

广义 Fibonacci 准周期链能谱性质*

傅秀军 郭子政 周培勤

内蒙古师范大学物理系, 呼和浩特 010022

刘 有 延

华南理工大学应用物理系, 广州 510641

1991 年 7 月 5 日收到

本文研究一种广义 Fibonacci 准周期链(孪生子模型)的电子及声子谱。重整化群分析表明, 电子能谱具有 3 分支的自相似结构, 但每一层中的中间子带又类似于周期系统。数值计算结果证明这种分析的正确性。对于声子谱, 则显示出与 Fibonacci 链相同的性质。

PACC: 7125M; 7170; 6320D

一、引 言

从 1984 年 Shechtman 等人^[1]在实验中发现具有 5 次对称性的 X 射线衍射图以来, 关于准晶体的研究已有大量的工作。Fibonacci 链作为一维准晶的基本模型, 受到特别的重视, 许多人从不同方面研究了它的性质。其中最显著的特征是能谱的 Cantor 集结构, 即密集点型和自相似性^[2-7]。近年来, 理论工作者的兴趣开始转向其它的准周期模型。例如广义 Fibonacci 准周期链, 多数研究表明, 这一系列的准晶格具有类 Cantor 集的谱结构^[8-13]。刘有延等人^[14]根据已发现的准晶材料多为三元合金这一事实及 Boissieu 等人^[15]的实验结果, 提出一种一维三元准周期模型, 并研究了它的性质, 得出与 Fibonacci 能谱非常不同的自相似谱结构。由于实际存在的准晶体有各种构型, 为了更全面地了解这类新型物质的性质, 理论工作不应只停留在一种或几种模型上。但到目前为止, 在一维问题中对 Fibonacci 以外的准周期模型的研究还远远不够。

一个 Fibonacci 排列 S_∞ 可由下列迭代过程产生。令 $S_0 = \{B\}$, $S_1 = \{A\}$, 且 $S_{l+1} = \{S_l, S_{l-1}\}$, ($l \geq 1$), 当 $l \rightarrow \infty$ 时得到这样一个准周期排列

$ABAABABAABAAB \dots$

一种直接的推广是令 $S_{l+1} = \{S_l^m, S_{l-1}^n\}$, 其中 m, n 为正整数, 便产生一系列准周期排列, 称为广义 Fibonacci 排列, 在这里记作 $GF(m, n)$ 。本文研究 $m=1, n=2$ 的广义 Fibonacci 准周期链, 其排列为

$ABBAAABBABBABB \dots$

* 国家自然科学基金资助的课题。

它也被称为“孪生子模型”, 即可由生长过程产生: 由 B 开始, 按照 $B \rightarrow A, A \rightarrow ABB$ 的规则一代一代地生长下去, 便得到以上的排列. 对于无限长链, A, B 的数目之比

$$\gamma = \lim_{l \rightarrow \infty} [N_A(l)/N_B(l)] = 1. \quad (1)$$

相邻两代元素总数之比

$$\tau = \lim_{l \rightarrow \infty} (F_{l+1}/F_l) = 2. \quad (2)$$

(1), (2) 式可用来分析本征能量的态密度.

由于 Fibonacci 排列存在无限的自相似性, 因此重整化群分析是获得能谱的一个有效方法. Niu 和 Nori^[2] 首先在一维 Fibonacci 系统中提出这种方法. 刘有延及其合作者将之发展为分解-消元法 (decomposition-decimation)^[3,4], 并推广到一维三元模型及二维 Fibonacci 准晶的电子能谱研究中^[14,16]. 本文所讨论的准周期模型也具有自相似性, 因此用基于重整化群的分解-消元法分析电子能谱, 同时由数值计算得到证实. 对于声子谱的分析, 有动力学映象法^[5]、格林函数重整化群法^[6]及迁移矩阵法^[7]等. 本文通过后一种方法做数值求解, 未发现与 Fibonacci 准晶相异的性质.

二、电子能谱

图 1(a) 所示为第 5 代 $GF(1,2)$ 链, 所考虑的为非对角模型(迁移模型), 即所有原子均相同, 而对应于长短两种原子间距, 跨越积分取两个不同的值 t_L 和 t_S , 并设 $t_L \ll t_S$. 采用单电子紧束缚近似, 哈密顿量为

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

其中 $|i\rangle$ 为 Wannier 态, ε_i 为单电子座能 (site energy), 可取为 $\varepsilon_i = 0$, 而 t_{ij} 为最近邻跨越积分, 有两种值 t_L 和 t_S .

