

Ni-Cr 非中心对称准晶的电子性质*

杨湘波

广东工学院基础部物理教研室, 广州 510090;

华南理工大学物理系, 广州 510641

刘有延

华南理工大学物理系, 广州 510641

1993年4月12日收到

在单电子、紧束缚和最近邻相互作用条件下, 本文利用迁移模型分析和计算了单种原子、单键长的二维十二次准晶的电子性质, 包括电子能谱、积分态密度和判断电子波函数局域性的一阶矩、二阶矩、反参加比等参数。我们发现电子能谱没有正常简并, 只有偶然简并, 以及电子只有中间态, 没有扩展态和局域态。

PACC: 7125C; 6150E

一、引言

自从1984年底, 由 Schechtman 等人在急冷的 Al-Mn 合金实验^[1]中发现了准晶体以后, 传统的认为固体物质只能有晶体或非晶体的存在方式的观点就被打破了。随后, 人们先后分别发现了八次、十次、十二次二维准晶结构。与此同时, 一维 Fibonacci 准晶格和二维 Penrose 准晶的电子性质被广泛地进行研究^[2-14]。但是, 据我们所知, 二维十二次准晶的电子性质还很少被研究^[15-19]。

Ishimasa 等人^[15]在1985年报道了 Ni-Cr 合金的电子衍射图样显示出十二次对称性, 而不具有平移对称性。他们指出 Ni-Cr 合金的高分辨率图样可用互相关连的等边十二边形模型来予以解释。但是, 他们并没有研究每个十二边形中原子的排列方式和这些十二边形的连接方式。杨奇斌等人^[16]利用高维投影法生成二维十二次准晶格, 通过这种模型计算出的电子衍射斑点和 Ishimasa 实验符合得很好。图1是我们利用杨奇斌等人的方法得到的二维十二次准晶点阵。

图1(a)是十二次准晶的准元胞, 也是该准晶的第一代点阵。这个准元胞有十二个顶点, 中心有六点, 共由三个正方形、八个等边三角形和二个等边不等角六边形组成, 这些结构可从 Ishimasa^[15]做的 Ni-Cr 合金电子衍射实验观察到。由于本文主要研究该准晶格的电子性质, 就不再详细讨论 Ni-Cr 原子的排列。

在研究该准晶的电子性质以前, 我们先回顾一下有关二维 Penrose 准晶格的一些重要结论。众所周知, 二维 Penrose 准晶格中存在着两种基元: 胖菱形和瘦菱形; 或者称

* 国家自然科学基金资助的课题。

之为 kite (风筝)和 dart (标枪)的另两种基元,这两种构造方式可由一种相似变换互相变化。由于准晶结构介乎晶体和非晶体之间,因此,人们预料其基本物理性质将很特别。

Choy^[7] 首先研究了这种由胖、瘦菱形组成的二维 Penrose 准晶格的电子性质,计算了电子的态密度 (DOS)。 Odagaki 和 Nguyen^[8] 首先数值地研究了由 kite 和 dart 组成的二维 Penrose 准晶格的紧束缚电子结构,他们研究的模型叫顶角模型,原子轨道局域在顶角处。 Kohmoto 和 Sutherland^[9] 首先研究了把胖菱形和瘦菱形作为基元的二维 Penrose 拼砌的顶角模型。在单电子、紧束缚模型中,哈密顿矩阵元可写为

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

在该式中, $|i\rangle$ 表示第 i 个 Wannier 态, t_{ij} 是跃迁矩阵元, Z_i 是座能量,取 0。 Kohmoto 和 Sutherland^[9] 假定沿着菱形边跃迁的两个态间的所有 t_{ij} 都是相同的,取 -1,

而没有相连的两个态间的 t_{ij} 为 0。 即: 电子只能沿着菱形的边发生跃迁,即使瘦菱形有一个对角距离最短,电子也不沿着该对角线发生跃迁。 这种模型称为简化顶角模型 (SVM: the Simplif-ied Vertex Model)。 这种简化模型的优点在于,我们只需考虑准晶格的局域结构,而不由于多种跃迁矩阵元的存在而使问题复杂化,从而得到一些定性结论。在电子态的局域性方面,他们找出了无穷简并的 $E = 0$ 的态密度和两种零能级的环形有限态^[9]。人们接着发现了 SVM 的另一些结果^[10-14]。最近, Aria 等人^[11]详细地讨论了这些有限态,证明了无穷简并的 $E = 0$ 的所有态都是严格局域的。由于不可能得到整个能谱的局域性的精确解,马鹏辉和刘有延^[12]对于该问题给出了详细的数值解。他们发现,电子能谱中有三种波函数共存,即扩展态、局域态和中间态。对于十二次准晶这种新的二维准晶系统,其电子态局域性是否有所不同呢? 这是本文所着重研究的问题。

