

# 一族一维准晶的局部电子性质\*

颜晓红 颜家壬 钟建新 游建强

湘潭大学科学技术研究所, 湘潭 411105

1991 年 9 月 25 日收到

本文利用推广的实空间重整化群方法, 研究按膨胀规则  $(A, B) \rightarrow (A^m B, A)$  构造的一族一维泛 Fibonacci 准晶系 ( $A_n$  序列) 的局部电子性质. 所引入的  $2n^2 + 1$  种基本变换可计算该族一维准晶中任一  $A_n$  序列在任意格点的局部格林函数和局部态密度. 结果表明, 该方法是有用的,  $A_n$  链的电子局部态密度象 Fibonacci 准晶一样, 呈现临界性.

PACC: 7120

## 一、引 言

自 1984 年 Shechtman 等人<sup>[1]</sup>发现准晶结构以来, 对准晶特别是一维准晶的电子和声子性质的研究已引起凝聚态物理学界极大兴趣<sup>[2-21]</sup>. Kohmoto 等人<sup>[2,3]</sup>及其他人<sup>[4-10]</sup>采用转移矩阵法及数值解方法研究了一维 Fibonacci 准晶的电子和声子性质, 发现其能谱具有康托集结构, 其波函数是临界的, 即既不延展也不局域. Gumbs 等人<sup>[11]</sup>和游建强等人<sup>[13-16]</sup>发展了 Kohmoto 等人的转移矩阵方法, 研究了按递推关系

$$S_{l+1} = S_l^m S_{l-1}^n, \quad l \geq 1 \quad (1)$$

构成的一族泛 Fibonacci 序列, 其中  $S_0 = \{B\}$ ,  $S_1 = \{A\}$ ,  $m$  和  $n$  均为正整数. 结果显示, 其能谱有类似康托集结构, 但却具有比 Fibonacci 准晶更丰富的电子和声子性质. 进一步研究表明<sup>[15,16]</sup>, 对递推关系(1)式中  $n = 1$  的一族准晶体系 ( $B_m$  序列), 其波函数存在延展态和局域态, 但对(1)式中  $m = 1$  即按递推关系

$$S_{l+1} = S_l^m S_{l-1}, \quad l \geq 1 \quad (2)$$

构造的一族一维准晶体系 ( $A_n$  序列), 其迹映象象 Fibonacci 准晶一样存在确定的守恒量, 而其电子和声子波函数也并未发现延展态或局域态, 即只存在临界态.  $A_n$  序列在结构上与 Fibonacci 准晶或  $B_m$  序列均有较大差异, 但其性质却与 Fibonacci 准晶的性质非常相似, 因而对  $A_n$  序列的局部电子性质的研究如同研究 Fibonacci 准晶或  $B_m$  序列的局部性质一样变得非常必要.

Ashraff 等人<sup>[17]</sup>及 Chakrabarti 等人<sup>[18]</sup>引进实空间重整化群方法研究一维 Fibonacci 准晶某些特殊格点即关键点的局部电子性质, 但对不同格点处的性质是否异同却难以得到. 钟建新等人<sup>[19-21]</sup>采用新的实空间重整化群方法研究一维 Fibonacci 准晶和  $B_m$  序列在任意格点处的电子和声子局部性质. 得到较好的结果. 本文推广上述实空间重整化

\* 国家自然科学基金资助的课题.

群方法, 研究按(2)式递推关系构造的  $A_n$  准晶系的电子局部性质, 求得其局部格林函数和局部态密度。

## 二、重整化群变换

为处理一维  $A_n$  准晶系的局部电子性质, 引入如下一维电子紧束缚哈密顿量:

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

其中  $|i\rangle, \varepsilon_i$  分别为格点  $i$  处的 Wannier 态和格点能,  $V_{i,j}$  为最近邻原子间的跳跃 (hopping) 参量。若  $V_{i,j}$  按递推关系(2)式分布, 其中  $S_0 = \{V_B\}$ ,  $S_1 = \{V_A\}$ , 以及  $i$  处格点的格点能分别选取如下值:

$$\varepsilon_i = \begin{cases} \varepsilon_\alpha, & \text{当 } V_{i,i+1} = V_{i-1,i} = V_A \text{ 时;} \\ \varepsilon_\beta, & \text{当 } V_{i-1,i} = V_A, V_{i,i+1} = V_B \text{ 时;} \\ \varepsilon_\gamma, & \text{当 } V_{i-1,i} = V_B, V_{i,i+1} = V_A \text{ 时,} \end{cases} \quad (4)$$

