

# 十次对称准晶的光电导率

邱圣德<sup>†</sup> 胡承正 王爱军 周 详

(武汉大学物理科学与技术学院, 武汉 430072)  
(2005 年 2 月 4 日收到, 2005 年 7 月 4 日收到修改稿)

讨论了十次对称准晶的光电导率, 推导了十次对称准晶在周期方向和准周期平面不同的光电导率的计算公式, 并以此计算了十次对称准晶  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{17}\text{Cu}_{18}$  的光电导率, 得到了与实验值相当符合的结果.

关键词: 准晶, 光电导率

PACC: 6140M, 7820D

## 1. 引 言

1984 年, Shechtman 等在急冷的 Al-Mn 合金中观测到五次对称衍射图的相, 进一步的会聚束电子衍射分析显示, 它具有  $m\bar{3}5$  点群的二十面体对称性, 这种新的结构被称为准晶. 准晶的发现改变了人们以往对固体结构的通常认识, 吸引了各方面的兴趣和关注. 20 年来, 人们对准晶的研究无论是在实验上还是理论上都取得了长足的进展, 内容也从开始的结构特性和弹性性质<sup>[1, 2]</sup>发展到研究其他一些物理性能的研究, 结果表明, 准晶具有许多异乎寻常的性质<sup>[3]</sup>.

准晶一个最引人注目的特征就是它的导电性能. 虽然准晶大多由金属元素构成, 但与金属晶体相比, 准晶的直流电导率相当低, 且电导率随着温度的下降而减小, 随着准晶中杂质浓度的减小和结构缺陷的减少而减小. 例如, 二十面体准晶 Al-Pr-Re 在 4K 温度下的直流电导率  $\sigma(4\text{K})$  低至  $5\Omega^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$ <sup>[4]</sup>, 而电导率在 295K 和 4K 之比  $\sigma(295\text{K})/\sigma(4\text{K})$  可高达  $10^5$ <sup>[5]</sup>.

准晶的交流电导率, 或光电导率, 也具有与众不同的性质, 它们与通常描写金属中自由电子气体模型的 Drude 公式并不相吻合. Homes 等<sup>[7]</sup>报告了二十面体准晶  $\text{Al}_{63.5}\text{Cu}_{24.5}\text{Fe}_{12}$  的光电导率, 实验显示这种二十面体准晶的光电导率在差不多从可见光到远红外这一范围几乎随着频率增加而增加, 基于常规

的带间跃迁的理论模型, 考虑费米能级附近的展能隙(这是二十面体系统的一个特征), 给出的计算公式很好的符合了  $\text{Al}_{63.5}\text{Cu}_{24.5}\text{Fe}_{12}$  光电导率随频率变化的实验曲线<sup>[8, 9]</sup>.

十次对称准晶的光电导率具有明显的各向异性的性质, 沿周期方向显示通常金属特点, Drude 公式适用, 而沿准周期平面却显示异常行为<sup>[10]</sup>. 与二十面体准晶不同的是, 十次准晶准周期平面内光电导率的异常, 并非来自于能带结构的影响, 而可能主要是由于电子运动中高散射率的存在.

本文讨论了十次对称准晶的光电导率, 利用群理论证明了十次对称准晶在周期方向和准周期平面可以有不同的光电导率, 推导了这两种光电导率的计算公式并以此计算了十次对称准晶  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{17}\text{Cu}_{18}$  的光电导率, 得到了与实验值相当符合的结果.

## 2. 电导率张量

根据欧姆定律, 物质的电导率  $\sigma$  由下式确定:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad (1)$$

由于电流密度  $\mathbf{j}$  和电场强度  $\mathbf{E}$  都是矢量, 因此电导率是一个二阶张量. 另外, 单位时间内单位体积的电场能量

$$u = \frac{1}{2} \mathbf{E} \sigma \mathbf{E} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \sigma_{ij} E_i E_j, \quad (2)$$

由此可见电导率是一个二阶对称张量. 根据准晶的对称性和群理论即可确定此张量的具体形式. 现在

<sup>†</sup> E-mail: quanm\_qiu@hotmail.com

以点群  $10mm(C_{10v})$  为例, 它的特征标见表 1.

