

ВЛИЯНИЕ ФАЗОНОВ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ТРЕХМЕРНОГО КВАЗИКРИСТАЛЛА

Ю.Х.Векилов¹⁾, П.В.Слободянюк, Э.И.Исаев, С.Ф.Арсланов

Московский государственный институт стали и сплавов

117936 Москва, Россия

Поступила в редакцию 31 марта 1999 г.

В приближении сильной связи исследуется влияние фазонов и магнитного поля на электронный спектр икосаэдрического квазикристалла. Фазоны приводят к сглаживанию сингулярного спектра и к большей делокализации критических волновых функций. Магнитное поле смещает границы спектра, сглаживает его, снимает вырождение и также делокализует волновые функции.

PACS: 61.44.-n

Измерения проводимости чистых совершенных квазикристаллов AlPdRe показали наличие порога подвижности и выполнение при низких температурах закона Мотта $\sigma = \sigma_0 / \exp(-T^*/T)^{1/4}$ [1, 2]. Это говорит о том, что в “идеальном” совершенном квазикристалле электронные состояния на уровне Ферми локализованы в режиме ферми-стекла (плотность состояний на уровне Ферми ненулевая и уровень Ферми лежит ниже порога подвижности). Данная локализация отличается от андерсоновской, обусловленной беспорядком в системе, и вызвана интерференцией электронных состояний вследствие особенностей симметрии и структуры квазикристалла [3]. На особенности такой локализации указывают результаты теоретического анализа электронных спектров. В одномерном квазикристалле (цепочка Фибоначчи) плотность состояний сильно сингулярна (канторово множество щелей) и мера разрешенных состояний (мера Лебега) равна нулю [4, 5]. В двумерном (паркет Пенроуза) [6] и трехмерном (сеть Аммана–Маккея) [7] квазикристаллах спектр также сингулярен, но не содержит иерархической щелевой структуры (ненулевая мера Лебега). Волновые функции являются “критическими”, то есть не локализованными, не делокализированными, и убывающими с расстоянием по степенному закону. В отличие от одно- и двумерного случаев, показатель степени – показатель локализации для трехмерного квазикристалла одинаков для всех состояний. В случае андерсоновской локализации, обусловленной некогерентным рассеянием на беспорядке, внесенном в систему, электронные состояния локализованы, их спектр непрерывный и локализация стабильна относительно малых возмущений (порог подвижности непрерывно смещается с внешним возмущением). В отличие от андерсоновской, локализация электронных состояний в квазикристалле должна быть нестабильна относительно малых возмущений, нарушающих симметрию системы. В связи с этим возникает интересная задача исследования влияния собственных дефектов – фазонов и внешних полей (магнитное поле) на электронный спектр квазикристалла. Представляет также интерес сопоставить “конкурирующее” влияние андерсоновской локализации (влияние сильного беспорядка замещения в квазикристаллическом сплаве уже исследовалось в [7]). Ниже изложены основные результаты исследования влияния фазонных

¹⁾ e-mail: vekilov@trf.misa.ac.ru

искажений и магнитного поля на электронный спектр трехмерного икосаэдрического квазикристалла.

Как и в работе [7], электронный спектр и волновые функции икосаэдрического квазикристалла исследовались в приближении сильной связи и методом статистики уровней в рамках двухфрагментарной структурной модели (сеть Аммана – Маккея). Квазикристалл рассматривался как структурный предел рациональных аппроксимант с возрастающим периодом (подробно методика расчета и построения структуры с применением проекционной техники описана в [7]). Рассматривалась “центровая” декорация аппроксимант – атомы с одной s орбиталью на атом. Атомы помещались в центры ромбоэдров. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_i |i\rangle \epsilon_i \langle i| + \sum_{j, j \neq i} |i\rangle t_{ij} \langle j|.$$

При наличии в системе только атомов одного сорта диагональные элементы E_i можно положить равными нулю, а интегралы перескока считать не равной нулю константой только для ближайших соседей ($t_{ij} = -1$) – для атомов, принадлежащих ромбоэдрам, имеющим общую грань.

Фазоны вводились следующим образом. При центральной декорации ромбоэдров часто встречается конфигурация, состоящая из двух “тупых” и двух “острых” ромбоэдров. В определенном сочетании эти ромбоэдры образуют ромбический додекаэдр. Фазоны вводятся перебросом составляющих ромбический додекаэдр ромбоэдров. Ромбоэдры перебрасывались таким образом, чтобы поверхность ромбододекаэдра оставалась неизменной и сохранялась пространственная ориентация перебрасываемых ромбоэдров. При таких перебросах атомы в центрах ромбоэдров переходили в положения, симметричные относительно геометрического центра ромбододекаэдра (число ближайших соседей при этом не изменялось). Аналогом такого преобразования в проекционной технике является флуктуация трубы проецирования. Отношение количества “острых” ромбоэдров к количеству “тупых” ромбоэдров остается неизменным, и средний наклон трубы проецирования не изменяется, соответственно объем проекции трубы проецирования на нефизическое подпространство постоянен. При введении фазонов для атомов в центрах ромбоэдров менялось координационное окружение, в результате чего изменялись позиции ненулевых элементов матрицы гамильтониана. Магнитное поле обычным путем вводилось умножением матричных элементов матрицы гамильтониана на фазовый множитель, содержащий векторный потенциал в калибровке Ландау. Величина поля измерялась отношением магнитного потока через ячейку к кванту потока.

