

二维 Fibonacci 准晶电子能谱*

傅 秀 军

内蒙古师范大学物理系, 呼和浩特, 010022

程波林 郑大昉 刘有延

华南理工大学应用物理系, 广州, 510641

1990年12月18日收到

基于重整化群技术, 我们用分解-消元方法研究二维 Fibonacci 准晶电子能谱性质, 得到了具有多种分支结构的能谱, 这与一维 Fibonacci 的单一分支结构完全不同. 同时, 利用晶格的四重旋转对称性将哈密顿量化简, 然后进行数值模拟计算, 计算结果与分析结果完全一致.

PACC: 7125M; 7170; 0220

一、引 言

1984年 Schechtman 等人的实验发现^[1]开辟了固体物理的一个新领域——准晶体物理. 作为一维准晶模型, Fibonacci 链已得到了广泛的研究^[2-15]. 它的能谱是一个类 Cantor 集结构, 具有无限三分支的自相似性, 这是由 Fibonacci 准晶格本身的阶状几何结构所决定的^[12]. 对于二维准晶, 尽管 Penrose 拼砌也有阶状的几何结构, 但情形却不一样^[16]. Kohmoto 等人^[17]和 Odagaki 等人^[18]研究了不同砌型的 Penrose 准晶格的能谱, 但他们没有发现明显的自相似性, 其原因是二维准晶与一维准晶的拓扑结构有很大的不同. 马鹏辉和刘有延^[19]通过对二维 Penrose 准晶的局部结构进行仔细的分析, 并用微扰方法解析地计算能谱, 确定了准晶格局部结构与能谱的关系. 但由于能级的严重交叠, 也无法看出它们的自相似性. 另一方面, 在二维 Fibonacci 准晶的研究上也出现了一些工作^[20-22]. Ueda 等人^[20]通过数值计算研究了电子能谱和导电性. Ashraff 等人^[22]解析地研究了能谱、态密度和动力学响应函数, 他们的结论也被数值计算所证实. 对这种类型准晶格, 由于二维 Fibonacci 准晶格比起 Penrose 拼砌有更为规则的几何结构, 因此可期待它的能谱存在规则的自相似性. 对于一维 Fibonacci 准晶格, Niu 和 Nori^[6]首先由弱键近似, 采取重整化群技术研究了电子能谱. 基于他们的工作, 刘有延和 Srirakool^[15]发展出一种分解-消元 (decomposition-decimation, 简称 DD) 方法, 用来研究 Fibonacci 链能谱的分支规则, 得到了关于电子能谱性质简单且清晰的物理图像. 本文把 DD 方法

* 国家自然科学基金资助的课题.

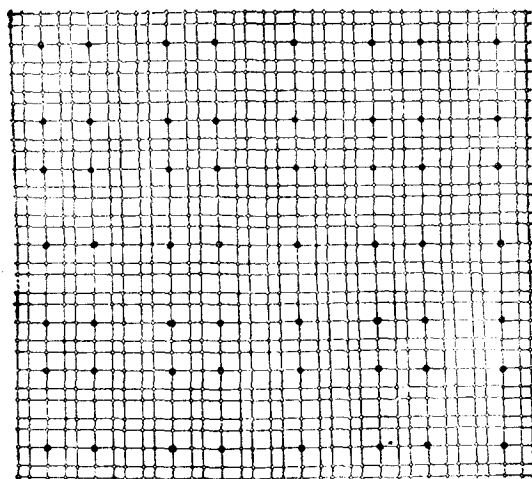


图1 二维 Fibonacci 准晶格 两种原子间距在两个方向上均是 Fibonacci 排列,如果断开长键,系统形成三种原子集团:孤立原子,双原子分子和四原子分子. 其中孤立原子和四原子分子各自又构成原始的二维 Fibonacci 排列,而双原子分子则不是

推广到二维 Fibonacci 准晶中,研究它的能谱的分支规则和自相似性.

图1是二维 Fibonacci 准晶格的迁移模型,即格点上原子都相同,而原子间的距离在互相垂直的两个方向上均是 Fibonacci 排列. 在单电子紧束缚模型下,哈密顿量为