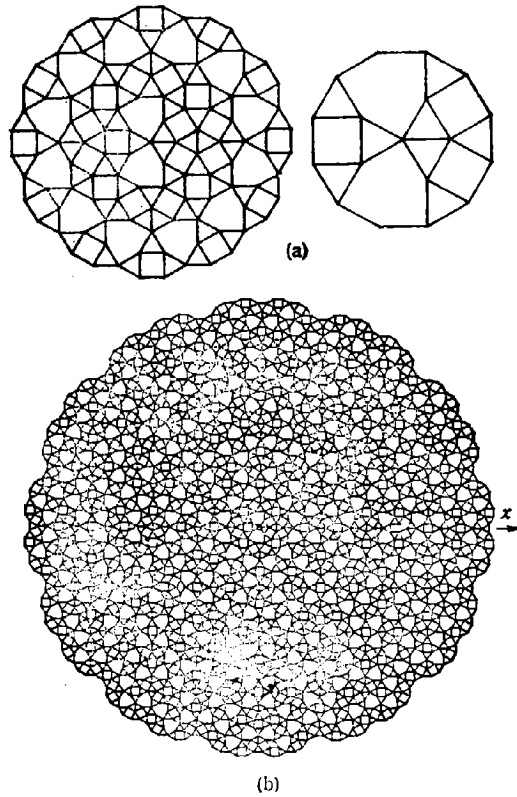


图1 二维十二次准晶格
(a) 准原胞和第二代准晶格
(b) 本文中计算的第四代包含 906 点的准晶格

二、十二次准晶格能谱和简并度

图 1 显示了由 Ishimasa 等人从 Ni-Cr 合金拍摄的二维十二次准晶点阵。与二维 Penrose 准晶格相比,它具有自己的特性:(1) 它既无平移对称性,也无中心旋转对称性和镜像对称性;而 Penrose 准晶有中心旋转五次对称性。(2) 它不能单靠简单的对准元胞的平移操作而无交迭就填满空间。(3) 它的元胞由等边十二边形构成,这个边长即格点间最近邻距离;而 Penrose 准晶的边长就不是最近邻距离,所以, Penrose 准晶采用顶角模型计算是不太合理的^[10]。可以预料,由于十二次准晶格的特殊局域结构,因此其电子性质将不同。

令整个准晶格系统具有 N 个原子,如果把中心 18 个点的哈密顿写成一个 18×18 阶的方阵 A_0 ;把剩下的 $N - 18$ 个原子分成对称的 12 块,并且每一块格点以相同的顺序编号,则这 12 个哈密顿都可写成 $(N - 18)/12 \times (N - 18)/12$ 阶方阵 A ;相邻两分块间的跳跃矩阵为 h ,它是 $(N - 18)/12 \times (N - 18)/12$ 阶实方阵; h 的转置矩阵为 h^T ;中心块和周围每一块间的跳跃矩阵为 b ,它是 $18 \times (N - 18)/12$ 阶实矩阵; b 的转置矩阵为 b^T 。则整个哈密顿矩阵可写为