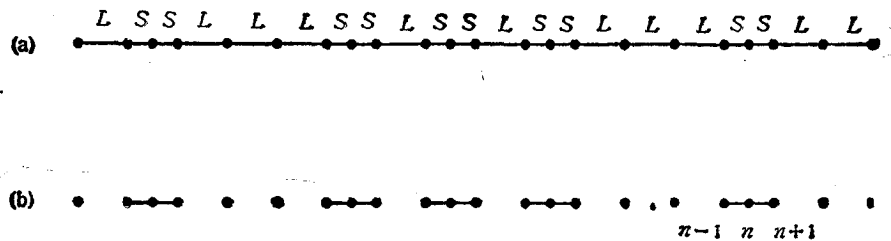


图 1 (a) 广义 Fibonacci 的 $GF(1,2)$ 链的非对角模型; (b) 忽略弱键时, 形成孤立原子和三原子分子两种集团

重整化群方法分析电子能谱的出发点是弱键近似和同态耦合. 对于图 1(a) 的准周期链, 首先忽略弱键作用, 即令 $t_L = 0$, 则该链形成两种孤立的集团 [图 1(b)]: 孤立原子和由强键 t_S 相联的三原子分子. 对于孤立原子, 本征能量 $E = \varepsilon_i = 0$. 对于三原子分子, 解 Schrödinger 方程可求得本征能量及正交归一化波函数为

$$E = 0, \quad |\phi^0\rangle = (|n-1\rangle - |n+1\rangle)/\sqrt{2}, \quad (4a)$$

$$E = \pm \sqrt{2} t_s, |\psi^\pm\rangle = (|n-1\rangle \pm \sqrt{2} |n\rangle + |n+1\rangle)/2. \quad (4b)$$

这样,一级近似时得到 3 个能级. 图 2 积分态密度 (IDOS) 的数值计算结果出现两个主台阶,证明了以上的分析.

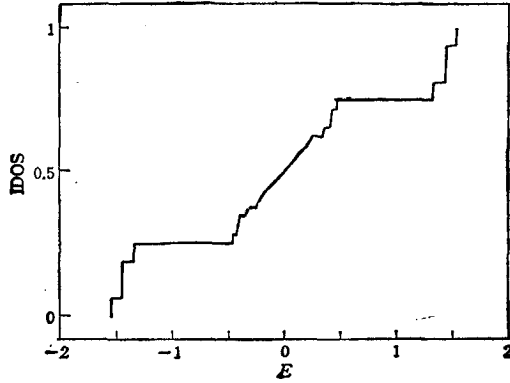


图 2 电子本征能量的积分态密度 计算了第 10 代 GF(1,2) 链共包含 684 个原子, $t_L = -0.3$, $t_s = -1$

利用 (1), (2) 式可求出每一个能级中本征能量数目占总数的比例为

$$\begin{aligned} \rho_+ - \rho_- &= \lim_{l \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{2} N_B(l) / F_l \right] \\ &= \lim_{l \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{4} F_l / F_l \right) = \frac{1}{4}, \\ \rho_0 - \rho_+ &= \lim_{l \rightarrow \infty} [N_B(l-1) / F_l] \\ &= \frac{1}{4} + \lim_{l \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2} F_{l-1} / F_l \right) \\ &= \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (5)$$

则 IDOS 图中两个主台阶高度分别为

$$H_1 = \frac{1}{4} = 0.25, \quad H_2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{2} = 0.75.$$

图 2 的数值结果为 $H_1 = 0.2500$, $H_2 = 0.7500$, 尽管本文计算的只是 684 个原子的有限长链, 该结果与解析分析是非常一致的.

现在考虑弱键 t_L 的作用, 讨论以上 3 个能级的进一步分裂情况. 一级近似得到的 3 个能级都是无穷简并的, 当 $t_L \neq 0$ 时, 各个本征态要互相耦合. 从微扰论可知, 主要作用是具有相同本征能量的那些态之间的“同态耦合”. 对于三原子分子形成的 $E = \sqrt{2} t_s$ 的态, 耦合有两种情况如图 3.