其中具有格点能  $\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\beta, \varepsilon_\gamma$  的格点分别称作  $\alpha$  格点、 $\beta$  格点和  $\gamma$  格点, 则由方程(3)知, 格林函数  $G_{i,j} = \langle i|G(Z)|j\rangle$  应满足如下关系式:

$$(Z - \varepsilon_i) = \delta_{i,i} + \sum_k V_{i,k} G_{k,i}, \quad i, j = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots, \quad (5)$$

其中  $Z = E + i0^+$ ,  $\delta_{i,j}$  为 Kronecker 符号。格点  $i$  处的局部态密度可由下式给出:

$$\rho_i(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{i,i}(E + i0^+), \quad (6)$$

其中  $\text{Im}$  表示复数的虚部。

为求解任意格点处的局部格林函数和局部态密度, 本文中引入  $2n^2 + 1$  个基本重整化变换  $T_1, T_2, \cdots, T_{2n^2+1}$ , 其中  $T_1, T_2, T_3, \cdots, T_{n^2+1}, T_{n^2+2}, \cdots, T_{2n^2+1}$  分别表示变换

$$\begin{aligned} \{(BA^n)^{n-1}BA^{n+1}, BA^n\} &\rightarrow \{A', B'\}, \\ \{(A^nB)^{n-1}A^{n+1}B, A^nB\} &\rightarrow \{A', B'\}, \\ \{(A^{n-1}BA)^{n-1}A^nBA, A^nBA\} &\rightarrow \{A', B'\}, \\ &\cdots \cdots \cdots \\ \{(ABA^{n-1})^{n-1}A^2BA^{n-1}, ABA^{n-1}\} &\rightarrow \{A', B'\}, \\ \{(BA^n)^{n-2}BA^{n+1}BA^n, BA^n\} &\rightarrow \{A', B'\}, \\ &\cdots \cdots \cdots \\ \{A^{n+1}B(A^nB)^{n-1}, A^nB\} &\rightarrow \{A', B'\}, \end{aligned}$$

而  $T_{n^2+2}, T_{n^2+3}, \cdots, T_{n^2+n+1}, T_{n^2+n+2}, \cdots, T_{2n^2+1}$  则分别表示变换

$$\begin{aligned} \{[(A^nB)^nA]^{n-1}(A^nB)^{n+1}A, (A^nB)^nA\} &\rightarrow \{A', B'\}, \\ \{[(A^{n-1}BA)^nA]^{n-1}A^{n-1}B(A^nB)^nA^2, A^{n-1}B(A^nB)^{n-1}A^2\} &\rightarrow \{A', B'\}, \\ &\cdots \cdots \cdots \\ \{[A(BA^n)^n]^{n-1}A(BA^n)^{n+1}, A(BA^n)^n\} &\rightarrow \{A', B'\}, \\ \{[(A^nB)^nA]^{n-2}(A^nB)^{n+1}A(A^nB)^nA, (A^nB)^nA\} &\rightarrow \{A', B'\}, \end{aligned}$$

.....

$\{A(BA^n)^{n+1}[A(BA^n)^n]^{n-1}, A(BA)^n\} \rightarrow \{A', B'\}$ . 序列  $A_2(n=2)$  的 9 种基本变换示于图 1 和图 2 中. 可以看出  $A_n$  序列进行上述  $2n^2 + 1$  种变换中任一重整化群变换所产生的新链仍为  $A_n$  序列, 仍按(2)式排布. 变换前  $A_n$  链上任一格点都在某一种变换所产生的新链上保留下来, 这就为我们利用上述变换求解任意格点的局部性质提供了依据. 当  $n=1$  时,  $A_1$  链(即 Fibonacci 序列)共有 3 种变换, 它们分别为  $\{BAA, BA\} \rightarrow \{A', B'\}$ ,  $\{AAB, AB\} \rightarrow \{A', B'\}$ ,  $\{ABABA, ABA\} \rightarrow \{A', B'\}$ , 与文献[19, 20]一致. 根据上述变换形式, 可得出关于各个变换的重整化群方程. 按照  $T_1$  的变换形式, 采用矩阵相乘法, 由(5)式可得  $T_1$  的重整化群方程为

$$\begin{aligned} \varepsilon'_a = \varepsilon_a + & \frac{V_B \left[ P_n Q_{n-1} U_{n-2}(x) - \frac{V_B}{V_A} W U_n(g) \right]}{P_n S - \frac{V_B}{V_A} U_n(g) P_{n-1} U_{n-2}(x)} \\ & + \frac{V_A \left[ P_{n-1} S - \frac{V_B}{V_A} P_{n-1} U_{n-1}(g) U_{n-2}(x) \right]}{P_n S - \frac{V_B}{V_A} P_{n-1} U_n(g) U_{n-2}(x)}, \end{aligned} \quad (7a)$$