表 1 点群  $C_{10v}(10mm)$  的特征标 ( $\tau = \frac{\sqrt{5}+1}{2}$ , 表中最后一行是二阶对称张量( $\sigma$ )表示的特征标)

	$e$	$2\alpha$	$2\alpha^2$	$2\alpha^3$	$2\alpha^4$	$2\alpha^5$	$5\beta$	$5\alpha\beta$
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_2$	1	1	1	1	1	1	-1	-1
$\Gamma_3$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
$\Gamma_4$	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
$\Gamma_5$	2	$\tau$	$\tau-1$	$1-\tau$	$-\tau$	-2	0	0
$\Gamma_6$	2	$\tau-1$	$-\tau$	$-\tau$	$\tau-1$	2	0	0
$\Gamma_7$	2	$1-\tau$	$-\tau$	$\tau$	$\tau-1$	-2	0	0
$\Gamma_8$	2	$-\tau$	$\tau-1$	$\tau-1$	$-\tau$	2	0	0
$\sigma_{ij}$	6	$2\tau+1$	1	$3-2\tau$	1	2	2	2

二阶对称张量( $\sigma_{ij}$ )的表示在此对称性下的约化式为

$$\{(\Gamma_5 + \Gamma_1) \times (\Gamma_5 + \Gamma_1)\}_s = 2\Gamma_1 + \Gamma_5 + \Gamma_6, \quad (3)$$

上式右端含有两个恒等表示( $\Gamma_1$ )这意味着  $\sigma_{ij}$  有两个独立分量. 仿照文献 [11] 的方法, 可以确定这两个非零分量为

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_1, \\ \sigma_{zz} = \sigma_2. \end{aligned} \quad (4)$$

这里已选取十次对称轴为  $z$  轴, 准周期平面为  $xy$  平面. 写成矩阵形式为

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

显然  $\sigma_2$  表示周期方向上的电导率,  $\sigma_1$  表示准周期平面的电导率. 这一结论对具有其他点群的所有十次对称准晶均成立.

### 3. 计算公式

在玻尔兹曼近似下, 物质的电导率由下式计算<sup>[12]</sup>:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -2e^2 \int \tau(k) v_\alpha(k) v_\beta(k) \frac{\partial f_0}{\partial E} dk (2\pi)^3. \quad (6)$$

对于十次准晶,  $\alpha = \beta$ , 若电场是交替变化的, 则  $\sigma$  与时间有关, 这时可以利用 Kubo-Greenwood 公式<sup>[12, 13]</sup> 将它写为

$$\sigma(t) = \lambda \alpha(E, t), \quad (7)$$

$$\alpha(E, t) = v(t_0) v(t_0 + t)_E, \quad (8)$$

式中  $\dots_E$  表示电子从初始时刻  $t_0$  处在能量为  $E$  的态被散射到时刻  $t_0 + t$  能量为  $E'$  的态的能量平均值,  $\alpha(E, t)$  为速度相关函数,  $\lambda$  为待定常数. 上式的傅里叶变换即给出交流电导率或光电导率:

$$\alpha(\omega) = \frac{\lambda}{\pi} \int_0^\infty e^{i\omega t} \alpha(E, t) dt. \quad (9)$$

具体计算速度相关函数是很困难的, 作为一种近似, 像通常那样, 取如下形式<sup>[13, 14]</sup>, 即令

$$\alpha(E, t) = \alpha(E, \rho) e^{-t/\tau}, \quad (10)$$

代入(9)式得

$$\alpha(\omega) = \frac{\lambda}{\pi} \alpha(E, \rho) \frac{\tau}{1 - i\omega\tau}. \quad (11)$$

当  $\omega = 0$  时, 它应该给出通常直流电导率

$$\frac{e^2 n(E) \tau}{m} = \alpha(0) = \frac{\lambda}{\pi} \alpha(E, \rho) \tau, \quad (12)$$

所以

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2 n \tau}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau}. \quad (13)$$

