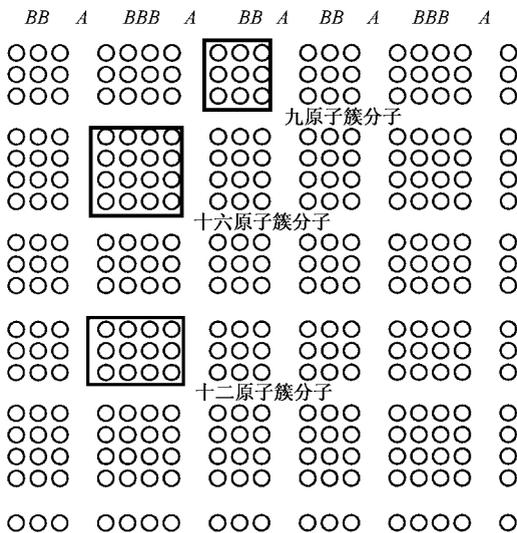


图2 二维单原子 $FC(3)$ 准晶格

3 电子能谱分裂规律

3.1 电子能谱数值计算结果

对于该类二维单原子斐波那契类准晶,我们采用单电子、紧束缚的座模型,为此假定原子局域在每个晶格点中心.哈密顿矩阵可写为

$$H = \sum_i |i\rangle E_i \langle i| + \sum_{i,j} |i\rangle t_{ij} \langle j|, \quad (3)$$

其中 $|i\rangle$ 是第 i 个原子的 Wannier 基矢; \sum' 表示对最近邻求和, t_{ij} 是跃迁矩阵元.对于单电子、单键长、紧束缚模型,一级近似下只需考虑最近邻原子间相互作用,此时 t_{ij} 可取作 -1.0 ; E_i 是原子座能量(site

energy),为了计算的简单,在数值计算中我们取 $E_i = 0.0$.图3和图4分别给出二维单原子 $FC(2)$ 准晶和二维单原子 $FC(3)$ 准晶的电子能谱数值计算结果.从图中可以看出, $FC(2)$ 电子能谱的一级分裂方式为 Y_{2-2-1} 方式,即一分为十三; $FC(3)$ 电子能谱的一级分裂方式为 Y_{3-2-1} 方式,即一分为二十五.其中 Y_{m-n-l} 参数的意义为 m 指 $FC(m)$ 准晶, n 代表 n 维准晶, l 表示该种准晶中具有原子种类数目.

3.2 电子能谱分裂规律的重整化群分析

得出图3和图4的计算结果后,我们现在用重

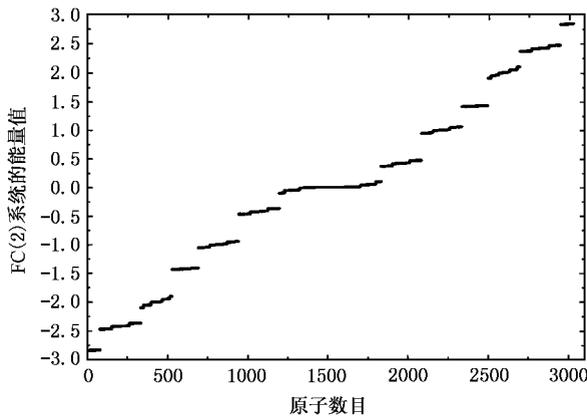


图3 二维单原子 FCC(2)准晶电子能谱分裂图(该系统的原子总数为 $N=3025$ 个,座能量选取 $E=0.0$,最近邻相互跃迁矩阵元 $t_{\text{最近邻}}=-1.0$,其他相互跃迁矩阵元 $t_{\text{非最近邻}}=0.0$)