$$\varepsilon'_b = \varepsilon_b + \frac{V_A \left[ P_{n-1} S - \frac{V_B}{V_A} P_{n-1} U_{n-1}(g) U_{n-2}(x) \right]}{P_n S - \frac{V_B}{V_A} P_{n-1} U_n(g) U_{n-2}(x)} + \frac{V_B^2 U_{n-1}(g)}{V_A P_{n-1}}, \quad (7b)$$

$$\varepsilon'_r = \varepsilon_r + \frac{V_B \left[ P_n Q_{n-1} U_{n-2}(x) - \frac{V_B}{V_A} W U_n(g) \right]}{P_n S - \frac{V_B}{V_A} P_{n-1} U_n(g) U_{n-2}(x)} + \frac{V_A P_{n-2}}{P_{n-1}}, \quad (7c)$$

$$V'_A = V_B / \left[ P_n S - \frac{V_B}{V_A} P_{n-1} U_n(g) U_{n-2}(x) \right], \quad V'_B = V_B / P_{n-1}, \quad (7d)$$

其中  $g = (E - \varepsilon_a)/V_A$ ,  $P_n = \frac{E - \varepsilon_r}{V_A} U_n(g) - U_{n-1}(g)$ , (8a)

$$Q_n = \frac{E - \varepsilon_b}{V_A} U_n(g) - U_{n-1}(g), \quad (8b)$$

$$R_n = \frac{E - \varepsilon_\beta}{V_B} P_n - \frac{V_A}{V_B} P_{n-1}, \quad x = R_{n-1} - \frac{V_B}{V_A} U_{n-1}(g), \quad (8c)$$

$$S = R_{n-1} U_{n-2}(x) - U_{n-3}(x), \quad W = \frac{V_B}{V_A} U_{n-1}(g) U_{n-2}(x) + U_{n-3}(x). \quad (8d)$$

按照  $T_2$  的变换形式, 可得  $T_2$  的重整化群方程为

$$\varepsilon'_a = \varepsilon_r + \frac{V_A [P_n R_{n-2} U_{n-2}(x) - P_{n-1} W]}{P_n S - \frac{V_A}{V_B} P_{n-1} U_{n-2}(x)}$$

$$+ \frac{V_B \left[ \frac{V_B}{V_A} S U_n(g) - P_{n-1} U_{n-1}(g) U_{n-2}(x) \right]}{P_n S - \frac{V_A}{V_B} P_{n-1}^2 U_{n-2}(x)}, \quad (9a)$$

$$\varepsilon_\beta = \varepsilon_\gamma + \frac{V_B \left[ \frac{V_B}{V_A} S U_n(g) - P_{n-1} U_{n-1}(g) U_{n-2}(x) \right]}{P_n S - \frac{V_A}{V_B} P_{n-1}^2 U_{n-2}(x)} + \frac{V_A P_{n-2}}{P_{n-1}}, \quad (9b)$$

$$\varepsilon'_\gamma = \varepsilon_\gamma + \frac{V_A [P_n R_{n-2} U_{n-2}(x) - P_{n-1} W]}{P_n S - \frac{V_A}{V_B} P_{n-1}^2 U_{n-2}(x)} + \frac{V_B^2 U_{n-1}(g)}{V_A P_{n-1}}, \quad (9c)$$

$$V'_A = V_B / \left[ P_n S - \frac{V_A}{V_B} P_{n-1}^2 U_{n-2}(x) \right], \quad V'_B = V_B / P_{n-1}, \quad (9d)$$

其中  $g = (E - \varepsilon_\alpha) / V_A, \quad P_n = \frac{E - \varepsilon_\beta}{V_A} U_n(g) - U_{n-1}(g), \quad (10a)$

$$R_n = \frac{E - \varepsilon_\gamma}{V_B} P_n - \frac{V_B}{V_A} U_n(g), \quad x = R_{n-1} - \frac{V_A}{V_B} P_{n-2}, \quad (10b)$$

$$S = R_{n-1} U_{n-2}(x) - U_{n-3}(x), \quad W = \frac{V_A}{V_B} P_{n-2} U_{n-2}(x) + U_{n-3}(x). \quad (10c)$$

(7)和(9)式中  $\varepsilon'_\alpha, \varepsilon'_\beta, \varepsilon'_\gamma$  分别表示经重整化变换后新生成链中  $\alpha, \beta, \gamma$  格点的格点能,  $V'_A, V'_B$  分别表示新生成链的两个跳跃参量  $V_A, V_B$ 。(7)–(10)式中,  $U_N(x) = \sin \cdot [(N+1)\cos^{-1}(x)] / \sin [\cos^{-1}(x)]$  为第二类切比雪夫多项式, 它满足递推关系

$$U_N(x) = x U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x), \quad N \geq 0, \quad (11)$$

其初始条件为  $U_{-2}(x) = -1, U_{-1}(x) = 0$ 。类似方法可以求出关于变换  $T_1, T_2, \dots, T_{2n^2+1}$  的重整化群方程。