上式给出的实际上只是周期方向上的光电导率, 即

$$\sigma_2(\omega) = \frac{e^2 n \tau}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau}, \quad (14)$$

上式便是有名的 Drude 公式( $\alpha(0)$  为直流电导率). 对十次对称准晶光电导率的实验表明, 沿周期方向, 它遵循 Drude 公式, Drude 公式是 Drude 自由电子气体模型的相应结果, 根据这一模型, 除碰撞的瞬间外, 电子运动都是自由的. 在经典近似下, 公式中弛豫时间  $\tau$  通常被认为就是电子平均自由飞行时间. 平均来说, 碰撞一次电子气便恢复到平衡状态.

十次对称准晶光电导率的实验还表明, 沿准周期方向显示异常行为, Drude 公式不再适用, 特别是在低频, 周期方向上的光电导率是准周期方向光电导率的数倍, 这说明电子在准周期平面内运动被散射的概率变大. 从物理本质上来说, 它应该与准晶准周期结构这一内禀特性有关. 与晶体不同, 准晶虽然具有长程取向序, 但不具有平移周期性, 因而有着较小的有序度. 但它又不同于无序系统, 按照准晶的高维空间描述法<sup>[3]</sup>, 准晶结构可由高维晶体投影到物理空间上产生. 基于这一观点, 可以合理的认为, 电子在准周期平面运动时散射率增加的效应是一种多次散射的结果.

对于准周期平面, 电子在这种准周期结构中运动时散射率将增强<sup>[10]</sup>, 为了包括这种增强效应, 有必要考虑多次散射的结果. 如果认为第  $n$  次散射的

概率  $p_n(0, t)$  服从 Poisson 分布<sup>[9, 14]</sup>：

$$p_n(0, t) = (t/\tau)^n e^{-t/\tau} / n!, \quad (15)$$

那么(10)式应该修正为

$$\frac{\alpha(E, t)}{\alpha(E, 0)} = e^{-t/\tau} \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n (t/\tau)^n / n! \right], \quad (16)$$

式中  $c_n$  是量度第  $n$  次散射后与初始速度变化有关的参数, 在计算中是可调的<sup>[9]</sup>. 将上式代入(9)式并注意(12)得准周期平面的光电导率

$$\sigma_1(\omega) = \frac{ne^2 \tau / m}{(1 - i\omega\tau)} \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n}{(1 - i\omega\tau)^n} \right]. \quad (17)$$

## 4. 结果与讨论

下面利用(14)和(17)式计算十次准晶  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{17}\text{Cu}_{18}$  的光电导率, 并与实验值进行比较. 为简单计, 对(17)式取最低级近似, 即只取求和式中第一项且令  $c_1 = c$ , 这时(17)式成为

$$\sigma_1(\omega) = \frac{ne^2 \tau / m}{1 - i\omega\tau} \left[ 1 + \frac{c}{1 - i\omega\tau} \right]. \quad (18)$$

实验测量值是光电导率的实部, 即

$$\begin{aligned} \text{Re}\sigma_2(\omega) &= \frac{ne^2 \tau / m}{1 + \omega^2 \tau^2}, \\ \text{Re}\sigma_1(\omega) &= \frac{ne^2 \tau / m}{1 + \omega^2 \tau^2} \left[ 1 + \frac{c(1 - \omega^2 \tau^2)}{(1 + \omega^2 \tau^2)} \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

由于十次准晶的光电导率对能带结构的依赖较弱, 因此(19)式两式中的电子浓度与其有效质量之比  $n/m$  可取相同值. 对  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{17}\text{Cu}_{18}$ <sup>[10]</sup>,  $\frac{n}{m} \sim 3.1 \times 10^{22}$ . 而弛豫时间则可按下式估算：

$$\frac{\hbar}{\tau} \sim \begin{cases} 400, & \text{常温}, \\ 230, & \text{低温}. \end{cases}$$

为了与实验值拟合, 计算中取

$$\begin{aligned} c &= -0.730, & \text{当 } T &= 10\text{K}, \\ c &= -0.620, & \text{当 } T &= 300\text{K}, \end{aligned}$$

计算所得结果标绘在图 1—图 3, 图中还附有文献[10]所测得的实验值.