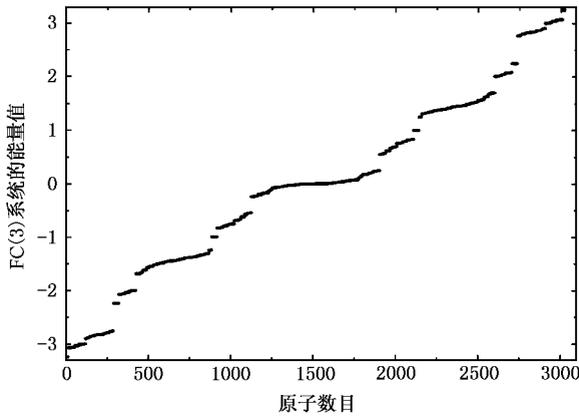


图4 二维单原子 FCC(3)准晶电子能谱分裂图(该系统的原子总数为 $N=3025$ 个,座能量选取 $E=0.0$,最近邻相互跃迁矩阵元 $t_{\text{最近邻}}=-1.0$,其他相互跃迁矩阵元 $t_{\text{非最近邻}}=0.0$)

整化群方法对它进行定性分析.利用傅秀军、刘有延^[9]应用的分解消元法分析该类斐波那契类准晶族知道:

1)当不考虑原子之间的相互作用时,即 $t_{ij}=0$ 时,整个系统只由一种孤立的原子构成.由于所有原子的座能量 E_i 皆取为 0.0 ,故此时系统只有一个高度简并的能级 0.0 .

2)当只考虑原子之间的最近邻相互作用时,即最近邻相互跃迁矩阵元取 $t_{\text{最近邻}}=-1.0$,其他相互跃迁矩阵元取 $t_{\text{非最近邻}}=0.0$;则对于斐波那契类的各种 FCC(n)准晶,此时所有系统中都只存在三种分子(或者孤立原子簇): $n \times n$ 原子簇分子、 $n \times (n+1)$ 原子簇分子、 $(n+1) \times (n+1)$ 原子簇分子.如图1和图2所示,对于图1的 FCC(2)准晶,在只考虑最近

邻相互作用的时候,只存在四(2×2)原子簇分子、六(2×3)原子簇分子和九(3×3)原子簇分子三种分子.对于图2的 FCC(3)准晶中,在只考虑最近邻相互作用的时候,只存在九(3×3)原子簇分子、十二(3×4)原子簇分子和十六(4×4)原子簇分子三种分子.

其中, $n \times (n+1)$ 原子簇分子的电子能谱在一级近似下是非简并的,将分裂成 $n \times (n+1)$ 条能级; $n \times n$ 原子簇分子和 $(n+1) \times (n+1)$ 原子簇分子在一级近似下,分裂出的能级都有简并能级存在,其分裂规律非常复杂,存在一种我们称之为 Y_{m-n-l} 数集的有趣现象,我们在3.3节予以详细讨论.

3.3 电子能谱的斐波那契类数集 $\{Y_{m-n-l}\}$

$n \times n$ 原子簇分子在一级近似下,分裂规律非常复杂,其电子能谱的总能级数目满足

$$N_{n \times n} = n \times n, \quad (4)$$

$$N_{n \times n} = \begin{cases} 2 + 2 \times 1 & n = 2, \\ \lfloor n/2 \rfloor \\ n + 2 \sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} (1 + 2a_i) & n > 2. \end{cases} \quad (5)$$

在(5)式中;“ $\lfloor x \rfloor$ ”表示对变量 x 取整,等式右边的第一个“ n ”表示在分裂的电子能谱中间存在一条简并度为 n 的简并能级,其能量值为 0 ;等式右边的第一个“ 2 ”表示求和号“ \sum ”右边的所有能级都是以 0 为对称点,上下完全对称的;“ 1 ”表示在分裂的电子能谱的上、下两部分中都间隔存在 1 条非简并能级;等式右边的第二个“ 2 ”表示上述每条非简并能级之间间隔着 a_i 条简并度皆为 2 的简并能级; a_i 为一组特征数,随着 n 数目的增大,逐渐趋于一组稳定正整数,构成所谓的“斐波那契类数集 $\{Y_{m-n-l}\}$ ”,其参数的含义同前所述.在我们的计算机允许的条件下,得出了斐波那契类数集的前 11 个整数的稳定值为

$$\begin{aligned} a_1 &= 1, a_2 = 3, a_3 = 4, a_4 = 6, a_5 = 7, a_6 = 9, \\ a_7 &= 11, a_8 = 12, a_9 = 14, a_{10} = 15, a_{11} = 17. \end{aligned} \quad (6)$$

