一次元準結晶の電子状態とLie代数

東大・理　大　沢　一　人

一次元準結晶のモデルはフィボナチの0，1列である。フィボナチ列の1を長さ ℓ_a の量子井戸，0を長さ ℓ_b で高さVの量子障壁に置き換えた一次元のポテンシャルを想定する。（図1）これからはこの系の中の電子が持ち得る固有エネルギーについて考えることにする。

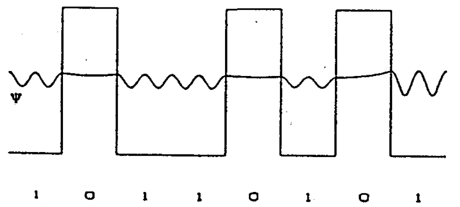

図1

一個の量子井戸に対応する伝送行列をAとする。波動関数をΨとすると

$$\begin{pmatrix} \Psi(\ell_a) \\ \nabla\Psi(\ell_a) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \Psi(0) \\ \nabla\Psi(0) \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} \cos(k\ell_a) & \dfrac{\sin(k\ell_a)}{k} \\ -k\sin(k\ell_a) & \cos(k\ell_a) \end{pmatrix} \qquad k = \sqrt{E}$$

Eは電子の固有エネルギーである。同様にして一個の量子障壁に対応する伝送行列Bが定義できる。

$$B = \begin{pmatrix} \cosh(\varepsilon\ell_b) & \dfrac{\sinh(\varepsilon\ell_b)}{\varepsilon} \\ \varepsilon\sinh(\varepsilon\ell_b) & \cosh(\varepsilon\ell_b) \end{pmatrix} \qquad \varepsilon = \sqrt{V-E}$$

フィボナチ列と同じ順番に伝送行列AとBをかけ算する。

M＝ＡＢＡＡＢ………

周期的境界条件を課すとき固有エネルギーを持つための条件は $|\mathrm{Tr}M| \leq 2$ である。

AとBはLie代数を使い次のようにも表すことができる。

$$A = e^{\alpha} \qquad B = e^{\beta}$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{E}\,\ell_a - n_a\ell_a}{\sqrt{E}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -E & 0 \end{pmatrix}$$

$$\beta = \frac{\sqrt{E-V}\,\ell_b - n_b\ell_b}{\sqrt{E-V}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ V-E & 0 \end{pmatrix} \qquad n_a, n_b \text{ は整数}$$

ハウスドルフの公式を使い

$$M = e^{\alpha} e^{\beta} e^{\alpha} e^{\alpha} e^{\beta} \cdots\cdots\cdots$$
$$= e^{\gamma}$$

となったとする。$|\mathrm{Tr}M| \leq 2$ と $\det \gamma \geq 0$ は同値である。フィボナチ列の並び方より γ において 2次以上の交換項は小さいことが予想できる。よって

$$\gamma \sim \tau\alpha + \beta \qquad \tau = \frac{\sqrt{5}+1}{2}$$

これと条件 $\det \gamma \geq 0$ を使うと系の最低固有エネルギーは

$$E = \frac{\ell_b V}{\tau \ell_a + \ell_b} \text{。} \tag{1}$$

バンドエッジを表す方程式は

$$\tau \frac{\sqrt{E}\,\ell_a - n_a\pi}{\sqrt{E}} + \frac{\sqrt{E-V}\,\ell_b - n_b\pi}{\sqrt{E-V}} = 0 \tag{2}$$

$$\tau\sqrt{E}\,(\sqrt{E}\,\ell_a - n_a\pi) + \sqrt{E-V}\,(\sqrt{E-V}\,\ell_b - n_b\pi) = 0 \tag{3}$$

であることがわかった。γ の交換項を無視するという近似をした(1)(2)(3)と数値計算の結果を比べたものが図2と3である。両者はよく一致しこの近似は一次元準結晶の場合合理的であることがわかった。

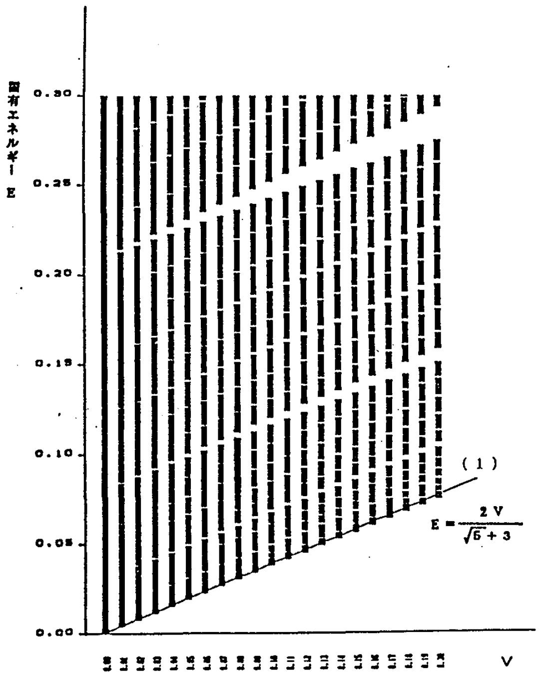

図2　$\ell_a = \ell_b = 1$ の場合。

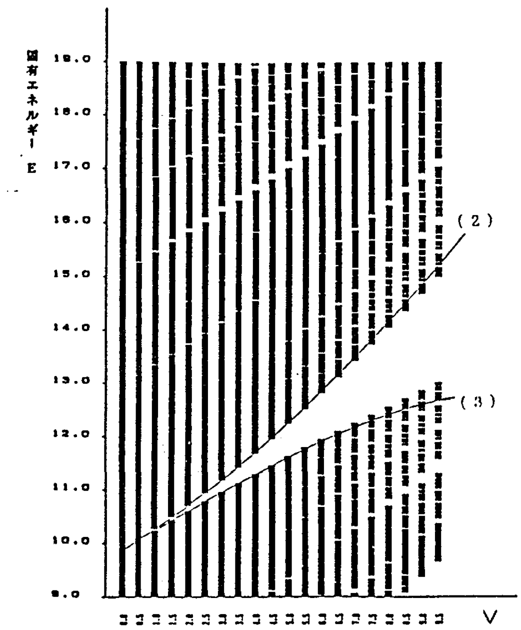

図3　Vがどのくらい大きくなるまで近似が成立するかを調べた図。
最低固有値よりもVが相当大きくても近似はよい結果を与えている。