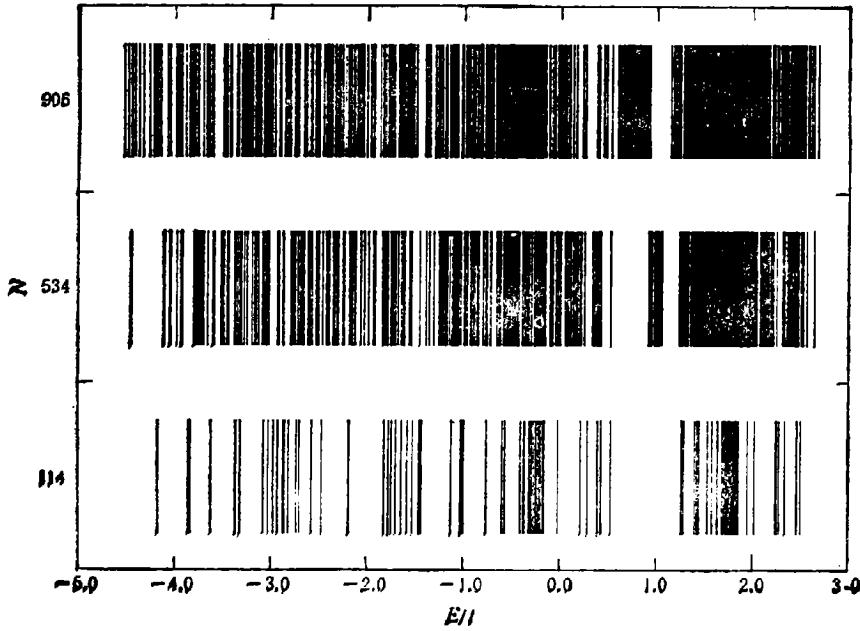


图 2 十二次准晶格第二、三、四代(只有 906 点)的能谱

$$H = \begin{pmatrix} A_0 & b & \dots & & & & b \\ b^T & A & h & & & & h^T \\ \cdot & h^T & A & h & & & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & 0 & & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & & & & h^T & A & h \\ b^T & h & & & h^T & A & \cdot \end{pmatrix} \quad (2)$$

由于该系统没有中心旋转对称性,也没有镜像反演对称性,所以,其哈密顿矩阵不能分块对角化,其能谱没有正常简并,只有偶然简并^[4].图2是以代数(原子数)为纵轴、以本征能量为横轴的图.图2中分别给出了第二代 $N = 114$ 点、第三代 $N = 534$ 点、第四代中心部分 $N = 906$ 点的三种有限系统的电子能谱.这个大型计算是在“银河”巨型计算机上完成的.

图3画出了 $N = 906$ 点系统的能谱积分态密度 (IDOS). 图中的 IDOS 没有竖直的跳跃,可见,该系统的电子谱确实没有正常简并.它说明,二维十二次准晶和二维 Penrose 准晶不同,由于前者没有特殊的局域结构,因此,它不具有相应的简并态.值得强调的是:这个结论只决定于该准晶的拓扑结构,而与所计算的系统大小无关.这是二维十二次准晶和二维 Penrose 准晶电子态局域性的主要区别之一.关于这一点,在第三节我们还要谈到.

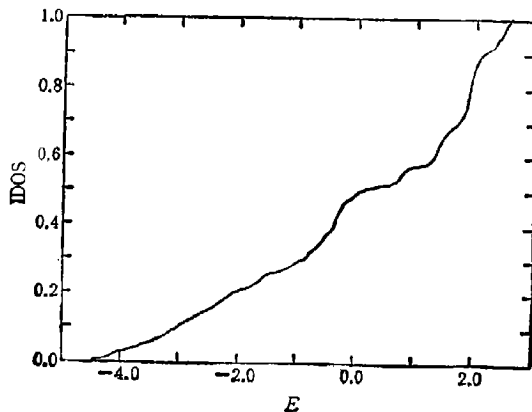


图3 第四代906点系统的已归一化积分态密度图. 可见无显示高简并度态的跳跃点

这个结论只决定于该准晶的拓扑结构,而与所计算的系统大小无关.这是二维十二次准晶和二维 Penrose 准晶电子态局域性的主要区别之一.关于这一点,在第三节我们还要谈到.

三、电子态的局域性

电子态的局域性是描述固体电子性质的一个重要方面. 在晶体中,所有的电子态都是扩展的,它们的可能出现范围是整个晶体区域,晶体的金属性(离子性)越强,它的电子态的延展性越典型;而对于非晶体而言,则恰好相反,一维的“非晶态链”无论无序度多么小,其所有电子态都是局域态,二维的非晶体,在只考虑对角无序时,系统的电子态也是局域的,非金属的金属性(离子性)越差,它的电子局域性越典型.对于准晶体而言,结论就复杂得多.对于一维的 Fibonacci 准晶链,有一种普遍的看法:由于准晶的周期性介于晶体和非晶体之间,因此,其波函数将既不是局域态也不是扩展态^[2-6].对于二维 Penrose 准晶,其电子态局域性将不同. Kohmoto 和 Sutherland^[9] 已经展示了其局域态和边界态的存在. Tokihiro 等人^[11]也证明了:某些具有特定能量值的态是扩展的,而某一些是局域的. 由于不可能对整个能谱范围的电子态局域性得到精确解. 马鹏辉和刘有