另外,我们还数值计算得出了边长为 101 个原子的二维正方形准晶块的电子能谱一级分裂方式为

$$10201 = 101 \times 101 = 101 + 2 \sum_{i=1}^{50} (1 + 2a_i), \quad (7)$$

其中, a_i ($i=1, \dots, 50$)自 $i=12$ 开始分别为 $20, 18, 24, 22, 26, 27, 29, 30, 32, 34, 37, 35, 40, 42, 44, 44, 47, 51, 48, 56, 55, 57, 60, 64, 65, 68, 73, 74, 77, 80, 88, 87,$

96, 97, 107, 115, 125, 143, 164. 图 5 给出其经验公式拟合曲线图, 该经验公式为

$$\begin{aligned} a_i &= ci + di^f, c = 1.68693 \pm 0.02006, \\ d &= (3.4566 \times 10^{-16}) \pm (6.6024 \times 10^{-16}), \\ f &= 10.20091 \pm 0.44248, \end{aligned} \quad (8)$$

该经验公式对于推求斐波那契类数的渐进行为具有参考意义.

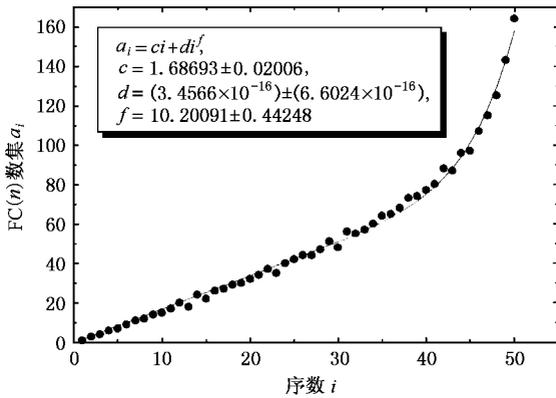


图 5 $101 \times 101 = 10201$ 原子簇分子的斐波那契类数集合拟合曲线

另外, 由(5)式可知, $n \times n$ 原子簇分子的一级分裂电子能谱中共有

$$N'_{n \times n} = 1 + 2 \sum_{i=1}^{[n/2]} (1 + a_i) \quad (9)$$

条不同的能量值的谱线, 扣除 $n \times n$ 原子簇分子、 $n \times (n+1)$ 原子簇分子和 $(n+1) \times (n+1)$ 原子簇分子间的能量值相同的重合能级, 我们得出二维单原子斐波那契类准晶 $FC(n)$ ($n > 1$) 系统的电子能谱在一级分裂时具有的能量值不同的能级数目的通式为(当 $n=1$ 时, $FC(1)$ 准晶(斐波那契准晶)其电子能谱的分裂规律已由傅秀琴等人^[12]进行了研究, 此处不再讨论)

1) n 为奇数时, 令 $n = 2k + 1$ ($k \geq 1$),

$$\begin{aligned} N_{FC(2k+1)} &= 1 + \chi(k+2) \chi(2k+1) + 2a'_{k+1} \\ &+ 2 \sum_{i=1}^k (a_i + a'_i), \end{aligned} \quad (10)$$

其中 a_i 和 a'_i 分别为 $(2k+1) \times (2k+1)$ 原子簇分子和 $(2k+2) \times (2k+2)$ 原子簇分子的斐波那契类数, 由于斐波那契类数只有当 $FC(n)$ 的 n 足够大时(等价于此时的 k 足够大时)才趋于稳定, 故相邻两代的全部斐波那契类数不一定完全相同.