### 三、局部电子性质

上述  $2n^2 + 1$  个基本重整化变换及其重整化群方程的应用, 使  $A_n$  序列中任意格点的局部格林函数和局部态密度的求解成为可能。分析表明, 若对一给定的  $A_n$  准晶中  $S_i$  块分别进行上述  $2n^2 + 1$  种变换, 得到  $2n^2 + 1$  种重整化序列  $S'_i$ 。这  $2n^2 + 1$  个新序列  $S'_i$  仍按(2)式排布, 但其中某一个经过变换  $T_1$  (或  $T_{n^2+1}$ ) 后产生的序列  $S'_i$  中有一个  $\beta$  (或  $\gamma$ ) 格点仍保持其周围环境不变, 称施以变换  $T_1$  后有一个  $\beta$  格点保持其周围环境不变的序列  $S_i$  为  $S_\beta$  (如图1), 而施以变换  $T_{n^2+1}$  后有一  $\gamma$  格点保持其周围环境不变的序列  $S_i$  为  $S_\gamma$  (如图2)。对  $S_\beta$  (或  $S_\gamma$ ) 序列连续进行  $T_1$  (或  $T_{n^2+1}$ ) 重整化变换, 其中某一个  $\beta$  (或  $\gamma$ ) 格点始终保持其周围环境不变, 直至最后也不被抽杀掉, 称这一  $\beta$  (或  $\gamma$ ) 格点为  $S_i$  序列的关键点 (如图1, 2中格点0)。任一  $S_i$  序列有且只有一个关键点, 而对变换  $T_1, T_2, \dots, T_{2n^2+1}$  中的一个或几个变换操作一次或几次, 则可使  $S_i$  中任一其它格点转化为关键点。对  $S_\beta$  序列, 操作上述  $2n^2 + 1$  个变换之一, 则进行  $T_1, T_2, \dots,$

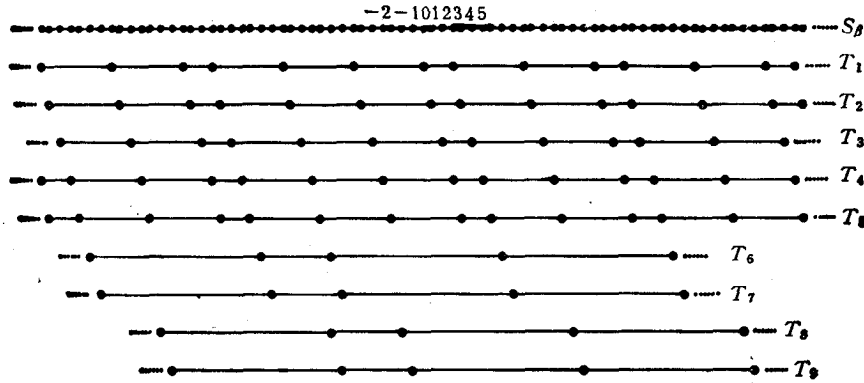


图1  $A_2$  序列  $S_\beta$  链9种基本变换. 第一链为  $S_i$  (即  $S_\beta$ ) 链, 其中0点为关键点  $\beta$  格点, 以下9条  $S'_i$  链依次为经  $T_1, T_2, \dots, T_8, T_9$  九种变换后的重整化链

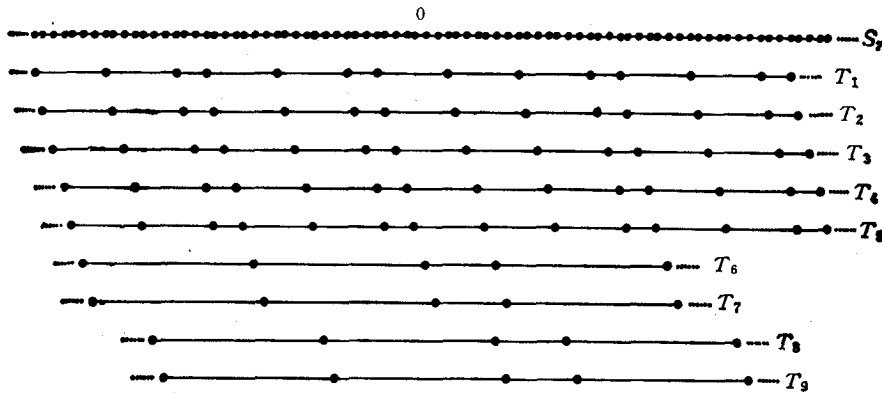


图2  $A_2$  序列  $S_\gamma$  链9种基本变换. 第一链为  $S_i$  (即  $S_\gamma$ ) 链, 其中0点为关键点  $\gamma$  格点, 以下9条  $S'_i$  链依次为经  $T_1, T_2, \dots, T_8, T_9$  九种变换后的重整化链