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

式中 $|i\rangle$ 是第 i 个 Wannier 态, ε_i 是单电子座能 (site energy), t_{ij} 是最近邻原子迁移矩阵元 (跳跃积分). 对本文所讨论的迁移模型,所有原子座能都相同,可选为零,而对应于长键和短键分别有两种迁移矩阵元 t_w (weak) 和 t_s (strong). 现以一维 Fibonacci 链为例,简单地阐述 DD 方法的主要思想. 首先,忽略弱键作用时,即令 $t_w = 0$, 整个链由两种原子集团构成:孤立原子和由强键 t_s 相联的双原子分子,它们的本征能量分别是 $E_1 = 0$ 和 $E_{2,3} = \pm t_s$, 对于无限长链来说这三个能级都是无限简并的. 当再考虑弱键作用时,这些本征态互相耦合,但主要效应是具有相同能量的态的共振耦合^[6,15]. 先考虑 $E_1 = 0$ 的态,它是由孤立原子提供的,把不具有这个态的双原子分子消掉,就得到一个新的子链,子链上的原子具有相同的重整化座能 $\varepsilon'_i = E_1 = 0$ 和两种重整化迁移矩阵元 t'_w 和 t'_s ,它们又构成 Fibonacci 排列. 对于 $E_{2,3} = \pm t_s$ 的双原子分子,情况类似. 这样就存在三条子链,对每条子链重复这种 DD 过程,又会各得三个能级、重整化的迁移矩阵元和相应的子链. 用这样的分析方法, Niu 和 Nori^[6]成功地解释了能谱的无限三支即类 Cantor 集结构. 刘有延和 Srirakool^[15]用这 DD 方法研究一维 Fibonacci 座模型 (on-site model),解释了能谱四主子带的整体结构,并且被数值计算结果很好地证实了. 本文推广这种 DD 方法,研究二维 Fibonacci 准晶的能谱性质.

二、哈密顿量的化简

一维 Fibonacci 链上存在一些点,使它两边一定大范围内的格点对称. 对于二维 Fibonacci 系统,由于互相垂直的两个方向上均是相同的 Fibonacci 排列,因而总可以找到一些垂直于二维平面的四重转动对称轴. 我们选取具有这种对称性的有限部分进行数值模拟计算,这对扩大所研究格点的数目和降低对计算机容量的要求是很重要的. 由于属于同一局部同构类的准周期系统具有相同的物理性质^[23, 24],因此当研究它的电子性质时,我们可以任选其中一部分,只要这部分足够大,得到的结果都是相同的. 这里,不失一般性地研究图 1 的二维 Fibonacci 准晶系统. 根据对称性把系统分成相同的四块,每块内包含 n 个原子,连同中间一个原子总原子数 $N = 4n + 1$. 把每块内格点按相同次序排号,并把对称中心的格点作为第一个原子,则哈密顿矩阵是

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

式中 A 是某一块的哈密顿量, h 是相邻两块原子的迁移矩阵, h^T 是 h 的转置,它们均是 $n \times n$ 阶方阵. 而 $e = (\varepsilon_i, 0, \dots, 0)$ 是 n 阶行矢量, e^T 是 e 的转置.

利用相似变换,可把 H 分块对角化,求出的变换矩阵是

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

这里

$$Q = 1/2 \begin{bmatrix} I & I & I & I \\ \alpha_0 I & \alpha_1 I & \alpha_2 I & \alpha_3 I \\ \alpha_0^2 I & \alpha_1^2 I & \alpha_2^2 I & \alpha_3^2 I \\ \alpha_0^3 I & \alpha_1^3 I & \alpha_2^3 I & \alpha_3^3 I \end{bmatrix}, \quad (4)$$

式中 I 是 $n \times n$ 阶单位方阵, $\alpha_k = \exp(2k\pi i/4)$ ($k = 0, 1, 2, 3$). 设 $H' = PHP^{-1}$, 可得

$$H' = \begin{bmatrix} \varepsilon_i & 2e & 0 & 0 & 0 \\ 2e^T & A_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_3 \end{bmatrix}, \quad (5)$$

式中 $A_k = A + \alpha_k h^T + \alpha_k^* h$ ($k = 0, 1, 2, 3$). 令

$$A'_0 = \begin{bmatrix} \varepsilon_i & 2e \\ 2e^T & A_0 \end{bmatrix}. \quad (6)$$

这样把求 H 的本征值转换为求 A'_0, A_1, A_2, A_3 四个分块矩阵的本征值. 式中 A'_0, A_2 是实对称阵, A_1, A_3 是复厄密阵, 且有 $A_1 = A_3^*$. 因此, A_1 与 A_3 有相同的本征值. 由此可得

出,在一般情况下,能级中有 $1/3$ 是简并态,其余 $2/3$ 是非简并态。

三、能谱结构

1. 能谱的第一层结构

DD 方法是用逐级近似来研究能谱的,在分析过程中,得出的能级不断地分裂。从这个意义上讲,能谱有分层的结构 (hierarchical structure), 下面逐层地研究其分支规律。对于本文所讨论的迁移模型,可选座能量 $\varepsilon_i = 0$ 。首先,如果原子间都没有相互作用,即 $t_w = t_s = 0$,则所有原子均是孤立的,本征能量是原子的“裸能” $E = 0$ 。当短(强)键相互作用 $t_s \neq 0$,而忽略长(弱)键相互作用,即 $t_w = 0$,则从图 1 中可以看到,二维 Fibonacci 准晶格被分解成三种孤立的集团 (cluster): 孤立原子,双原子分子(DM),和四原子分子(QM)。如图 2 所示,相应的能级可解出如下:

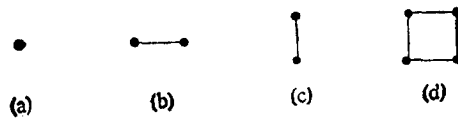


图 2 三种原子集团 (a)为孤立原子;(b),(c)为双原子分子;(d)为四原子分子

显然,孤立原子能级为 $E = 0$ 。而对双原子分子,可解 Schrödinger 方程

$$\begin{bmatrix} 0 & t_s \\ t_s & 0 \end{bmatrix} |\phi\rangle = E |\phi\rangle, \quad (7)$$

即得本征能量 $E = \pm t_s$, 分别对应于成键态和反键态。对于四原子分子,解 Schrödinger 方程

$$\begin{bmatrix} 0 & t_s & 0 & t_s \\ t_s & 0 & t_s & 0 \\ 0 & t_s & 0 & t_s \\ t_s & 0 & t_s & 0 \end{bmatrix} |\phi\rangle = E |\phi\rangle, \quad (8)$$

可得二重简并能级 $E = 0$ 和两个非简并能级 $E = \pm 2t_s$ 。这样,第一级近似共得到五个能级,它决定了能谱是五主子带结构,我们把这种五分支的能级记为 F 类型。图 3 给出的数值计算结果证实了以上的分析。

现在研究各主子带的进一步分裂情况。由于 DD 方法是考虑同能量态之间的共振耦合而逐级近似地分析能谱的,而一个能量本征态可存在于一个或多个原子(原子集团)上,因此研究同态之间的耦合可以转化为研究这些同类集团间的相互作用情况。这种做法将用在以下的全部分析之中。

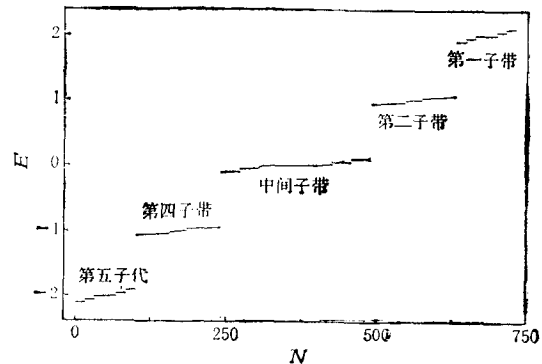


图 3 二维 Fibonacci 准晶电子能谱 座能 $\varepsilon_i = 0$, 跳跃积分 $t_s = -1.0$, $t_w = -0.1$, 共包括 729 个原子,能谱是五主子带结构,从上至下记为第一到第五主子带,其中第一、第三、第五主子带均有五个次子带,第二、第四主子带有三个次子带

对目前情况,有五个能级,因此最初的二维 Fibonacci 晶格分为五种“子晶格”. $E = 0$ 的“子晶格”由孤立原子和四原子分子组成, $E = \pm t$ 的“子晶格”由双原子分子组成, $E = \pm 2t$ 的“子晶格”均由四原子分子组成. 每种“子晶格”分别具有各自的重整化“座能”和重整化“迁移矩阵元”,它们都将通过求同态之间的耦合作用来确定. 比起一维情形,二维 Fibonacci 准晶由于有许多的耦合“路线”,因此耦合情况要复杂得多. 所幸的是,从微扰理论可知,主要的耦合作用应当是存在于由最短“路线”相联的原子集团之间,这就使得我们能够相当准确地进行解析研究.

2. 能谱的第二层结构

(1) 第一、第五和中间子带

数值计算结果如图 3 所示. 由于能级的对称性,第一与第五,第二与第四主子带有相

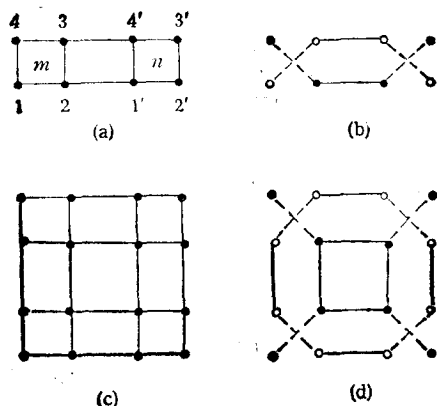


图 4 (a) 是两个具有双重简并零能态的四原子分子构成的集团, 可以分成两组没有相互耦合的非简并零能态, 在 (b) 中分别用圆圈和实心圆点表示; (c) 和 (d) 是四个四原子分子时的情形

正交归一化波函数, 则有

$$\begin{aligned} |\phi_m^{(1)}\rangle &= (|1\rangle - |3\rangle)/\sqrt{2}, \\ |\phi_m^{(2)}\rangle &= (|2\rangle - |4\rangle)/\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (9)$$

这样, 对于最近邻的两个四原子分子内的各原子[图 4(a)], 有下列关系:

$$\begin{aligned} \langle 2|H'|1'\rangle &= \langle 1'|H'|2\rangle = t_w \\ \langle 3|H'|4'\rangle &= \langle 4'|H'|3\rangle = t_w \\ \langle i|H'|j'\rangle &= \langle j'|H'|i\rangle = 0 \text{ (对其它的 } i, j), \end{aligned} \quad (10)$$

式中 $H' = \sum_{(i,j)=\langle w \rangle} |i\rangle t_{ij} \langle j|$ 是(1)式中的微扰部分.