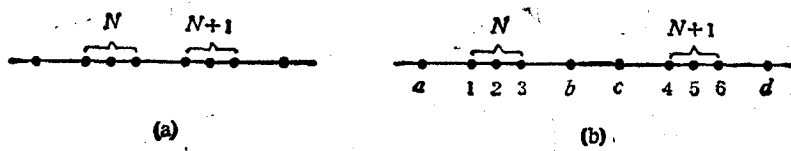


图 3 三原子分子的两耦合情况

1. 两个三原子分子直接由 t_L 相联. 由简并微扰论^[17]可求出有效耦合作用

$$t_s = \langle \phi_N^\dagger | \hat{H}' | \phi_{N+1} \rangle = t_L / 4,$$

其中

$$\hat{H}' = \sum_{i,j=L}^{\prime} |i\rangle t_{ij} \langle j| \quad (6)$$

是 (3) 式中 \hat{H} 的微扰部分, $|\phi_N^\dagger\rangle$ 和 $|\phi_{N+1}\rangle$ 则由 (4b) 式给出.

2. 两个三原子分子通过 3 个长键 t_L 相联. 根据 (3) 式可列出关于各个原子的 Schrödinger 方程

$$t_L \phi_2 + t_s \phi_2 = E \phi_1, \quad t_s \phi_1 + t_s \phi_3 = E \phi_2, \quad t_s \phi_2 + t_L \phi_3 = E \phi_3,$$

$$\begin{aligned} t_L \phi_3 + t_L \phi_c &= E \phi_b, & t_L \phi_b + t_L \phi_4 &= E \phi_c, & t_L \phi_c + t_S \phi_5 &= E \phi_d, \\ t_S \phi_4 + t_S \phi_6 &= E \phi_5, & t_S \phi_5 + t_L \phi_d &= E \phi_6. \end{aligned} \quad (7)$$

由这组方程可导出两个 $E = \sqrt{2} t_S$ 态之间的耦合关系

$$(t_L^3/8t_S^2)|\phi_{N+1}\rangle = (E - \sqrt{2} t_S)|\phi_N\rangle. \quad (8)$$

上式中只考虑同态耦合, 故已略去其它一切无关的项^[14,16]. 将(8)与(7)式中任一方程的形式比较可知, 有效耦合作用

$$t'_L = t_L^3/8t_S^2.$$

把具有 $E = \sqrt{2} t_S$ 本征值的三原子分子都等效为一个原子, 两种耦合作用 t_L 和 t'_L 分别用 A' 和 B' 代替, 则得如下排列:

$$A' B' B' A' A' A' B' B' A' B' B' A' B' B' \dots$$

这又构成一个 $GF(1,2)$ 链, 且有 $t'_L \ll t'_S$. 因此当做二级近似, 忽略新的弱键 t'_L 时, 原来得到的 $E = \sqrt{2} t_S$ 的能级将分裂为 3 个新能级: $E = \sqrt{2} t_S$, $E = \sqrt{2} t_S \pm \sqrt{2} t'_S = \sqrt{2} t_S \pm \sqrt{2} t_L^3/8t_S^2$. 由以上重整化分析过程可知, 这 3 个能级各自形成的次子带将与对应的主子带结构完全相同. 利用(5)式可得这 3 个能级中本征值数目占总数的比例分别为

$$\begin{aligned} \rho'_0 &= \rho_+ \rho_0 = \frac{1}{8}, \\ \rho'_+ &= \rho'_- = \rho_+^2 = \frac{1}{16}. \end{aligned}$$

IDOS 台阶高度

$$\begin{aligned} H'_1 &= \frac{1}{16} = 0.0625, \\ H'_2 &= \frac{1}{16} + \frac{1}{8} = 0.1875. \end{aligned}$$

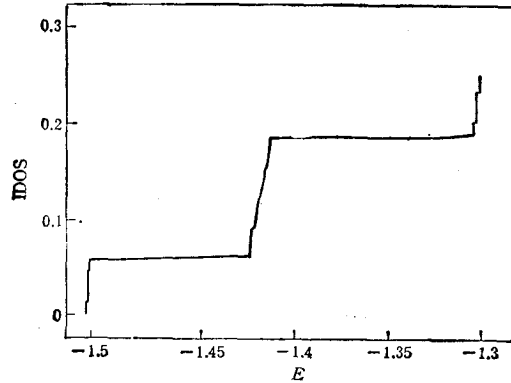


图 4 图 2 中 $E = \sqrt{2} t_S$ 子带的放大图, 它与图 2 结构完全相同

图 4 中得到的两个大台阶及台阶高度

$H'_1 = 0.0629$, $H'_2 = 0.1871$ 均使以上分析结果得到证实. 而且, 图 4 与图 2 完全相似.

