

二维准晶顶角模型的电子性质*

马 鹏 辉

刘 有 延

暨南大学物理系, 广州, 510632

华南理工大学物理系, 广州, 510641

邹 南 之 周 义 昌

中山大学物理系, 广州, 510275

1989 年 10 月 6 日收到

本文研究构造在 Penrose 晶格上的顶角模型的电子性质. 对有对称心的 Penrose 晶格, 引入一相似变换, 将紧束缚哈密顿量约化成分块对角的形式, 以此化简了本征能量和本征态的数值计算, 并且根据这一约化确定约三分之二的能量本征态是双重简并的, 而另外三分之一的态是非简并的. 用 Household 方法和改进的 Dean 方法数值求解了本征能量和本征态, 并用二阶矩, 反参加比和波函数空间分布等方法研究了电子态的局域性质, 发现三种类型的电子态 (延展态、中间态和局域态) 共存于二维准晶中. 此外, 还对能谱中的高简并态进行了研究.

PACC: 7125C; 6150E

一、引 言

自从 Shechtman 等人^[1]于 1984 年底首次发现急冷 Al-Mn 合金的衍射图形具有 20 面体对称性以来, 大量的实验事实和理论分析已经证明准晶体是真实存在的一种稳定的物理系统. Levine, Steinhardt 和 Socolar^[2,3]提出用三维 Penrose 拼砌作为晶格以解释 20 面体对称性与长程序间的相容性. 他们的理论是 Penrose^[4]和 de Bruijn^[5]关于平面非周期拼砌理论的推广.

一维 Fibonacci 准晶的电子与声子性质已有几个研究组进行了研究^[6-9], 相比之下, 对二维 Penrose 准晶有关性质的认识就显得很不够. 由于二维准晶结构的复杂性, 除了个别特殊电子态有解析解外^[6,10,11], 对其它本征态作解析计算在目前是困难的. 因此, 对这些问题进行数值研究就十分必要.

目前研究二维准晶电子性质的模型有两种, 即顶角模型和中心模型. 它们都是基于如下紧束缚哈密顿量:

$$H = \sum_i Z_i S_i |i\rangle \langle i| + t \sum_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (1)$$

式中 $|i\rangle$ 是第 i 个 Wannier 态. 对于顶角模型, 原子轨道位于拼砌的顶角上, 电子只能沿菱形的边作最近邻跳跃. (1) 式中 t 是跳越积分, Z_i 是第 i 个顶角的配位数, S_i 是格

* 国家自然科学基金资助的课题.

点能量单位. 本文中选 $S_e = 1$.

可以证明, 在 Penrose 局域同构类 (PLIC) 中只有两种构形具有完全的 5 次对称性, 即整个晶格有一个 5 次旋转轴; 此外, Levine 和 Steinhardt^[2] 指出属于同一个局域同构类的准晶具有类似的电子性质. 因此, 不失一般性, 可以选择具有对称中心的 Penrose 格子作为二维准晶 Penrose 局域同构类的代表来研究他们的电子性质. 本文主要讨论二维 Penrose 准晶顶角模型的电子性质.

二、哈密顿量的约化, 能谱及简并度

有对称心的 Penrose 格子, 如图 1, 可以分为 5 个全同的楔形子格子, 而中心的格点为 5 个子格子所共有. 对所研究的顶角模型, 只有最近邻的子格子间有相互作用. 假设 Penrose 格子中共有 $5N + 1$ 个格点, 若将 5 个子格子的格点用相同的方式标号, 则哈密顿量可写为

$$H = \begin{bmatrix} 5S_e & te & te & te & te & te \\ te^T & A & h & 0 & 0 & h^T \\ te^T & h^T & A & h & 0 & 0 \\ te^T & 0 & h^T & A & h & 0 \\ te^T & 0 & 0 & h^T & A & h \\ te^T & h & 0 & 0 & h^T & A \end{bmatrix}, \quad (2)$$

式中 A , h 和 h^T 是 N 阶方阵; A 是楔形子格子的哈密顿量; h 和 h^T 是相邻子格子间的跳跃矩阵; h^T 是 h 的转置;

$$e = (100\dots 0)$$

是单位行矢量.