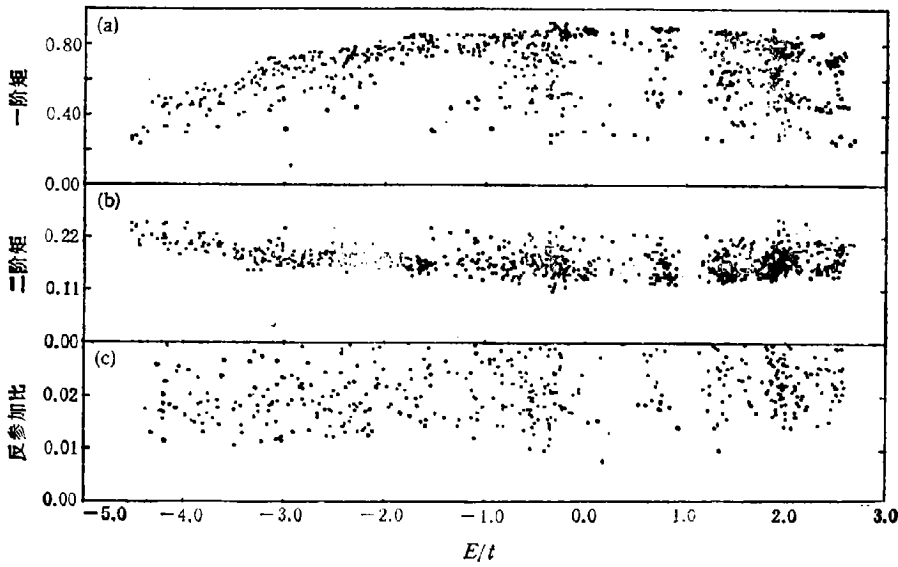


图4 第四代 906 点的广义一阶矩、二阶矩、反参加比图
 (a) 波函数的平均半径值 (b) GSM 在 0.11—0.26 之间, 即所有态都是中间态 (c) IPR 也表明所有态为中间态

延^[12-14]对此问题给出了一个详细的数值解,他们观察到了高简并的 $E = 0$ 态的存在,并且在整个能谱范围内展示了三种态即扩展态、局域态和中间态共同存在的情形。

为了探讨二维十二次准晶电子态局域性,我们利用巨型机“银河”计算了该准晶第四代的中心准圆区域内 $N = 906$ 个原子的系统。我们计算了它的本征值、本征向量、广义一阶矩 (GFM), 广义二阶矩 (GSM) 和反参加比 (IPR) 等参数,以此来确定电子态的局域性质。

由于系统是“准圆形”的,并且除了中心六点外,系统还具有中心旋转对称性;所以,我们选择被研究的第 i 个原子到中心的距离 r_i 为位置坐标参量。

在紧束缚模型中,第 i 个归一化的波函数可表示为

$$|\Psi_i\rangle = \sum_j a_{ij} |j\rangle. \quad (3)$$

这里波函数中的 a_{ij} 是离中心距离为 r_j 的第 j 个原子的振幅。广义一阶矩 (GFM) 可以被定义为

$$F_i = \langle r \rangle = \sum_{j=1}^N r_j |a_{ij}|^2. \quad (4)$$

第 i 个态的广义二阶矩 (GSM) 给出波函数的有效宽度,它被定义如下:

$$S_i = \left[\sum_{j=1}^N r_j^2 |a_{ij}|^2 - \left(\sum_{j=1}^N r_j |a_{ij}|^2 \right)^2 \right]^{1/2}$$