由于能谱关于 $E = 0$ 对称, $E = -\sqrt{2} t_S$ 的子带与 $E = \sqrt{2} t_S$ 的子带具有同样的性质.

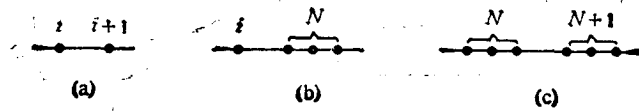


图 5 零能量态之间的 3 种耦合情况

- (a) 两个孤立原子: $t_i = \langle i|\hat{H}'|i+1\rangle = t_L$;
 (b) 孤立原子与三原子分子: $t'_i = \langle i|\hat{H}'|\phi_N\rangle = \sqrt{2} t_L/2$;
 (c) 两个三原子分子: $t'_i = \langle \phi_N|\hat{H}'|\phi_{N+1}\rangle = -t_L/2$.

现在考虑 $E = 0$ 的能级, 它来源于孤立原子和三原子分子. 当 $t_L \neq 0$ 时, 零能量态之间的耦合有 3 种情况(图 5), 它们都是直接通过一弱键耦合, 可以利用(4a)和(6)式

求出有效耦合作用。

由于 t_1, t_2, t_3 的大小都接近, 因此当我们把具有零能量态的孤立原子和三原子分子都等效为一个原子时, 它们构成的原子链更接近于一维周期晶格。即在 $E = 0$ 附近, 能级不会再有明显的分裂, 对应的 IDOS 曲线是接近光滑的。这个特性从图 2 中可看出。而且上下子带的中间部分也与之相同 (图 4)。若取 t_1, t_2, t_3 的几何平均值 $\sqrt{2}t_L/2$ 作为周期链中原子的相互作用强度, 可估算能带的半宽度 $\Delta E = |\sqrt{2}t_L|$, 当 $t_L = -0.3$ 时, $\Delta E = 0.4242$, 图 2 的数值计算结果为 0.4696。

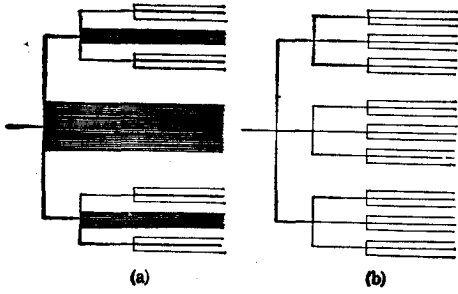


图 6 (a) $GF(1,2)$ 链和 (b) Fibonacci 链电子能谱结构示意图

至此, 本文得到 $GF(1,2)$ 准周期链非对角模型的电子能谱, 用图 6(a) 做一大致的表示。作为比较, 图 6(b) 为 Fibonacci 链能谱结构图。由以上分析及数值计算结果可知, $GF(1,2)$ 系统的能谱是自相似的, 但与 Fibonacci 链能谱的 Cantor 集结构有明显不同, 即每一层中的各个中间子带出现连续谱, 这一部分不再有分支结构, 而是具有周期系统的性质。对于这种 $GF(1,2)$ 准晶格, Kolai 等人^[10]在研究磁激发性质时, 发现有两段是连续谱。You 等人^[11]的研究亦得到 $E = 0$ 时对应的波函数为扩展态。此外, 由格林函数重整化群方法得到的无限系统局部态密度在 $E = 0$ 周围也显示出与周期系统一样的平滑段^[12,13]。本文的结果证实了以上的结论, 但这种规则分层的、存在多个连续段的谱结构, 至今尚未见报道。