2) n 为偶数时, 令 $n = 2k$ ($k \geq 1$),

$$N_{FC(2k)} = 1 + 2k(2k+3) + 2 \sum_{i=1}^k (a_i + a'_i), \quad (11)$$

其中 a_i 和 a'_i 分别为 $(2k) \times (2k)$ 原子簇分子和 $(2k+1) \times (2k+1)$ 原子簇分子的斐波那契类数.

3.4 与数值计算结果的比较

为了和数值计算结果图 3 和图 4 进行比较, 对于二维单原子 $FC(2)$ 准晶和 $FC(3)$ 准晶, 我们在只考虑原子之间的最近邻相互作用时, 即令

$$t_{ij} = \begin{cases} t & (\text{最近邻}), \\ 0 & (\text{非最近邻}) \end{cases} \quad (12)$$

时, 分别精确写出 $FC(2)$ 准晶中存在的 2×2 原子簇分子、 2×3 原子簇分子和 3×3 原子簇分子的哈密顿矩阵:

$$H_4 = \begin{pmatrix} E & t & t & 0 \\ t & E & 0 & t \\ t & 0 & E & t \\ 0 & t & t & E \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$H_6 = \begin{pmatrix} E & t & 0 & t & 0 & 0 \\ t & E & t & 0 & t & 0 \\ 0 & t & E & 0 & 0 & t \\ t & 0 & 0 & E & t & 0 \\ 0 & t & 0 & t & E & t \\ 0 & 0 & t & 0 & t & E \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$H_9 = \begin{pmatrix} E & t & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t & E & t & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & E & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & 0 & E & t & 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & t & E & t & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & t & 0 & t & E & 0 & 0 & t \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & E & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & t & E & t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & t & E \end{pmatrix}, \quad (15)$$

解析求解有关(13)(14)和(15)式的本征方程, 分别得到上述三种原子簇分子的本征能量分别为

$$E_4 = 2t \quad (\text{二重简并}), -2t, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} E_6 &= (\sqrt{2} + 1)t, t, (\sqrt{2} - 1)t, \\ &- (\sqrt{2} - 1)t, -t, -(\sqrt{2} + 1)t, \end{aligned} \quad (17)$$

$$E_9 = 2\sqrt{2}t \quad (\text{二重简并}),$$

$$\alpha \quad (\text{三重简并}), -\sqrt{2}t \quad (\text{二重简并}), -2\sqrt{2}t \quad (18)$$

从而得出在只考虑最近邻相互作用的情况下, 二维

单电子原子 FC(2) 准晶将具有十三个能量值不同的能级

$$\begin{aligned} \text{FC}(2): e_1 &= 2\sqrt{2}t, e_2 = (\sqrt{2} + 1)t, \\ e_3 &= 2t, e_4 = \sqrt{2}t \text{ (二重简并)}, \\ e_5 &= t, e_6 = (\sqrt{2} - 1)t, e_7 = \alpha \text{ (五重简并)}, \\ e_8 &= -e_6, e_9 = -e_5, e_{10} = -e_4 \text{ (二重简并)}, \\ e_{11} &= -e_3, e_{12} = -e_2, e_{13} = -e_1. \end{aligned} \quad (19)$$

我们称这十三条能谱所构成的分裂方式叫 Y_{2-2-1} 谱分裂方式. 从图 3 可以看出, 虽然, 由于真实 FC(2) 单原子二维准晶系统的电子能谱存在多级分裂的精细结构而使各条一级分裂谱线发生进一步的劈裂; 但是, 其十三条一级分裂谱线的每一条的中心正是 (19) 式中的 $t = -1.0$ 时得到的数值. 故该结论和图 3 的数值计算结果是一致的.