这里  $c < 0$  意味着背散射作用强. 这种强背散射的存在也可以认为来自准晶准周期结构的特点. 对于晶体, 处在周期势场中的单电子态满足 Bloch 定理. 但准晶体不具有平移周期性, Bloch 定理不再适用, 不过, 与无序系统也不同, 准晶仍具有长程取向序, 并且它可以看作高维晶体在物理空间的投影, 因此在其谱结构中仍具有类似的概念, 如: 带隙、

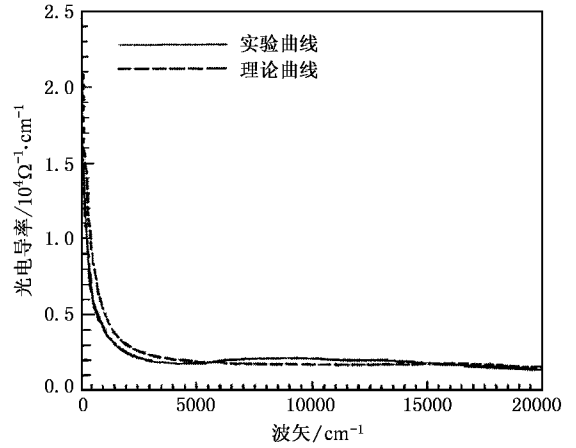


图 1 十次准晶  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{17}\text{Cu}_{18}$  周期方向的光电导率  $\sigma_2(\omega)$  随频率(波矢)变化的曲线, 虚线表示理论值, 实线表示实验值(取自文献[10])

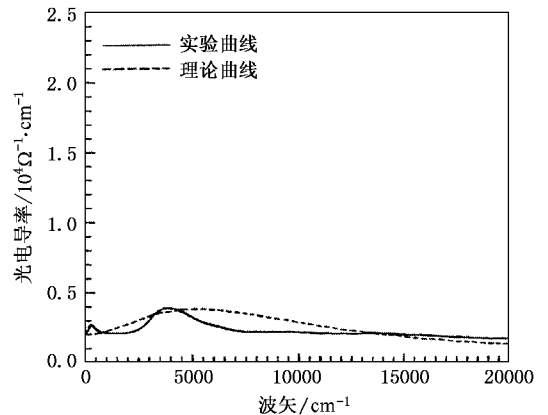


图 2 十次准晶  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{17}\text{Cu}_{18}$  准周期平面在 10K 温度下的光电导率  $\sigma_1(\omega)$  随频率(波矢)变化的曲线, 虚线表示理论值, 实线表示实验值(取自文献[10])

准布里渊区、准波矢等. 相应布拉格衍射花样表明, 费米面与准布里渊区相互作用的恰当匹配发生在  $G \sim 2k_f$  的倒格矢上( $k_f$  为费米波矢), 这种相互作用导致带隙产生、能量相对降低和准周期结构的稳定<sup>[8, 15]</sup>. 准晶中的这种多重倒格矢的存在使得一个波矢为  $k$  的电子在衍射到  $k-G$  时, 会反转其运动方向, 这就是背散射存在的原因和  $c$  取负值的理由. 这种背散射效应在低频端贡献相当强, 大大抑制了电导率的取值, 使周期方向和准周期方向电导率  $\sigma$  差别大, 在高频端贡献实际较弱, 这两个方向  $\sigma$  差别小.