三、声子谱

假设所讨论的 $GF(1,2)$ 链由 $N+2$ 个原子组成, $u_n e^{-i\omega t}$ 为第 n 个原子 ($n = 0, 1, \dots, N+1$) 偏离平衡位置的位移, 第 n 和第 $n+1$ 个原子间的弹性系数为 $k_{n,n+1}$ 。若 m_n 为第 n 个原子的质量, 则采用简谐近似时, 第 n 个原子的运动方程为

$$-m_n \omega^2 u_n = k_{n,n+1}(u_{n+1} - u_n) + k_{n-1,n}(u_{n-1} - u_n), \quad (n = 0, 1, \dots, N+1). \quad (9)$$

引入位移矢量 (u_{n-1}, u_n) , 则由 (9) 式得

$$U_n \equiv \begin{pmatrix} u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_n & b_n \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ u_{n+1} \end{pmatrix} = T_n U_{n+1}, \quad (10)$$

其中

$$a_n = 1 + k_{n,n+1}/k_{n-1,n} - m_n \omega^2 / k_{n-1,n}, \quad b_n = -k_{n,n+1}/k_{n-1,n}.$$

对于 $N+2$ 个原子的有限链, 则有

$$U_1 = T_1 T_2 \cdots T_N U_{N+1} = \Lambda U_{N+1}. \quad (11)$$

为获得本征值, 必须给这样的准周期系统加上一个边界条件。这里采用固定边界条件 $u_0 = u_{N+1} = 0$, 则

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \mu_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_N \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

要使 μ_n 有非平庸解, ω 必须满足本征值方程

$$a_{11}(\omega) = 0. \quad (13)$$

由本征值方程 (13) 就可以计算声子谱和态密度. 其中本征值的计算可根据 ω 变化时 $a_{11}(\omega)$ 的符号来确定. 即当 $a_{11}(\omega)$ 与 $a_{11}(\omega + \Delta\omega)$ 符号相反时, 在 $\omega \sim \omega + \Delta\omega$ 之间一定有本征值, $\Delta\omega$ 越小, 精确度越高.

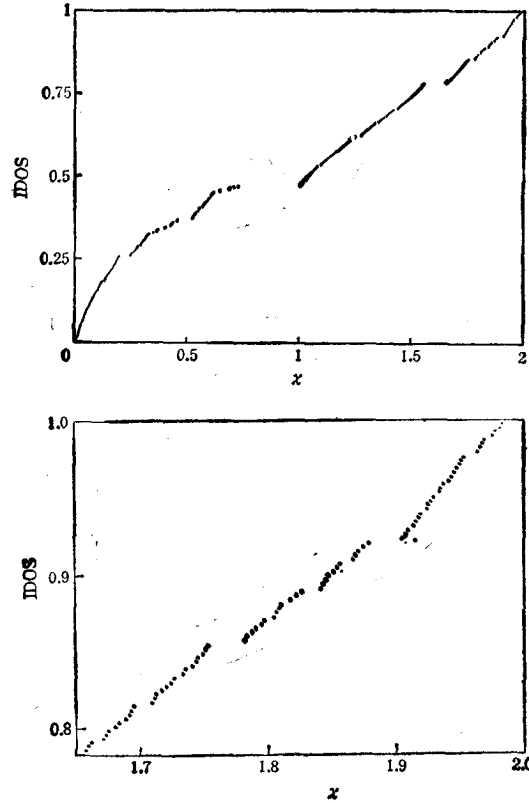


图7 (a) $GF(1,2)$ 准周期链声子谱, $N = 682$, $\lambda = 0.5$
(b) 高频段的放大图

假设原子都是相同的, 即 $m_n = m$ 对所有 n 成立. 根据原子间的长短两种距离, 弹性系数取 k_L 和 k_S 两个值, 构成图 1(a) 的广义 Fibonacci 排列. 考虑原子的最近邻组态, 发现具有 4 种可能的情况, 即 LS, SL, LL 和 SS , 相应的迁移矩阵可写成

$$SL: T_1 = \begin{pmatrix} 1 + k_L/k_S - m\omega^2/k_S & -k_L/k_S \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad (14a)$$

$$LS: T_2 = \begin{pmatrix} 1 + k_S/k_L - m\omega^2/k_L & -k_S/k_L \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad (14b)$$

$$LL: T_3 = \begin{pmatrix} 2 - m\omega^2/k_L & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad (14c)$$

$$SS: T_i = \begin{pmatrix} 2 - m\omega^2/k_s & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (14d)$$

引入标度变量 $\lambda = k_L/k_s$, $\chi = m\omega^2/k_s$, 则当 λ, χ 给定时, $T_i (i = 1, 2, 3, 4)$ 为已知, 从而可以计算出迁移矩阵乘积 Λ . 如果 $a_{11}(\chi) = 0$, 则 χ 为本征频率, 计算结果见图 7.