Расчеты проводились для аппроксимант $2/1$, $3/2$. Был рассчитан ряд характеристик, включая интегральную плотность состояний, плотность состояний, меру Лебега спектра, координатную зависимость волновых функций, показатели локализации. Из перечисленных характеристик в данном сообщении приведем только информацию о плотности состояний и локализации волновых функций.

Результаты расчетов показывают, что с введением фазонов спектр (см. рисунок) становится менее сингулярным, а волновые функции более делокализованными (менее “критичными”). Магнитное поле влияет на спектр квазикристалла более сложным образом. Это будет подробно обсуждено в отдельной статье. Здесь ограничимся лишь качественным обсуждением результатов. Магнитное поле сни-

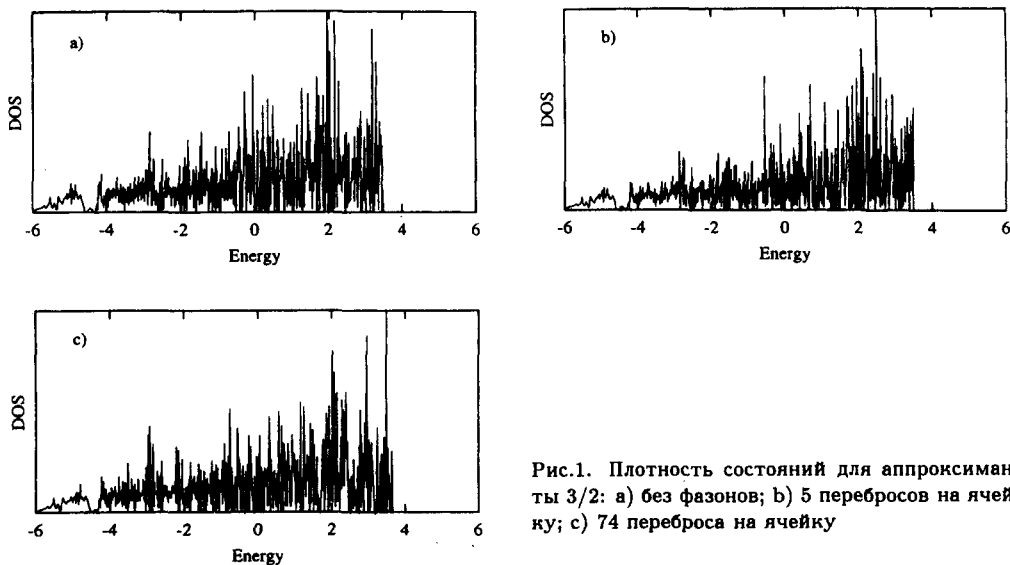


Рис.1. Плотность состояний для аппроксиманты 3/2: а) без фазонов; б) 5 перебросов на ячейку; с) 74 переброса на ячейку

мает вырождение электронных уровней, размывает спектр и смещает (квазипериодически в зависимости от величины поля) границы спектра. Волновые функции (в отличие от обычных кристаллических и аморфных структур) при включении магнитного поля становятся более делокализованными.

Интересно сравнить приведенные выше результаты с влиянием на спектр “химического” беспорядка (беспорядок замещения). В работе [7] было установлено, что при большой степени беспорядка замещения $-\delta = \epsilon_A - \epsilon_B$ ($\epsilon_i = \epsilon_A, \epsilon_B$) – энергетический спектр существенно сглаживается по сравнению с квазикристаллом без беспорядка, а волновые функции имеют тенденцию к локализации. Здесь показано, что при $\delta < 0.1$ (то есть, очевидно, ниже порога андерсоновской локализации) волновые функции становятся более делокализованными по сравнению с таковыми в совершенном квазикристалле.

Таким образом, можно считать установленным, что электронные состояния на уровне Ферми локализованы в силу когерентной интерференции, обусловленной особенностями симметрии и структуры квазикристалла. Малые возмущения – фазоны, магнитное поле, слабый химический беспорядок нарушают эту интерференцию и выводят квазикристалл из режима ферми-стекла. Соответственно, транспортные свойства и их температурные характеристики будут иными, чем для совершенного идеального объекта.

В заключение авторы благодарят Д.В.Оленева за внимание к работе и ценные замечания.

1. C.R.Wang, H.S.Kuan, S.T.Lin, and Y.Y.Chen, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 2383 (1998).
2. Q.Guo and S.J.Poon, Phys. Rev. **B54**, 12793 (1996).
3. Ю.Х.Векилов, П.А.Коржавый, Д.В.Оленев, Письма в ЖЭТФ **62**, 349 (1995).
4. П.А.Калугин, А.Ю.Китаев, Л.С.Левитов, Письма в ЖЭТФ **41**, 119 (1985).
5. П.А.Калугин, А.Ю.Китаев, Л.С.Левитов, ЖЭТФ **91**, 692 (1986).
6. H.Tsunetsugu, T.Fujiwara, K.Ueda, and T.Tokihiro, Phys. Rev. **B43**, 8879 (1991).
7. Д.В.Оленев, Э.Исаев, Ю.Х.Векилов, ЖЭТФ **113**, 1009 (1998).