引入下列变换矩阵 P :

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$Q = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} I & I & I & I & I \\ \varepsilon_0 I & \varepsilon_1 I & \varepsilon_2 I & \varepsilon_3 I & \varepsilon_4 I \\ \varepsilon_0^2 I & \varepsilon_1^2 I & \varepsilon_2^2 I & \varepsilon_3^2 I & \varepsilon_4^2 I \\ \varepsilon_0^3 I & \varepsilon_1^3 I & \varepsilon_2^3 I & \varepsilon_3^3 I & \varepsilon_4^3 I \\ \varepsilon_0^4 I & \varepsilon_1^4 I & \varepsilon_2^4 I & \varepsilon_3^4 I & \varepsilon_4^4 I \end{bmatrix},$$

式中 I 是 N 阶单位方阵;

$$\varepsilon_k = \exp(ik2\pi/5).$$

易证明

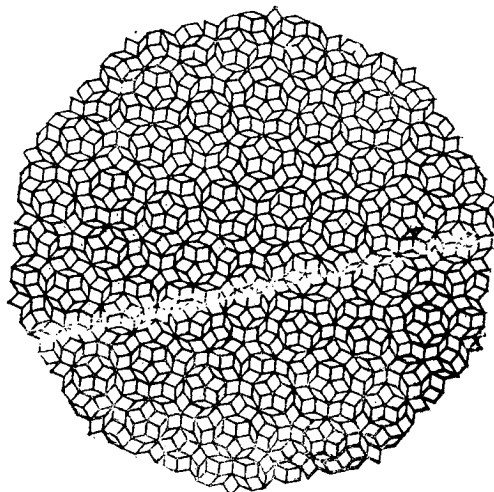


图1 有 5 次对称性的 Penrose 格子 顶点数为 1231

$$H' \equiv PHP^{-1} = \begin{bmatrix} A_0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_4 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

式中 A_0 是 $N+1$ 阶方阵; A_1, A_2, A_3 和 A_4 是 N 阶方阵, 且

$$A_0 = \begin{bmatrix} 5S_c & \sqrt{5}te \\ \sqrt{5}t \cdot e^T & A_0 \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} A_0 &= A + h + h^T, \quad A_1 = A + \varepsilon_1 h^T + \varepsilon_1^* h, \\ A_2 &= A + \varepsilon_2 h^T + \varepsilon_2^* h, \quad A_3 = A + \varepsilon_3 h^T + \varepsilon_3^* h, \\ A_4 &= A + \varepsilon_4 h^T + \varepsilon_4^* h. \end{aligned}$$

因此, H 的本征值是 A_0, A_1, A_2, A_3 和 A_4 的本征值的总和. 由于

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_4^*, \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_3^*,$$

所以

$$A_1 = A_4^*, \quad A_2 = A_3^*. \quad (6)$$

另一方面, A_i 是厄密矩阵, 因此, A_1 和 A_4, A_2 和 A_3 分别有相同的本征谱, 而 A_0 则有一独立的谱. 由此可以断定: 除了偶然的简并, 如 $E=3$ 的态外, 三分之二本征态是二重简并的, 另外三分之一的态是非简并的. 这个结果也与群论的结论相一致^[12].

现在用子格子的本征矢来确定整个系统的本征矢. 容易证明由于 $H' = PHP^{-1}$, 如果 X_i 是矩阵 A_i 对应于能量 E 的本征矢, 则整个系统对应于能量 E 的本征矢可以写为

$$X(j) = X_0 \oplus \frac{1}{\sqrt{5}} \sum_{k=0}^4 \varepsilon_k^* X_k, \quad (7)$$

式中 $\oplus$ 表示直和; X_0^* 是中心格点上波函数的值. 不难证明, 对于二重简并的态 $X_0 = 0$. 基于上述分析, 可以首先计算子格子的本征矢, 然后用(7)式求出整个系统的本征矢. 用这种方法分别计算了格点数为 476 和 1231 的 Penrose 晶格的本征能量和本征矢, 并由此计算其它的量. 计算结果将在第三节给出.