根据数值计算结果可知, 声子谱具有类 Cantor 集的自相似性, 特别是在高频阶段比较明显[图 7(b)]. 在极低频段 ($\chi \rightarrow 0$), $IDOS \sim \sqrt{\chi}$, 即可以写成 $IDOS(\omega^2) = C\sqrt{\omega^2}$, C 为常数. 所以在极低频段表现出周期系统的性质. $GF(1, 2)$ 链声子谱性质与 Fibonacci 链的相同.

四、结 语

本文研究 $GF(1, 2)$ 型广义 Fibonacci 准周期链电子谱和声子谱结构. 对于声子谱没有发现与 Fibonacci 链有特别差异的性质, 而对于电子谱, 这种差异则充分体现出来, 即在能谱的某些部分显示出与周期系统类似的性质. 可以认为, $GF(1, 2)$ 链是广义 Fibonacci 准周期系统中特殊的一类. Qin 等人^[10]在研究 Thue-Morse 模型中也曾得到类似的结果, 并指出它可作为周期与准周期系统的一个连接桥梁. 另一方面我们注意到, 对于 Thue-Morse 链 (1), (2) 式的比例关系对于任意 l 均成立, 这说明它与 $GF(1, 2)$ 系统有内在的联系. 也可认为, $GF(1, 2)$ 系统是介于周期与准周期系统之间的一种模型. 对于其它类型的广义 Fibonacci 链, 亦可能有同样的结果出现, 这有待于进一步的工作, 以便更深刻地揭示准周期系统的本质.

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias and J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1951.
- [2] Q. Niu and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 2057.
- [3] Y. Liu and R. Riklund, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 6034.
- [4] Y. Liu and W. Sritrakool, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 1110.
- [5] M. Kohmoto, L. P. Kadanoff and C. Tang, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1870.
- [6] J. A. Ashraff and R. B. Stinchcombe, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 5723.
- [7] J. P. Lu, T. Odagaki and J. L. Birman, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 4809.
- [8] G. Gumbs and M. K. Ali, *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988), 1081.
- [9] M. Holzer, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 1709; *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 5756.
- [10] M. Kolář and M. K. Ali, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 426.
- [11] J. Q. You, J. R. Yan, T. Xie, X. Zeng and J. X. Zhong, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**(1991), 7255.
- [12] J. X. Zhong, J. R. Yan and J. Q. You, *J. Phys. A*, **24**(1991), L949.
- [13] A. Chakrabarti and S. N. Karmakar, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 896.
- [14] Y. Liu, X. Fu, H. Han, B. Cheng and C. Luan, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 13240.
- [15] M. de Boissieu, C. Janot and J.-M. Dubois, *J. Phys.: Condens. Matter*, **2**(1990), 2499.
- [16] X. Fu, Y. Liu, B. Cheng and D. Zheng, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 10808.
- [17] 蔡建华, 量子力学, 高等教育出版社, 北京, (1980).
- [18] M. Qin, H. Ma and C. Tsai, *J. Phys.: Condens. Matter*, **2**(1990), 1059.

SPECTRAL PROPERTIES OF THE GENERALIZED FIBONACCI QUASIPERIODIC CHAINS

FU XIU-JUN GUO ZI-ZHENG ZHOU PEI-QIN

Department of Physics, Inner Mongolia Normal University, Huhhot 010022

LIU YOU-YAN

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

(Received 5 July 1991)

ABSTRACT

This paper is devoted to the study of electronic and phonon spectra of a kind of generalized Fibonacci quasiperiodic chain (Twins model). Renormalization group results show that the electronic spectrum has a trifurcating self-similar structure but the middle subbands in every hierarchy are similar to spectral structure of the periodic systems. The analysis is confirmed by numerical results. While the phonon spectrum shows the same spectral structure as that of the Fibonacci chain.

PACC: 7125M; 7170; 6320D