$T_{n^2+1}$  等变换后所得的重整化序列  $S'_i$  仍为  $S_\beta$  序列, 而每一新产生的序列  $S'_i$  中又有一个  $\beta$  格点为  $S'_i$  序列的关键点. 进行变换  $T_{n^2+2}, T_{n^2+3}, \dots, T_{2n^2+1}$  后新生成的序列  $S'_i$  则成为  $S_\gamma$  序列, 但仍按(2)式规则排布, 其中每一  $S'_i$  序列中均有一个  $\gamma$  格点成为  $S'_i$  的关键点(如图1所示). 对  $S_\gamma$  序列, 若操作  $T_1, T_2, \dots, T_{n^2+1}$  等基本变换之一, 每一新生成的序列  $S'_i$  仍为  $S_\gamma$  序列, 其中每一  $S'_i$  中均有一个  $\gamma$  格点成为  $S'_i$  的关键点, 而进行  $T_{n^2+2}, T_{n^2+3}, \dots, T_{2n^2+1}$  等变换之一的操作后所产生的新序列  $S'_i$  则均成为  $S_\beta$  序列, 其中每一  $S'_i$  序列中均有一个  $\beta$  格点成为各自新生序列  $S'_i$  的关键点. 对于其它格点, 合理地选择一些基本变换  $T_i, T_j, T_k, \dots$ , 然后逐次对  $S_i$  操作  $p$  次重整化变换  $T_i$ ,  $q$  次变换  $T_j$ ,  $r$  次变换  $T_k, \dots$ , 直到所研究的格点转化成为关键点为止. 对  $A_2$  序列, 图1中格点0为关键点, 格点1, 2, 3, 4分别经过  $T_2, T_3, T_4, T_5$  重整化变换后即可转化成关键点, 而格点5经一次  $T_3$  变换后, 接着进行一次  $T_2$  变换即转化成为关键点 $\dots$ . 至此, 可按照关键点的性质, 利用上述  $2n^2 + 1$  个基本变换的重整化群方程求出各格点的局部格林函数和局部态密度. 合理进行数次几种重整化变换, 使所研究的格点成为关键点, 然

后根据关键点是 $\beta$ 格点还是 $\gamma$ 格点, 进行多次 $T_1$  (或 $T_{n+1}$ ) 变换, 使跳跃参量 $V_B$ 和 $V_A$ 却趋于零, 从而可利用各个变换对应的重整化群方程求得所求格点最后作为关键点的格点能 $\varepsilon_\beta^*$ 或 $\varepsilon_\gamma^*$ , 由此可求得其局部格林函数

$$G_{00} = -1/(E + i0^+ - \varepsilon_\beta^*), \text{ 关键点为 } \beta \text{ 格点} \quad (12a)$$

$$\text{或} \quad G_{00} = -1/(E + i0^+ - \varepsilon_\gamma^*), \text{ 关键点为 } \gamma \text{ 格点}, \quad (12b)$$

进而利用(6)式求出所研究格点的局部态密度。

#### 四、结果与讨论

作为特例, 图 3(a)–(d) 给出 $A_2(n=2)$  链中格点 $-1, 0, 1, 2$ 关于非对角模型的局部态密度(LDOS), 其中格点的标记见图 1, 格点 0 为关键点。图 4(a) 和 (b) 分别给出 $A_2$  链关键点关于对角模型和混合模型的局部态密度。图 5(a) 和 (b) 分别给出 $A_1(n=1)$ ,  $A_3(n=3)$  链中关于非对角模型的局部态密度。结果表明, 其局部态密度呈现