一个有趣的问题是在能谱中出现了简并度非常高的态. 以前的工作通常选取 $S_c = 0$. Choy^[13] 曾数值计算了 Penrose 格子的态密度并发现态密度在 $E=0$ 处出现一个峰, 他认为这个峰对应于范·霍夫奇点. Kohmoto 和 Sutherland 研究了同样的问题, 也发现了 $E=0$ 处的峰, 但他们令人信服地说明这个峰不是范·霍夫奇点而是一个高简并的局域态; 且能谱关于 $E=0$ 对称. 在这里对他们的结果用微扰论作一简明的分析^[14]. $S_c = 0$ 的情形是一个非常特殊的情形, 这时无论何种顶角其格点能量都是零. 当跳跃积分 $t=0$ 时, “裸”能级 $E=0$ 就是 Penrose 格子的整个能谱, 其简并度为 $5N+1$. 随着跳跃积分的增加, 零宽度的能谱逐渐加宽. 简并度逐渐减小, 在这个过程中, 束缚态与反束缚态总是成对出现, 因此能谱是关于 $E=0$ 对称的. 另一方面, 由于在 Penrose 格子中有一些由 D 型和 Q 型顶角 (配位数为 3) 组成的一些特殊的拓扑结构^[6,15], 一部分原属于 D 型和 Q 型顶角的本征态的简并性将不能因 t 的增大而消除, 因此态密度在 $E=0$ 处始

终存在一个峰,但它并不对应于范·霍夫奇点.

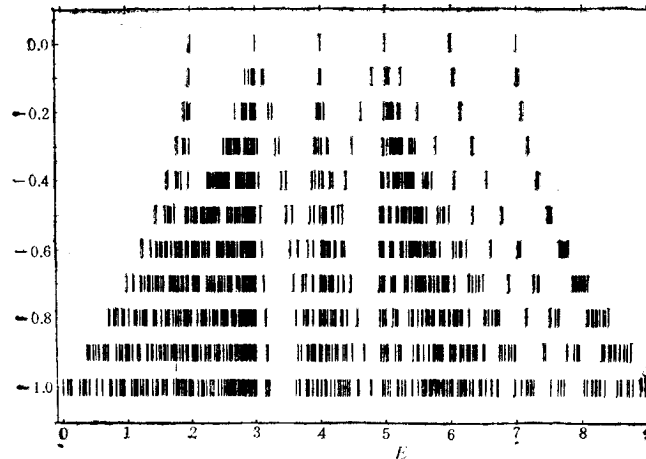


图 2 对应不同的跳跃积分 t , Penrose 格子(顶点数为 476)的能谱

可以认为,选择 $S_c \approx 0$ 使不同的顶角具有不同的格点能量,能更好地反映 Penrose 格子的结构性质.这也是在本文中选取 $S_c = 1$ 的原因.图 2 示出用数值方法算出的 Penrose 格子对不同的跳跃积分的能谱.从图 2 中可以看到, $t = 0$ 时能谱只是 6 条“裸”的原子能级(即格点能量) $E = 2, 3, 4, 5, 6, 7$, 它们都是高度简并的.除了 $E = 2$ 外,每一条能级都对应于一类具有相同配位数的顶角. $E = 2$ 的能级只在格子有限大时才出现,它对应于边界上不完整的顶角,这些顶角不属于 Penrose 拼砌所具有的 8 种顶角类型.计算的结果显示,随着 t 的增加各能级发生分裂,逐渐消除简并,但一部分对应于 $E = 3$ 的态无论 t 多大都不能消除简并,其本征能量总是 3 或 $3S_c$, 其简并度与 $S_c = 0$ 时 $E = 0$ 能级的简并度相同.这种情况也说明本征能量为 $3S_c$ 的态,其波函数只能在配位数为 3 的顶角上取非零值.因此选取非零的格点能量后,无需计算本征函数就可断定态密度中出现的峰,是由于 Penrose 拼砌中 D 型和 Q 型顶角组成了特殊的拓扑结构而引起的.波函数的计算证明了这一点,随后在图 5 中示出的就是这样的一个态.这些结果与 Fujiwara 等人的分析是一致的^[45].