利用简并微扰理论, 可求得这样两个四原子分子零能态之间的耦合强度(迁移矩阵元)

同的结构, 因此实际上只有三种结构类型的主子带. 首先看 $E = 0$ 的中间主子带, 具有 $E = 0$ 的态是三重简并的, 一个来源于孤立原子, 两个来源于四原子分子. 从图 1 可以看出, 最强的耦合作用只存在于最近邻的四原子分子之间, 因此, 孤立原子能级仍是 $E = 0$. 对于四原子分子则有三种原子集团: 孤立四原子分子, 最近邻的两个四原子分子和最近邻的四个四原子分子. 图 4(a) 和 (c) 分别示出后两种集团.

现在来求具有零能态的四原子分子间的新耦合强度. 通过求解方程(8)很容易得到它的波函数. 用 $|\phi_m^{(1)}\rangle$ 和 $|\phi_m^{(2)}\rangle$ 来表示第 m 个四原子分子两个零能态的

$$\begin{aligned}
 T_{m_1 n_1} &= \langle \phi_m^{(1)} | H' | \phi_n^{(2)} \rangle = t_w/2, \\
 T_{m_2 n_1} &= \langle \phi_m^{(2)} | H' | \phi_n^{(1)} \rangle = t_w/2, \\
 T_{m_1 n_2} &= \langle \phi_m^{(1)} | H' | \phi_n^{(1)} \rangle = 0, \\
 T_{m_2 n_2} &= \langle \phi_m^{(2)} | H' | \phi_n^{(2)} \rangle = 0.
 \end{aligned} \quad (11)$$

(11)式给出这样的结果: 两个最近邻四原子分子的四个零能态可分为两组, 在同一组内的 $|\phi_m^{(1)}\rangle$ 和 $|\phi_n^{(2)}\rangle$ 互相耦合, $|\phi_m^{(2)}\rangle$ 用 $|\phi_n^{(1)}\rangle$ 互相耦合, 但不同组内的零能态没有耦合作用, 这结果在图 4(b) 形象地表示出. 这个情况对于四个相邻的四原子分子也相同, 如图 4(c) 和(d)所示. 通过对这种准晶格结构的分析得出, 对所有四原子分子上的零能态都可这样处理, 即把整个系统分为两个各由相同四原子分子组成的子系统, 这两个子系统等同, 但它们之间没有相互影响. 作了这样的分解以后, 每一个子系统均由有一个零能态的四原子分子组成, 而四原子分子组成的晶格与原始二维 Fibonacci 晶格完全相同(图 1), 因此, 如果重复象前面对第一层能谱的分析计算, 将会发现, 现在这个中间子带将进一步分裂为五个子子带, 能级为 $E = 0, \pm t_w/2, \pm t_w$. 但它与主子带结构(F 类型)有所不同, 我们把它记为 F_0 类型. 其不同点仅在于中间的子子带, 由于还存在孤立原子提供的零能态, 所有这些零能态进一步耦合将是很复杂的, 暂不能确定其能谱分支规则. 除中间子子带外, 其余四个子子带按照上下次序分别与对应的主子带结构完全相同.

至于第一(或第五)主子带, 情况就很简单, 每个四原子分子提供一个 $E = -2t_s$ (或 $2t_s$) 的本征态, 而四原子分子再组成二维 Fibonacci 结构, 因此第一、第五主子带的结构与整个能谱的结构完全相同, 即属于五分支的 F 类型.

(2) 第二、第四主子带

这两个子带来源于双原子分子提供的能级 $E = \pm t_s$. 由于能谱的对称性, 只考虑其中一个即可, 如 $E = t_s$ 的第四主子带. 从原理上讲, DD 方法是一种很精确的微扰近似, 因此在计算重整化参数时, 我们只考虑直接与耦合态相关的那些原子, 其它原子的贡献或者可以忽略, 或者可以归并到相关的耦合项中. 基于这点, 在下面的计算中略去所有与共振耦合无关的项. 初看起来, 这种做法似乎很粗略, 但数值模拟结果与这样分析得到的结论