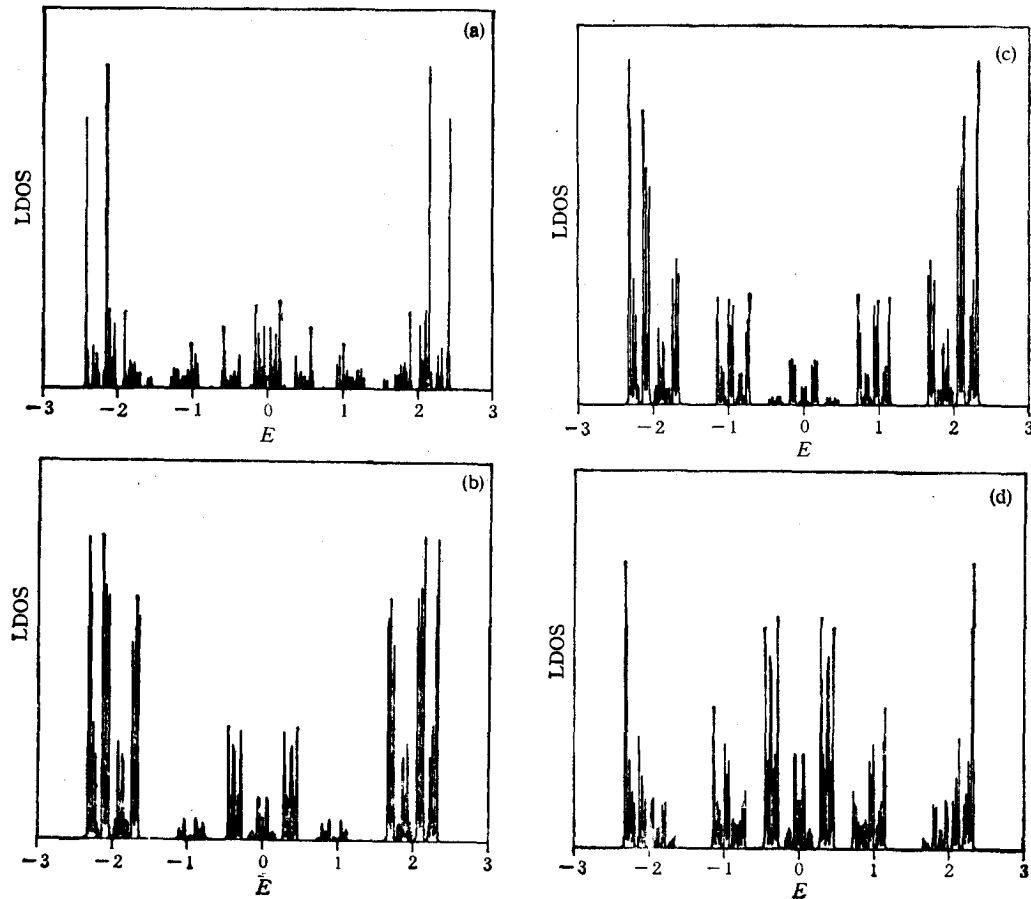


图 3  $A_2$  链中 $-1, 0, 1, 2$  各格点关于非对角模型的局部态密度 ( $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta = \varepsilon_\gamma = 0$ ,  $V_B/V_A = 1.5$ ) (a) 为格点 $-1$ 即 $\alpha$ 格点的局部态密度; (b) 为格点 $0$ 即关键点的局部态密度; (c) 为格点 $1$ 即 $\gamma$ 格点的局部态密度; (d) 为格点 $2$ 的局部态密度

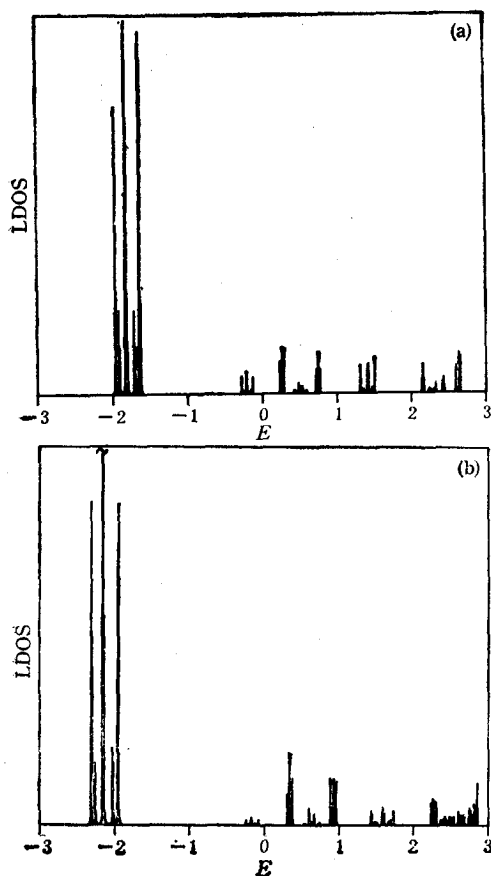


图4  $A_1$  链中关键处的局部态密度 (a) 为关于对角模型, 其中  $s_a = -s_b = s_r = 1$ ,  $V_A/V_B = 1$ ; (b) 为关于混合模型, 其中  $s_a = -s_b = s_r = 1$ ,  $V_B/V_A = 1.5$