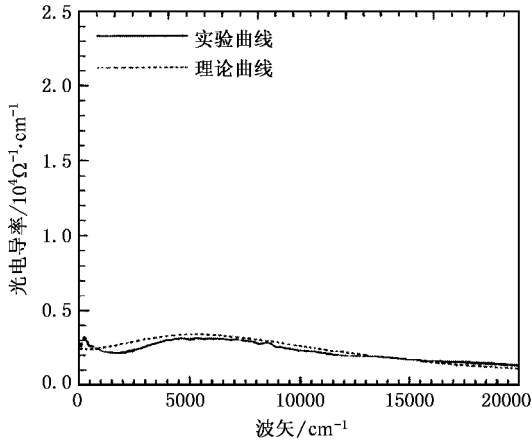


图 3 十次准晶  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{17}\text{Cu}_{18}$  准周期平面在 300K 温度下的光电导率  $\sigma_1(\omega)$  随频率(波矢)变化的曲线,虚线表示理论值,实线表示实验值(取自文献 [10])

从理论值与实验值的比较中,可以看出,在 300K 温度下计算出的理论曲线较好的符合了实验曲线,10K 温度下在低频区域理论曲线与实验曲线有一定的偏离.在高频情况下,十次准晶准周期平面的光电导率趋近于周期方向的光电导率,它们都与自由载流子的 Drude 公式相符,说明这时材料的结构影响不大.而在低频情况下,准周期平面与周期方向的光电导率随频率的下降而呈现越来越大的区别,300K 温度下,频率  $\omega \rightarrow 0$  时候,周期方向与准周期平面光电导率比率  $\sigma_p/\sigma_{qp}$  为 7,而当温度  $T = 10\text{K}$  的时候,比率高达 12.可见准周期结构所带来的电导性质的异常性.且在极低频的时候,准周期平面光电导率曲线还会出现明显的峰,说明除了散射率增强外,还有其他因素起作用.

- [ 1 ] Peng Y Z 2000 *Chin. Phys.* **9** 764
- [ 2 ] Li X F, Fan T Y 2002 *Chin. Phys.* **11** 266
- [ 3 ] Wang R H, Hu C Z, Gui J N 2004 *Quasicrystal Physics* ( Beijing : Science Press )( in Chinese ) 王仁卉、胡承正、桂嘉年 2004 准晶物理学(北京 科学出版社)
- [ 4 ] Pierce F S, Poon S T, Guo Q 1993 *Science* **261** 737
- [ 5 ] Pierce F S, Guo Q, Poon S T 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2220
- [ 6 ] Gignoux C, Berger C, Fourcaudat G *et al* 1997 *Europhys. Lett.* **39** 171
- [ 7 ] Homes C C, Timusk T, Wu X 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 2694
- [ 8 ] Burkov S E, Timusk T, Ashcroft N W 1992 *J. Phys. : Condens. Matter* **4** 9447
- [ 9 ] Smith N V 2001 *Phys. Rev. B* **64** 155106
- [ 10 ] Basov D N, Timusk T, Barakat F *et al* 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1937
- [ 11 ] Hu C Z, Ding D H, Yang W G 1993 *Acta. Phys. Sin. ( Overseas Edition )* **2** 42
- [ 12 ] Huang K, Han R Q 2002 *Solid State Physics* ( Beijing : Higher Education Press )( in Chinese ) 黄 昆、韩汝琦 2002 固体物理学(北京 高等教育出版社)
- [ 13 ] Mayou D 2002 *Phys. Rev. Lett.* **85** 1290
- [ 14 ] Landau L D, Lifshitz I E 1980 *Statistical Physics* ( Oxford : Butterworth-Heinemann )
- [ 15 ] Poon S J 1992 *Adv. Phys.* **41** 303

# Optical conductivity of decagonal quasicrystals

Qiu Sheng-De<sup>†</sup> Hu Cheng-Zheng Wang Ai-Jun Zhou Xiang

( *Department of Physics , Wuhan University , Wuhan 430072 ,China* )

( Received 4 February 2005 ; revised manuscript received 4 July 2005 )

## Abstract

A discussion is given of the optical conductivity of decagonal quasicrystals. With group theory it is proved that decagonal quasicrystals may have different optical conductivity in the periodic and quasiperiodic directions. The formula is derived for the optical conductivity. The optical conductivity of  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{17}\text{Cu}_{18}$  is calculated using this formula. The calculated results basically agree with the experimental data.

**Keywords** : quasicrystal , optical conductivity

**PACC** : 6140M , 7820D

---

<sup>†</sup> E-mail : quanm\_qiu@hotmail.com