$$- \left[\sum_{j=1}^N r_j^2 |a_{ij}|^2 - P_j \right]^{1/2}. \quad (5)$$

反参加比可定义为

$$P_i = \sum_{j=1}^N |a_{ij}|^4. \quad (6)$$

GFM, IPR 和 GSM 从不同的方面来检验波函数的局域性。广义一阶矩 (GFM) 给出波函数的平均半径。IPR 给出电子波函数中振幅不为零的原子数目的倒数。IPR 越小, 该电子态就越扩展, 对于具有 N 个原子的系统, 扩展态的 IPR 数值趋于 $1/N$; 但对于具有 $N = 1000$ 个原子的系统而言, 局域态的 IPR 具有 $0.1-0.01$ 的数量级。中间态的 IPR 数值介乎二者之间, 中间态和另外两种态的区别在于, 这种态的波函数以大幅度的涨落为特征, 在有些区域的振幅几乎衰减到零, 在有些区域又增加到很大, 然后又衰减、再增大, 如此交替变化。GSM 给出波函数的有效“宽度”, 它表达了波函数在径向分布的扩展程度。在一维无限深势阱中的束缚态, 我们很容易证明其二阶矩等于 0.28 , 这个特征数值也是扩展态与其它态区分的判据^[12]。对于准圆形的具有刚性边界条件的 Penrose 准晶格, 马鹏辉和刘有延^[12]计算了圆形无限深势阱的头十个束缚态, 发现其平均二阶矩也等于 0.28 。对于本文所研究的二维十二次准晶, 我们也把 0.28 作为一个特征判据予以接受。即当某个态的 GSM 大于 0.28 时就可认为扩展态。显然, 局域态的 GSM 是一个远小于 0.1 的数, 这表明其波函数的出现范围很小。被确定为中间态的是那些 GSM 在 $0.1-0.28$ 之间的那些波函数。

图 4 显示了 $N = 906$ 个原子的二维十二次准晶的数值结果。在图 4(a) 中, 我们以

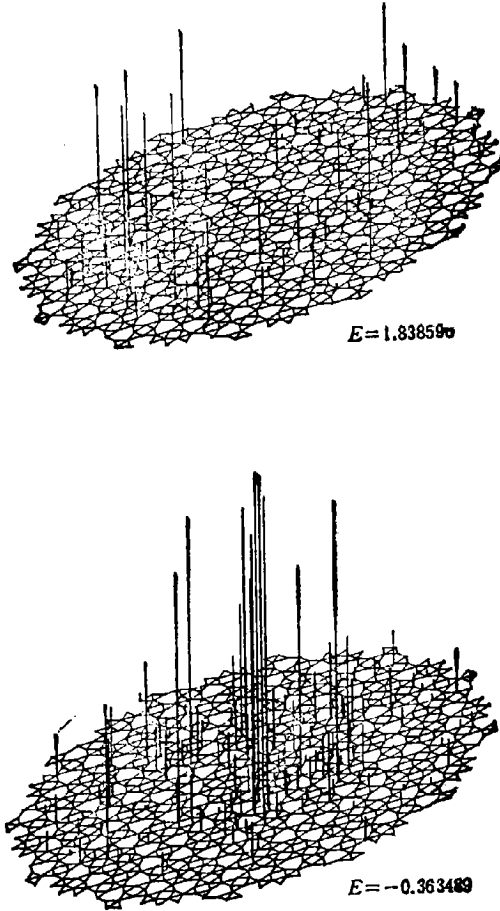


图 5 $N = 906$ 点的十二次准晶有限系统对应于两个不同能量值的波函数分布图。它们都是典型的中间态, 特征是函数振幅起伏很大

GFM (平均半径 $\langle r \rangle_i$) 与本征能量为纵、横坐标轴, 由该图可以看出: 波函数的平均半径变化范围较大, 从 0.2—0.92, 但是主要在 0.4—0.9 之间。在图 4 (b) 我们有趣地发现: 广义二阶矩 (GSM) 变化范围是 0.11—0.26, 没有任何大于 0.28 或者小于 0.1 的 GSM。这就表明: 不存在扩展态和局域态, 所有的态都是中间态。图 4 (c) 是 IPR 与本征值的图, 从图中可以得出同样的结论。图 5 所示的是中间态, 其波函数的振幅急剧起伏。由二维十二次准晶格不具有对称性, 故其波函数的空间分布也不显示出任何对称性。这些性质与 Penrose 准晶格不同。