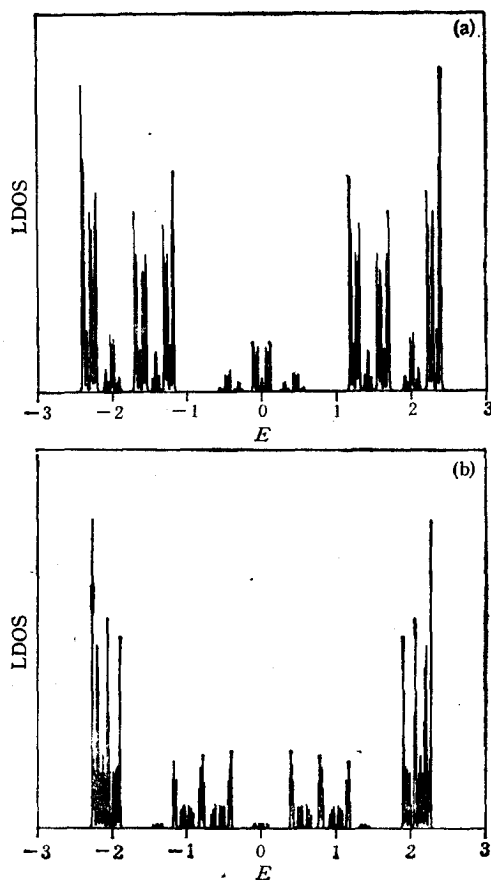


图5  $A_n$  链关键点关于非对角模型的局部态密度 ( $s_a = s_b = s_r = 0$ ,  $V_B/V_A = 1.5$ ) (a) 为  $n=1$  即 Fibonacci 序列关键点的局部态密度; (b) 为  $n=3$  即  $A_3$  链关键点的局部态密度

临界性,未发现延展态或局域态,同一序列不同格点、不同序列关键点间局部态密度性质与  $A_1$  链即 Fibonacci 准晶的局部性质相似,与采用数值解方法得到的波函数性质<sup>[15,16]</sup>相似。

对于按(1)式构成的泛 Fibonacci 准晶体系,其迹映象存在如下关系<sup>[15,16]</sup>:

$$I_{l+1} = U_{m-1}^2(x_l)I_l, \quad l \geq 2, \quad (13)$$

其中  $x_l = \frac{1}{2} \text{Tr} M_l$  为转移矩阵  $M_l$  的迹。若  $m=1$ , 则由切比雪夫多项式的性质知,  $U_0(x_l) = 1$ , 于是(13)式变为  $I_{l+1} = I_l$ , 即  $I_l$  与  $l$  无关。这表明对  $m=1$  的一族泛 Fibonacci 准晶系 ( $A_n$  准晶系),  $I_l$  为与  $l$  无关的守恒量。当  $m \neq 1$  时,  $U_{m-1}^2(x_l) \neq 1$ , 由(13)式可知,  $I_l$  与  $l$  有关。进一步研究可得, 对  $m=1$  的  $A_n$  准晶系, 其守恒量为

$$I_l = x_l^2 + x_{l-1}^2 + \left[ \frac{U_{n-2}(x_{l-1})}{U_{n-1}(x_{l-1})} x_l + \frac{1}{U_{n-1}(x_{l-1})} x_{l-2} \right]^2$$

$$- 2x_l x_{l-1} \left[ \frac{U_{n-2}(x_{l-1})}{U_{n-1}(x_{l-1})} x_l + \frac{1}{U_{n-1}(x_{l-1})} x_{l-2} \right] - 1 = I_{l-1}. \quad (14)$$

当  $n = 1$  时, 上式化为 Fibonacci 准晶的守恒量

$$I_1 = x_l^2 + x_{l-1}^2 + x_{l-2}^2 - 2x_l x_{l-1} x_{l-2} - 1. \quad (15)$$

比较(14), (15)式可以看出, 对  $A_n$  准晶系, 其守恒量与  $l$  无关, 而且在形式上与 Fibonacci 准晶的守恒量非常相似. 这已经表明  $A_n$  准晶系的电子性质与 Fibonacci 准晶的电子性质的相似性. 因而  $A_n$  准晶系象 Fibonacci 准晶一样存在临界态, 而不存在延展态或局域态, 即便其局部性质也是如此.

如上所述, 引入  $2n^2 + 1$  个基本重整化变换研究  $A_n$  准晶系的局部格林函数和局部态密度的方法是行之有效的. 对任一  $A_n$  序列分别进行  $T_1$  和  $T_{n^2+1}$  的重整化变换, 可以得出该  $A_n$  序列是  $S_p$  链还是  $S_r$  链并找到其关键点. 合理选取上述  $2n^2 + 1$  种变换施于  $A_n$  链, 可以使任何所研究的格点重整为关键点, 从而利用关键点的性质可以求出所研究格点的局部格林函数和局部态密度. 由于每进行一次变换就要抽杀相当部分格点, 而且当所研究格点转化为关键点后, 所有操作只是重复  $T_1$  (或  $T_{n^2+1}$ ) 重整化变换. 因而采用实空间重整化群方法研究  $A_n$  准晶系的局部电子性质, 可以研究任意大的  $A_n$  准周期系统. 本文讨论局部态密度, 进行 20 次变换, 对  $A_2$  准周期系统实际上已超过十亿格点, 这么多格点排成一维链无疑可看成宏观准晶体. 这比起用迹映象方法讨论仅含近千个原子(格点)的准周期系统的电子性质而言, 前者结论应更具有意义. 本文对部分  $A_n$  链的关键点和  $A_2$  链部分格点的电子局部态密度的计算结果表明,  $A_n$  准晶系的局部电子性质象 Fibonacci 准晶的局部性质一样, 呈现临界性. 这同采用转移矩阵方法得到的结论是一致的.