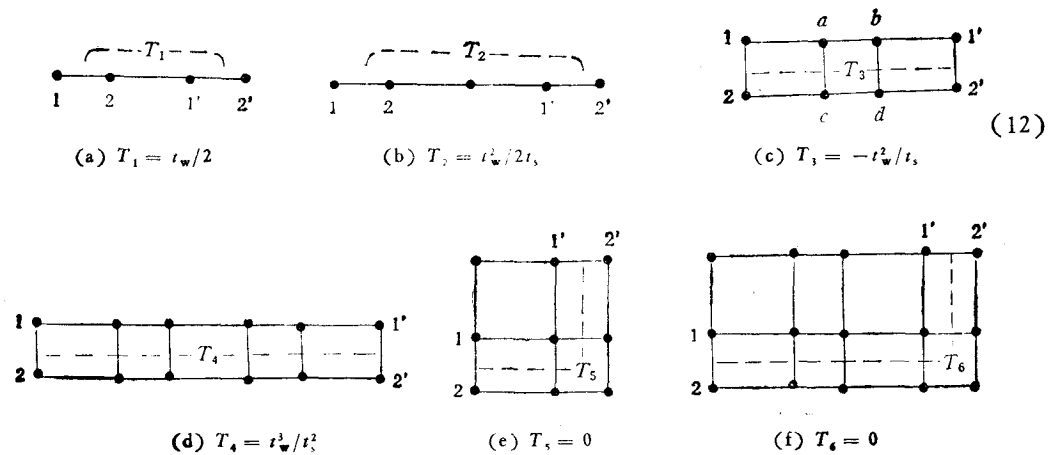


图 5 两个双原子分子之间的六种耦合作用情况

是非常一致的。

双原子分子上同态之间的耦合共有六种情形,如图 5 所示。可求出这六种耦合的重整化迁移矩阵元。

作为例子,这里给出(12)'式的计算过程。设第 m 个双原子分子由原子 1 和 2 组成,第 n 个双原子分子由原子 1' 和 2' 组成(见图 5)。对于第 m 个双原子分子,解方程(7),可得成键态和反键态的正交归一化波函数

$$|\phi_m^\pm\rangle = (|1\rangle \pm |2\rangle)/\sqrt{2}. \quad (13)$$

由图 5(c) 可写出关于这些原子的 Schrödinger 方程

$$\begin{aligned} t_w\phi_a + t_s\phi_2 &= E\phi_1, \\ t_w\phi_c + t_s\phi_1 &= E\phi_2, \\ t_w\phi_1 + t_s\phi_b + t_s\phi_c &= E\phi_a, \\ t_w\phi_2 + t_s\phi_a + t_s\phi_d &= E\phi_c, \\ t_s\phi_a + t_s\phi_d + t_w\phi_{1'} &= E\phi_b, \\ t_s\phi_c + t_s\phi_b + t_w\phi_{2'} &= E\phi_d, \\ t_w\phi_b + t_s\phi_{2'} &= E\phi_{1'}, \\ t_w\phi_d + t_s\phi_{1'} &= E\phi_{2'}. \end{aligned} \quad (14)$$

当只考虑成键态间的耦合作用,解(14)式并利用(13)式,可得 ϕ_m^+ 与 ϕ_n^+ 的关系

$$(-t_w^2/t_s)\phi_m^+ = (E - t_s)\phi_n^+. \quad (15)$$

(14)和(15)式中已把无关的项一概略去。把(15)和(14)式中的任一式进行比较,可知有效耦合强度为

$$T' \equiv T_s = -t_w^2/t_s. \quad (12)'$$

(12)式给出了一个重要的结果, $T_s = T_c = 0$,这意味着成键方向互相垂直的双原子分子之间没有相互作用,即图 5(e) 和(f)所示的那两种情况。从这个事实出发,按照 DD

方法,我们可以把双原子分子组成的准晶格分成两个无相互作用但具有相同结构的子晶格。对于这样的每一个子晶格,在两个方向上都是 Fibonacci 排列,但不等同,即具有几何上的各向异性(图 1)。这就给出了 $T_1 \neq T_3$ 和 $T_2 \neq T_4$ 的结果,因此该子带的结构必与五个分支的主子带结构不同。由(12)式知 $|T_1| \gg |T_2|, |T_3|, |T_4|$,因此在讨论第二层能谱结构即进行二级近似时,弱键 T_2, T_3, T_4 可忽略,而只考虑 T_1 的作用。这样,由双原子分子构成的子晶格又分为孤立的双原子分子和由 T_1 相联的双

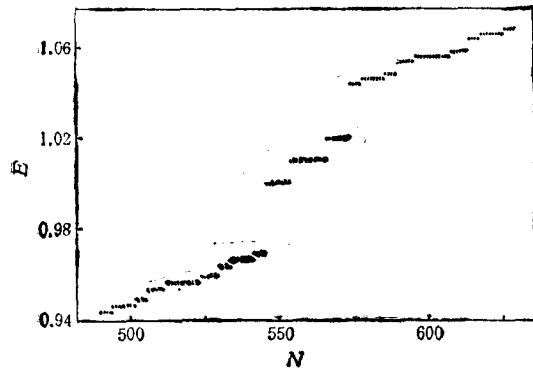


图 6 图 3 中第二主子带的放大图 它是三次子带结构,其中中间次子带又有三分支,上下次子带各有九分支

原子分子集团,它们的能级分别是 $E = t_s$ 和 $E = t_s \pm T_1 = t_s \pm t_w/2$ 。故第四(及第二)主子带有三子子带结构,记为 F_2 类型。图 3 和图 6 的数值结果也很好地证实了这个分

析.