三、电子态的局域性质

作为一个类比,先回顾一维准周期系统的某些结论是有益的.对单电子模型,一维周期系统的电子态都是延展的;一维无序系统的电子态都是局域的^[46].通常认为准周期系统是介于周期和无序之间的一种系统,因而其波函数既非延展也非局域.典型的波函数的空间分布形式是从一定的值衰减到几乎为零,再恢复到较大的值,如此再重复.这样的以大的涨落为特征的本征态被称为“临界态”或“中间态”.但刘有延和 Riklund 用数值方法证明了在一维 Fibonacci 准晶中局域态,延展态和中间态是共存的^[9];刘有延还证明了对一维无公度系统的 Aubry 模型,在临界点上波函数的局域性依赖于本征能量,这

三种波函数亦同时共存^[17]。可以认为这种共存实际上是准周期系统的一个特征, 准周期系统本身就是一种独立的物理系统, 有其独特的物理性质, 简单地将其视为一种处于周期和无序之间的物理系统是不确切的。因此“临界态”并不是一维, 二维以至三维准晶的唯一的电子态。

为了研究电子态的局域性质, 首先用第二节中叙述的计算方法结合 Hoursehold 方法将哈密顿量变换为三对角矩阵, 然后用改进的 Dean^[18] 方法求出三对角矩阵的本征值和本征矢, 经反变换后就得到原哈密顿量的所有本征值和本征矢。求出本征矢后, 就可计算判定电子态局域性质的一些量。例如, 广义一阶矩, 广义二阶矩, 反参加比等^[14]。

对紧束缚模型, 第 i 个归一化的本征波函数可表为

$$|\phi_i\rangle = \sum_j B_{ij} |j\rangle, \quad (8)$$

式中 B_{ij} 是第 i 个顶角上波函数的值。若第 i 个顶角到对称心的距离是 r_i , 则广义一阶矩定义为

$$M_i = \langle r \rangle = \sum_j r_j |B_{ij}|^2, \quad (9)$$

广义二阶矩定义为

$$S_i = \left\{ \sum_j r_j^2 |B_{ij}|^2 - \left[\sum_j r_j |B_{ij}|^2 \right]^2 \right\}^{1/2}, \quad (10)$$

反参加比定义为

$$I_i = \sum_j |B_{ij}|^4, \quad (11)$$

式中广义一阶矩给出波函数的平均半径, 广义二阶矩和反参加比从不同的角度反映了波函数的局域性。反参加比反比于波函数占据的顶点数^[19], 一般来说 IPR 越大, 波函数越局域; 广义二阶矩给出波函数的“宽度”, 即反映波函数在径向分布的延展性, 广义二阶矩越大波函数越延展。容易证明一维无限深势阱中束缚态的二阶矩都是 0.28。由于这些态都是延展的, 通常将 0.28 作为区分延展态和其它态的界限。计算了圆形无限深势阱前 10 个束缚态的二阶矩, 它们的平均值也是 0.28^[20]。因此也以 0.28 作为区分延展态和其它态的界限。另一方面, 对于局域态广义二阶矩比较小, 0.1 可作为粗略的参考值, 而中间态的广义二阶矩则介于 0.1 和 0.28 之间。这种以有限系统为对象的判定方法虽有一定的局限性, 但作为对二维准晶电子性质的初步研究, 其结果亦是很有意义的。

对 Penrose 格子所有电子态的反参加比与广义二阶矩的数值计算表明三种类型的态都出现在能谱中。图 3-7 是数值计算的结果。图 3 示出对不同的跳越积分 t , 广义二阶矩与本征能量的关系。从图 3 中可以看到, t 比较小时, 如 $t = -0.2$, 能谱分成 6 个子带, 它们是由 $t = 0$ 时 $E = 2, 3, 4, 5, 6, 7$, 6 个高简并的能级分裂而成, 随着 t 增加, 这些子带逐渐拓宽且混合在一起; 其次可以看到随 t 的增加 $E = 2, 4, 5$ 的子带的广义二阶矩略有增加, 其它子带的广义二阶矩则没有明显的变化, 这也说明 Penrose 准晶电子态的局域性质对跳越积分并不敏感, 三种态的共存应主要取决于 Penrose 格子独特的拓扑性质; 另外, 正如前面所指出的, 无论 t 取何值 $E = 3$ 的能级都是高度简并的。这些简