同理, 精确写出 FC(3) 准晶中存在的 3×3 原子簇分子、 3×4 原子簇分子和 4×4 原子簇分子的哈密顿矩阵, 并且解析求解有关的本征方程, 可得到上述三种原子簇分子的本征能量分别为

E_9 满足 (18) 式,

$$\begin{aligned} E_{12} &= (u + \sqrt{2})t, (v + \sqrt{2})t, ut, \\ &(\sqrt{2} - v)t, vt, (u - \sqrt{2})t, \\ &(\sqrt{2} - u)t, -vt, (v - \sqrt{2})t, -ut, \\ &-(v + \sqrt{2})t, -(u + \sqrt{2})t, \end{aligned} \quad (20)$$

其中

$$u = \frac{\sqrt{5} + 1}{2}, \quad v = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}, \quad (21)$$

$$\begin{aligned} E_{16} &= 2ut, \sqrt{5}t \text{ (二重简并)}, 2vt, \\ &t \text{ (二重简并)}, \alpha \text{ (四重简并)}, \\ &-t \text{ (二重简并)}, -2vt, -\sqrt{5}t \text{ (二重简并)}, -2ut, \end{aligned} \quad (22)$$

从而得出在只考虑最近邻相互作用的情况下, 二维单原子 FC(3) 准晶将具有二十五个能量值不同的能级, 即

$$\begin{aligned} \text{FC}(3): e_1 &= 2ut, e_2 = (u + \sqrt{2})t, \\ e_3 &= 2\sqrt{2}t, e_4 = \sqrt{5}t \text{ (二重简并)}, \\ e_5 &= (v + \sqrt{2})t, e_6 = ut, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} e_7 &= \sqrt{2}t \text{ (二重简并)}, e_8 = 2vt, \\ e_9 &= t \text{ (二重简并)}, e_{10} = (\sqrt{2} - v)t, \\ e_{11} &= vt, e_{12} = (u - \sqrt{2})t, \\ e_{13} &= \alpha \text{ (七重简并)}, e_{14} = -e_{12}, \\ e_{15} &= -e_{11}, e_{16} = -e_{10}, \\ e_{17} &= -e_9 \text{ (二重简并)}, e_{18} = -e_8, \\ e_{19} &= -e_7 \text{ (二重简并)}, e_{20} = -e_6, \\ e_{21} &= -e_5, e_{22} = -e_4 \text{ (二重简并)}, \\ e_{23} &= -e_3, e_{24} = -e_2, e_{25} = -e_1. \end{aligned} \quad (23)$$

我们称这二十五条能谱所构成的分裂方式叫 Y_{3-2-1} 谱分裂方式. 从图 4 可以看出, 虽然, 由于真实 FC(3) 单原子二维准晶系统的电子能谱存在多级分裂到精细结构而使各条一级分裂谱线发生进一步的劈裂; 但是, 其二十五条一级分裂谱线的每一条的中心正是 (23) 式中的 $t = -1.0$ 时得到的数值. 故该结论和图 4 的数值计算结果是一致的.

4 结 论

首先, 本文简介了二维单原子斐波那契类准晶的构造方法, 然后, 利用单电子、紧束缚、最近邻座模型, 我们数值地计算了二维单电子斐波那契类中的 FC(2) \ FC(3) 准晶的电子能谱; 并且在重整化群基础上, 用分解-消元法分析了二维单原子斐波那契类准晶 FC(n) 的电子能谱分裂的共同规律, 发现在一级近似下, 该类二维准晶格中全部都只存在 $n \times n$, $n \times (n+1)$ 和 $(n+1) \times (n+1)$ 等三种原子簇分子, 相应的能谱按 Y_{m-n-l} 方式分裂; 接着, 我们又分析得出了其电子能谱的总能级数目通式、各条能级简并度规律以及具有能量值不同的能级数目公式, 发现描述其能级数目的参量存在所谓的“斐波那契类数集合”, 并且确定了该集合的前 11 个整数的稳定值, 找出了有关具有 10201 个原子的二维正方形准晶块的斐波那契类数集合的经验拟合公式, 最后, 解析地计算了 FC(2) 准晶和 FC(3) 准晶的电子能谱值, 并与数值计算值进行了比较, 发现二者是一致的.