- [1] D. Shechtman, 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] M. Kohmoto, and J. R. Banavar, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 563;  
M. Kohmoto, B. Sutherland and C. Tang, *ibid.*, **B35**(1987), 1020.
- [4] J. M. Luck and D. Petritis, *J. Stat. Phys.*, **42**(1986), 289.
- [5] Q. Niu (牛谦) and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 2057.
- [6] J. P. Lu, T. Odagaki and J. L. Birman, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 4809.
- [7] Youyan Liu (刘有延) and R. Riklund, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 6034;  
Youyan Liu and W. Strirakool, *ibid.*, **B43**(1991), 1110.
- [8] Chang-de Gong (龚昌德), Dingyu Xing (邢定钰), A. Holz and Jinzhong Pang, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 5517; Bi Chen and Chang-de Gong, *Z. Phys.*, **B69**(1987), 103.
- [9] Hong-ru Ma (马洪儒) and Chien-hua Tsai (蔡建华), *J. Phys.*, **C21**(1988), 4311; W. M. Zheng, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 1457.
- [10] Wenlan Xu (徐文兰) and Zhaobo Zheng (郑兆勃), *J. Phys.*, **1**(1989), 9533; 徐文兰, 物理学报, **40**(1991), 1080.
- [11] G. Gumbs and M. K. Ali, *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988), 1081; *J. Phys.*, **A21**(1988), L517; *ibid.*, **A22**(1989), 951; M. Kolar and M. K. Ali, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 426; *ibid.*, **B39**(1989), 6538.
- [12] F. Wijnands, *J. Phys. A*, **22**(1989), 3267.
- [13] J. Q. You (游建强) and Q. B. Yang (杨奇斌) *J. Phys.: Condens. Matter*, **2**(1990), 2093; *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 7073; J. Q. You, Q. B. Yang and J. R. Yan (颜家壬), *ibid.*, **B41**(1990), 7491; J. Q. You, J. R. Yan and Q. B. Yang, *Z. Phys.*, **B30**(1990), 119.
- [14] 颜晓红, 颜家壬, 游建强, 钟建新, 湘潭大学自然科学学报, **12**(4)(1990), 37; 颜晓红, *ibid.*, **13**(2)(1991), 63.
- [15] M. Kolar and M. K. Ali, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 7108.

- [16] J. Q. You, J. R. Yan, Tiansheng Xie (谢天生), Xiaobiao Zeng (曾晓彪) and J. X. Zhong (钟建新), *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**(1991), 7255.
- [17] J. A. Ashraff and R. B. Stinchcombe, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 572.
- [18] A. Chakrabarti, S. N. Karmakar and R. K. Moitra, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 9730.
- [19] J. X. Zhong, J. Q. You, J. R. Yan and X. H. Yan (颜晓红), *Quasicrystals*, World Scientific Publishing Co., Singapore (1991), p. 309.
- [20] J. X. Zhong, J. Q. You, J. R. Yan and X. H. Yan, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 13778.
- [21] J. X. Zhong, J. R. Yan and J. Q. You, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**(1991), 6293; J. X. Zhong, J. R. Yan, X. H. Yan and J. Q. You, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**(1991), 5685.

## LOCAL ELECTRONIC PROPERTIES OF A CLASS OF ONE-DIMENSIONAL QUASICRYSTALS

YAN XIAO-HONG   YAN JIA-REN   ZHONG JIAN-XIN   YOU JIAN-QIANG

*Laboratory of Modern Physics, Institute of Science and Technology, Xiangtan University, Xiangtan 411105*

(Received 25 September 1991)

### ABSTRACT

Using the extended real-space renormalization-group approach, we study the local electronic properties of a class of one-dimensional quasicrystals (the generalized Fibonacci chains) in the framework of tight-binding model. These quasiperiodic systems are termed the  $A_n$  chains, which are associated with the sequences generated by the inflation rule  $(A, B) \rightarrow (A^2B, A)$ . We introduce  $2n^2+1$  transformations for calculating the local electronic Green's function and the local electronic density of state at any site in any one of  $A_n$  chains for the diagonal, offdiagonal and combined models. It is shown that this approach is effective and the local electronic density of states is critical, just as that of Fibonacci quasicrystal.

**PACC:** 7120