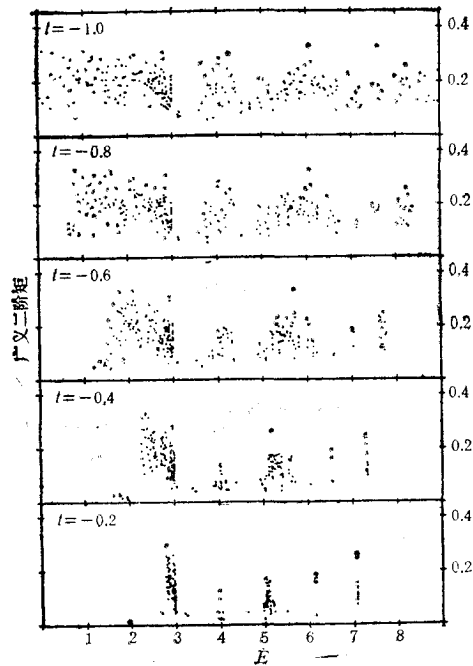


图3 对不同的跳跃积分 t , 广义二阶矩与本征能量的关系。子带随 t 的增加不断扩宽, 而局域性质则无大的变化; 简并性随 t 的增大而消除明显可见。

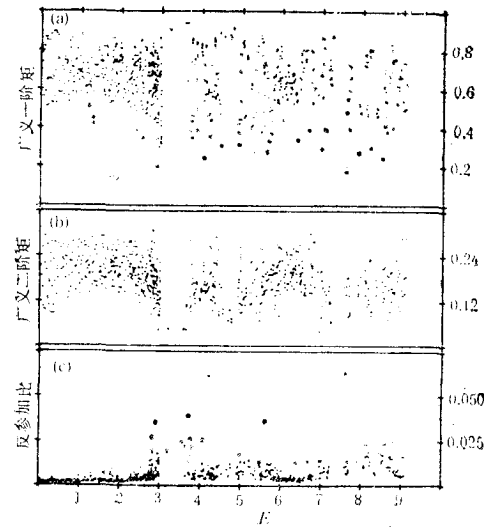


图4 广义一阶矩, 广义二阶矩, 反参加比与能量的关系。从(a)可看到波函数平均半径的分布; (b), (c)说明波函数间局域性的差别很大, 延展态、中间态和局域态同时共存。

并态对应于 $E = 3$ 处的一列点, 从图3中可以看到这些点的高度各不相同, 表明这些态的延展性各不相同。当 $t = -1.0$ 时, 它们的广义二阶矩约在 0.2 附近, 因而是中间态。

图4是对一顶点数为 1231 的 Penrose 格子的计算结果。图4(a)示出广义一阶矩(平均半径)与能量的关系, 可以看到波函数的平均半径分布在 0.2 到 0.95 之间, 但大部分态的平均半径在 0.5 到 0.8 之间。从图4(b)可以看到广义二阶矩的变化范围还是比较大的, 同图3一样这也说明三种态的共存, 但大部分态是中间态。分析图4(c)的反参加比可得到相同的结果。

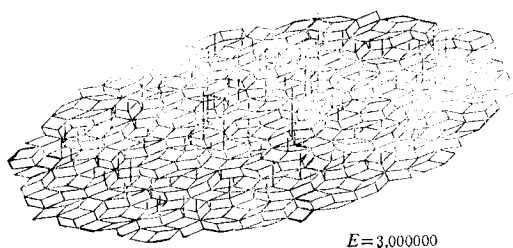


图5 典型的中间态。其特征是波函数振幅的起伏很大; 同时这也是一个本征能量为 $E = 3$ 的高简并的态, 从图中可看到波函数只在配位数为 3 的顶角上有非零值。

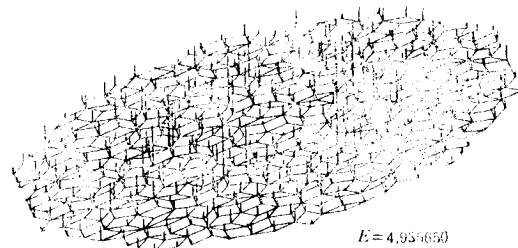


图6 典型的延展态。本征能量为 $E = 4.935650$ 。

更能够说明波函数局域性质的是波函数本身。在图 5, 6, 7 中, 示出具有代表性的不同局域性的波函数。它们分别是局域态, 中间态和延展态。三种态的共存性是无疑的。