3. 能谱的更高层结构

现在来研究能谱的第三层及更高层结构. 如前所述, 第一和第五子带在第二层中有相同的 F 类型结构, 而中间主子带除它第三子带外, 其余四个子带与对应的主子带有相同的分支规则. 所以只需要考虑由双原子分子所贡献的第二、第四子带的结构. 已经知道, 在第二层结构中, 有孤立的双原子分子和双双原子分子集团, 能级分别是 $E = \epsilon_s$ 和 $E = \epsilon_s \pm \epsilon_w/2$. 在第三层结构中我们讨论由它们分别形成的更大的原子集团.

由于 $|T_2|, |T_3| \gg |T_4|$ [(12)式], 考虑能级的第三层结构时, 应同时考虑 T_2 和 T_3 的作用, 而只令 $T_4 = 0$. 这样, 对于孤立双原子分子, 又形成两种集团, 如图 7(a), (b) 所示. (a) 仍是孤立双原子分子, 能级仍为 $E = \epsilon_s$. (b) 是由 T_3 相联的两个双原子分子, 能级应为 $E = \epsilon_s \pm T_3 = \epsilon_s \pm \epsilon_w^2/\epsilon_s$. 这样在第三层中, 孤立双原子分子提供的能级有三支结构, 但从以下分析可知, 更细的分支与 F_2 类型不同, 我们记为类型 A. 对于分

析第二层能谱时的双双原子分子, 由于对称性的存在, 可只考虑其中一个能级 $E = \epsilon_s + \epsilon_w/2$. 进行三级近似时, 有四种集团, 如图 7(c)–(f). 用前面计算(12)'式中 T_3 的同样方法, 得到如图 7(d)和(e)所示的双双原子分子之间两类耦合作用, 它们是: (d) $T_7 = T_2/2 = \epsilon_w^2/4\epsilon_s$, (e) $T_8 = T_3 = -\epsilon_w^2/\epsilon_s$. 有了这两个耦合键, 通过解各自的久期方程可求出四种集团各自形成的能级. (c) 是孤立的双双原子分子, (d) 是由 T_7 相联的两个双双原子分子, (e) 是由 T_8 相联的两个双双原子分子, (f) 是由 T_7 和 T_8 相联的 4 个双双原子分子, 这样, 它们的能级分别是

$$\begin{aligned} (c) \quad E_1 &= \epsilon_s + \epsilon_w/2, \\ (d) \quad E_{2,3} &= \epsilon_s + \epsilon_w/2 \pm \epsilon_w^2/4\epsilon_s, \\ (e) \quad E_{4,5} &= \epsilon_s + \epsilon_w/2 \pm \epsilon_w^2/\epsilon_s, \\ (f) \quad E_{6,7} &= \epsilon_s + \epsilon_w/2 \pm 3\epsilon_w^2/4\epsilon_s, \\ E_{8,9} &= \epsilon_s + \epsilon_w/2 \pm 5\epsilon_w^2/4\epsilon_s. \end{aligned} \quad (16)$$

这说明, 在第三层结构中双双原子分子的能级有 1 分为 9 的分支性质, 记为 B 类型. 由图 6 所示的数值计算结果可看出, 这个分析结果是很正确的.

为了讨论能谱的第四层结构, 现在有必要将以上所考虑的几种原子集团、各自的有效耦合作用、特征关系及由此而决定的能级分支类型作一总结. 首先, 应当指出, 对于重整化过程中具有相同能量的某种集团, 在互相垂直的两个方向上均构成 Fibonacci 排列, 因而它们均有四个不为零的重整化迁移矩阵元, 如(12)式. 现把最强的耦合键记为 T_1 , 在该

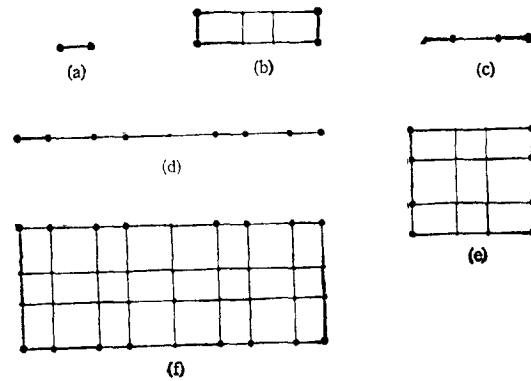


图 7 进行三级近似分析时由双原子分子形成的六种集团 (a), (b) 来源于孤立双原子分子; (c)–(f) 来源于双双原子分子集团, 所考虑的原子用大实心圆点表示