准晶体是介乎周期晶体和无序晶体之间的一种结构形态。在单电子、紧束缚近似下, 它的波函数里有扩展态、局域态和局间态三种态, 居间态(或临界态)的存在是准晶体的特点。对于一维 Fibonacci 准晶所有态均是据间的, 而二维 Penrose 准晶则上述三种态都存在, 其原因在于它的结构中存在一种 confined state。导致局域态的存在, 在某些能量值又存在扩展的连接性结构导致扩展态的存在。但在本文所研究的二维十二次准晶中, 没有发现上述两种结构的存在, 因此, 所有的态均是居间态, 如同一维 Fibonacci 准晶一样, 这正反映出这种准晶的特点。

四、小 结

利用紧束缚最近邻相互作用的顶角模型, 我们研究了二维十二次准晶的电子性质。由于该系统不具有旋转对称性, 因此, 其哈密顿不能象 Penrose 准晶一样予以分块对角化, 系统无正常简并, 其电子性质的研究就需要大容量计算机。我们只计算了 $N = 906$ 个原子的有限系统。结果表明: 能谱中不存在高简并度的电子态。在讨论电子态的局域性时, 我们计算了广义一阶矩、二阶矩, 反参加比, 波函数的空间分布等。所有的判据都证实: 该系统所有的态都是中间态和二维 Penrose 准晶格不同。这主要是因为电子态的局域性取决于准晶格系统的局域结构。

- [1] D. S. 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; M. Kohmoto and J. R. Banavar, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 563; M. Kohmoto, B. Sutherland, and Chao Tang, *Phys. Rev.*, **B35** (1987), 1020.
- [3] F. Nori and J. P. Rodriguez, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 2207.
- [4] G. Niu and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.*, **57** (1986), 2057.
- [5] J. P. Lu, T. Odagaki, and J. L. Birman, *Phys. Rev.*, **B33** (1986), 4809.
- [6] Youyan Liu (刘有延) and R. Riklund, *Phys. Rev.*, **B35** (1987), 6034.
- [7] T. C. Choy, *Phys. Rev. Lett.*, **55** (1985), 2915.
- [8] T. Odagaki and D. Nguyen, *Phys. Rev.*, **B33** (1986), 2184.
- [9] M. Kohmoto and B. Sutherland, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 3894; *Phys. Rev. Lett.*, **56** (1986), 2740.
- [10] T. Fujiwara, M. Arai, T. Tokihiro and Dohmoto, *Phys. Rev.*, **B37** (1988), 2797.
- [11] M. Arai, T. Tokihiro and T. Fujiwara, *Phys. Rev.*, **B38** (1988), 1621; T. Tokihiro, T. Fujiwara and M. Arai, *Phys. Rev.*, **B38** (1988), 5981.
- [12] Penghui Ma (马鹏辉) and Youyan Liu (刘有延), *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 9904.
- [13] Penghui Ma (马鹏辉) and Youyan Liu (刘有延), *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 10658.
- [14] Penghui Ma (马鹏辉) and Youyan Liu (刘有延), *Phys. Rev.*, **B43** (1991), 1378.
- [15] T. Ishimasa, H. U. Nissen and Y. Fukunp, *Phys. Rev. Lett.*, **55** (1986), 511.
- [16] Q. B. Yang (杨奇斌) and W. D. Wei, *Phys. Rev. Lett.*, **58** (1987), 1020.

- [17] N. Niizeki and H. Mitani, *J. Phys. A*, **20** (1987), L405.
[18] P. W. Leung, Christopher L. Henley and G. V. Chester, *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 446.
[19] Joshua E. S. Socolar, *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 10519.

ELECTRONIC PROPERTIES OF Ni-Cr QUASILATTICE WITHOUT CENTRAL ROTATIONAL SYMMETRY

YANG XIANG-BO

*Physics group, Guangdong Institute of Technology, Guangzhou 510090;
Department of Physics, South China University of Technology,
Guangzhou 510641*

LIU YOU-YAN

*Department of Physics, South China University of Technology, Guangzhou 510641
(Received 12 April 1993)*

ABSTRACT

In the framework of the single-electron tight-binding Hamiltonian, we numerically calculate the electronic spectrum, integrated density of states, and investigate the localization of the electronic states by the use of the generalized first moment, generalized second moment, and the inverse participation ratio. It is found that there is no normal degenerate states, and only accidentally degenerate states. Furthermore, all of the states are intermediate ones, there is not any extended state or localized state.

PACC: 7125C; 6150E