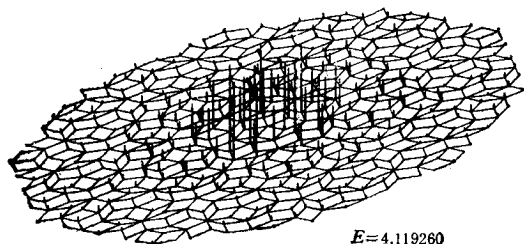


图 7 典型的局域态 本征能量为 $E = 4.119260$, 波函数只在一个小的区域内显著地不为零

四、小 结

引入了一个变换矩阵, 将哈密顿量约化为分块对角的形式, 使得数值计算量大为减少, 并能够对本征态的间并度

作一些讨论。分析表明, 三分之一的态是非简并的, 另外三分之二的态是双重简并的。还用不同的判据, 即一阶矩和二阶矩, 反参加比, 波函数的空间分布, 讨论了二维 Penrose 准晶电子态的局域性质。所有这些方法都得到同样的结果: 二维 Penrose 准晶的电子态可以是三种类型的态, 即局域态、中间态和延展态。可以认为准晶中三种态的共存是这种物理系统的特征。对于无序系统, 一维系统的所有态都是局域的, 三维系统中出现了将局域态和延展态分开的迁移率边, $D = 2$ 则是临界维数。所以一般认为维度越高系统电子态越趋延展。但这种观点并不一定适用于准晶体。由第三节分析可以看出准晶电子态的局域性质对晶格的拓扑结构有很强的依赖性。准晶格拓扑结构的特征是在准周期长程序且有着丰富的局部构形, 这种特点决定了准晶是三种典型态共存的合适载体。虽然目前只有一维和二维情况的证明, 但我们相信三维准晶的电子态也会是三种态的共存。

中山大学高等学术研究中心基金会部分资助。

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias and J. Cahn, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1951.
- [2] D. Levine and P. J. Steinhardt, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 596.
- [3] J. E. S. Socolar and P. J. Steinhardt, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 617.
- [4] R. Penrose, *Bull. Inst. Math. and Appl.* **10** (1974), 226.
- [5] N. de Bruijn, *Ned. Akad. Wetens. Proc. Ser.*, **A84**(1981), 27, 38.
- [6] M. Kohmoto and B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.*, **56** (1986), 2740.
- [7] F. Nori and Rodriguez, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 2207.
- [8] Hong-ru Ma (马红孺), Chien-hua Tsai (蔡建华) *J. Phys. C*, **21** (1988), 4311.
- [9] Y. Liu (刘有延) and R. Riklund, *Phys. Rev.*, **B 35** (1987), 6034.
- [10] B. Sutherland, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 3904.
- [11] M. Aria, T. Tokihiro, T. Fujiwara and T. Kichimoto, *Phys. Rev.*, **B38** (1988), 1621.
- [12] T. Jassen, *Acta Cryst.*, **A42** (1986), 261.
- [13] T. C. Choy, *Phys. Rev. Lett.*, **55**(1985), 2915.
- [14] P. Ma (马鹏辉) and Y. Liu (刘有延), *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 16058.
- [15] T. Fujiwara, *et al.*, *Phys. Rev.*, **B37** (1988), 2797.
- [16] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.*, **57** (1985), 287.
- [17] Y. Liu (刘有延), *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 9694.
- [18] Z. Zheng (郑兆勃), *J. Phys. C*, **19** (1986), L689.
- [19] K. A. Chao, R. Riklund and Y. Liu (刘有延), *Phys. Rev.*, **B32** (1985), 5979.
- [20] P. Ma (马鹏辉) and Y. Liu (刘有延), *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 9904.

THE ELECTRONIC PROPERTIES OF THE VERTEX MODEL FOR 2-DIMENSION QUASICRYSTALS

MA PENG-HUI

Department of Physics, Jinan University, Guangzhou, 510632

LIU YOU-YAN

Department of Physics, South-China Institute of Technology, Guangzhou, 510641

ZOU NAN-ZHI ZHOU YI-CHANG

Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou, 510275

(Received 6 October 1989)

ABSTRACT

This paper is devoted to the study on electronic properties of the vertex model of the Penrose lattice with five-fold rotational symmetric axis in the framework of tight-binding Hamiltonian. A similarity transformation is introduced to reduce the Hamiltonian, which helps to determine analytically the degeneracies of the eigenstates and to simplify the numerical calculation for the eigenenergies and the eigenvectors. It is found that two thirds of the states are doubly degenerate and the remains are non-degenerate. This conclusion is confirmed by group theory. The Hoursehold and improved Dean methods are used to obtain the energy spectra and examine the localization of the electronic states. By several methods and criteria, three kinds of wavefunction behaviors are definitely found. The highly degenerate states are also investigated.

PACC: 7125C; 6150E