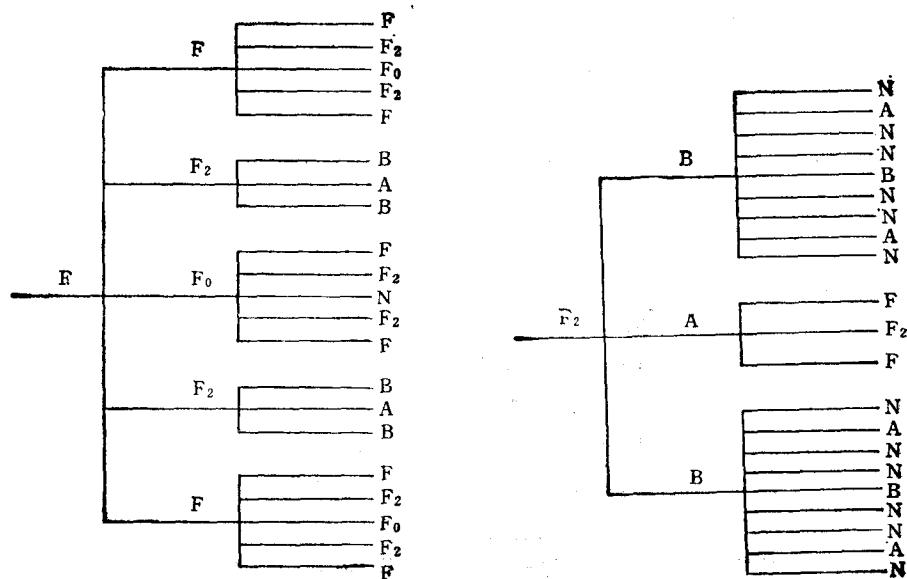
方向上的弱键记为 T_2 , 而用 T_3 和 T_4 分别表示另一方向上的强键和弱键. 其次, 从前面的分析方法可知, 某一类集团所对应的能级结构唯一地由 T_1, T_2, T_3, T_4 的特征关系决定. 表 1 可以作为确定各种集团能谱分支规则的一个标准.

表 1 四种原子集团各自的耦合强度和特征关系以及对应的能谱分支类型 (1)是最初二维 Fibonacci 准晶格原子;(2)是双原子分子集团;(3)是图 7(a)孤立双原子集团;(4)是图 7(c)双双原子分子集团

原子集团	T_1	T_2	T_3	T_4	特征关系	分支类型	分支数目
(1)	t_s	t_w	t_s	t_w	$ T_1 = T_3 , T_2 = T_4 $	F	5
(2)	$t_w/2$	$t_w^2/2t_s$	$-t_w^2/t_s$	t_w^3/t_s^2	$ T_1 = 1/2 T_3 $	F_2	3
(3)	$-t_w^2/t_s$	t_w^3/t_s^2	$-t_w^3/2t_s^2$	$-t_w^4/2t_s^3$	$ T_2 = 2 T_3 $	A	3
(4)	$-t_w^2/t_s$	t_w^3/t_s^2	$t_w^2/4t_s$	$t_w^3/4t_s^2$	$ T_1 = 4 T_3 $	B	9

进行如同(14),(15)式那样的计算, 可求得图 7(a)~(e) 中各个集团同能态之间进一步耦合时的重整化迁移矩阵元. 对于(f)的情况由于结构复杂, 还不能求出这几个参数. 表 2 列出 T_1, T_2, T_3, T_4 的特征关系, 并与表 1 中的关系相比较, 便得到第二、第四主子带的每一个次主子带的分支类型.

综合以上结果, 得到二维 Fibonacci 准晶整个能谱的结构, 见图 8, 其中有些能级暂不能确定其分支性质的均用 N 表示. 从图 8 可以看到, 能谱有多种类型的分支结构, 其规



(a) 二维 Fibonacci 准晶电子能谱整体结构示意图

(b) F_2 类型分支的结构

图 8

表 2 进行四级近似时图 7 中六类集团各自的耦合强度、特征关系以及对应的能谱分支类型

原子集团	$ T_1 $	$ T_2 $	$ T_3 $	$ T_4 $	特征关系	分支类型
(a)	$t_w^1/2t_s^1$	$t_w^1/2t_s^2$	t_w^1/t_s^2	t_w^1/t_s^1	$ T_2 = 1/2 T_3 $	F_2
(b)	$t_w^1/2t_s^1$	$t_w^1/2t_s^2$	$t_w^1/2t_s^1$	$t_w^1/2t_s^2$	$ T_1 = T_3 , T_2 = T_4 $	F
(c)	t_w^1/t_s^2	t_w^1/t_s^1	$t_w^1/4t_s^2$	$t_w^1/4t_s^1$	$ T_1 = 4 T_3 $	B
(d)	$t_w^1/8t_s^1$	$t_w^1/8t_s^2$	t_w^1/t_s^1	t_w^1/t_s^2	不 确 定	...
(e)	$t_w^1/2t_s^1$	$t_w^1/2t_s^2$	$t_w^1/4t_s^2$	$t_w^1/4t_s^1$	$ T_2 = 2 T_3 $	A