[1] D. S. Schechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.*, **53** (1984), 1951.

[2] W. M. Zheng, *Phys. Rev.*, **A35** (1987), 1467.

[3] Y. Y. Liu, R. Riklund, *Phys. Rev.*, **B35** (1987), 6034.

[4] Y. Y. Liu, *Mater. Sci. Forum*, **22-24** (1987), 499.

[5] F. Nori, J. P. Rodriguez, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 2207.

- [6] X. B. Yang, Y. Y. Liu, *Acta Physica Sinica*, **43**(1994), 416(in Chinese) 杨湘波、刘有延 物理学报 **43**(1994), 416 .
- [7] K. Ueda, H. Tsunetsugu, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1272.
- [8] J. A. Ashraff, J. M. Luck, R. B. Stinchcombe, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 4314.
- [9] X. J. Fu, Y. Y. Liu, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 10808.
- [10] X. B. Yang, Y. Y. Liu, *Acta Physica Sinica (Overseas Edition)*, **4**(1995), 510.
- [11] X. B. Yang, Y. Y. Liu, *Phys. Rev.*, **B56**(1997), 8054.
- [12] X. Q. Huang, Y. Y. Liu *et al.*, *Solid State Commun.*, **87** (1993), 601.
- [13] X. J. Fu, Y. Y. Liu, P. Q. Zou, W. Sritrakool, *Phys. Rev.*, **B55**(1997), 5555.
- [14] X. B. Yang, Y. Y. Liu, *Acta Physica Sinica*, **47**(1995), 851(in Chinese) 杨湘波、刘有延 物理学报 **47**(1995), 851 .
- [15] X. B. Yang, Y. Y. Liu, *Acta Physica Sinica*, **49**(2000), 1185 (in Chinese) 杨湘波、刘有延 物理学报 **49**(2000), 1185 .
- [16] Q. Niu, F. Nori, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 2057.
- [17] Y. Y. Liu, W. Sritrakool, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 1110.

STUDIES ON THE PROPERTIES OF ELECTRONIC ENERGY SPECTRA FOR TWO-DIMENSIONAL FIBONACCI-CLASS QUASICRYSTALS WITH ONE KIND OF ATOMS*

YANG XIANG-BO¹⁾ XING DA²⁾ LIU YOU-YAN³⁾

¹⁾*Institute of Laser Life Science, South China Normal University, Guangzhou 510631, China ;
Department of Physics, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China ;
Guangdong University of Technology, Guangzhou 510090, China*

²⁾*Institute of Laser Life Science, South China Normal University, Guangzhou 510631, China*

³⁾*Department of Physics, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China*

(Received 21 March 2001 ; revised manuscript received 5 July 2001)

ABSTRACT

In the framework of the single-electron tight-binding nearest interaction on-site model, we have studied the splitting rules of electronic energy spectra for two-dimensional Fibonacci-class quasicrystals $FC(n)$ with one kind of atoms by means of the decomposition-decimation method based on the renormalization-group technique and have also calculated the electronic energy spectra numerically. It was found that there are only three kinds of clusters, $n \times n$, $n \times (n + 1)$, and $(n + 1) \times (n + 1)$ for all of the two-dimensional quasilattices $FC(n)$ and the electronic energy bands split as Y_{m-n-l} . The general formula of the energy level numbers was obtained. We discovered that there was a kind of so-called Fibonacci-class-number sets for the parameters used to describe the energy level number and got the first 11 determined integers of the sets. The experienced formula have been sought out. The analytic results are confirmed by numerical simulations.

Keywords : Fibonacci-class, quasicrystals, electronic spectra, renormalization-group

PACC : 7170, 7125C

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10004003) and the Advanced Education Department of Guangdong Province Science Foundation (Grant No. 990045).