律要比一维 Fibonacci 的类 Cantor 集单种分支复杂, 但比二维 Penrose 准晶的能谱结构要规则得多。

四、小 结

用 DD 方法研究了二维 Fibonacci 电子能谱各层能级的分支规则, 第一次在二维准周期系统中发现了有规则的、多种分支类型的能谱结构, 这主要是由双原子分子的各向异性和四原子分子的同向同性所引起的。尽管 DD 方法是在 $|t_w/t_s| \ll 1$ 的情况下应用的, 但本文的数值计算结果表明, 至少在 $|t_w/t_s| \leq 0.1$ 的情况下以上分析是正确的。甚至当 $|t_w/t_s| \leq 0.4$ 时, 五主子带结构仍明显存在。同时应当指出, 由于我们进行数值模拟所包含的格点数目受计算机容量的限制, 因而从第四层后的能谱的精细结构已开始模糊。

- [1] D. S. Schechtman, I. Blech, D. Gratias and J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1951.
- [2] M. Kohmoto, L. P. Kadanoff and C. Tang, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1870.
- [3] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H. Schellnhuber and E. Siggia, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1873.
- [4] M. Kohmoto and J. R. Banavar, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 563; M. Kohmoto and B. Sutherland, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 5043.
- [5] F. Nori and J.P. Rodriguez, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 2207.
- [6] Q. Niu and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 2057.
- [7] J.P. Lu, T. Odagaki and J.L. Birman, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 4809.
- [8] W. M. Zheng, *Phys. Rev.*, **A35**(1987), 1467.
- [9] Hong-ru Ma (马红儒), and Chien-hua Tsai (蔡建华), *J. Phys.C*, **21**(1988), 4311.
- [10] Youyan Liu (刘有延), and R. Riklund, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 6034.
- [11] R. Riklund, M. Severin and Y. Liu (刘有延), *Int. J. Mod. Phys.*, **B1**(1987), 121.
- [12] Youyan Liu (刘有延), *Mater. Sci. Forum* **22-24**(1987), 499.
- [13] S. N. Karmakar, A. Chakrabarti and R.K. Moitra, *J. Phys., Cond. Matter.*, **1**(1989), 1423.
- [14] T. Fujiwara, M. Kohmoto and T. Tokihiro, *Phys. Rev.*, **B40** (1989), 7413.
- [15] Youyan Liu (刘有延) and W. Sritrakool, *Phys. Rev.*, to be published.
- [16] Penghui Ma (马鹏辉) and Youyan Liu (刘有延), *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 9904.
- [17] M. Kohmoto and B. Sutherland, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 3849; *Phys. Rev. Lett.*, **56** (1986), 2740.
- [18] T. Odagaki and D. Nguyen, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 2184.
- [19] Penghui Ma (马鹏辉) and Youyan Liu (刘有延), *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 10658.

- [20] K. Ueda and H. Tsunetsugu, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1272.
[21] W. A. Schwalm and M.K. Schwalm, *Phys. Rev.*, **B37** (1988), 9524.
[22] J. A. Ashraff, J-M. Luck and R.B. Stinchcombe, *Phys. Rev.*, **B41** (1990), 4314.
[23] D. Levine and P.J. Steinhardt, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 596.
[24] J.E.S. Socolar and P.J. Steinhardt, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 617.

ELECTRONIC SPECTRUM OF TWO-DIMENSIONAL FIBONACCI QUASICRYSTALS

FU XIU-JUN

Department of Physics, Inner Mongolia Normal University, Hohhot, 010022

CHENG BO-LIN ZHENG DA-FANG LIU YOU-YAN

Department of Physics, South China University of Technology, Guangzhou, 510641

(Received 18 December 1990)

ABSTRACT

By means of the decomposition-decimation method based on the renormalization-group technique, we have studied the properties of electronic energy spectrum for the two-dimensional Fibonacci quasicrystals. It is found that the spectrum has a multifurcating structure which is very different from the monofurcating structure of one-dimensional Fibonacci quasicrystals. By using the four-fold symmetry of the Fibonacci quasilattice under study, we have reduced the Hamiltonian and then performed a numerical simulation, the results of which are consistent with the analytical ones.

PACC: 7125M; 7170; 0220