準結晶の特異な電子構造と磁場効果

東大・工・物工　　新井正男　時弘哲治　藤原毅夫

1　序論

準結晶の電子構造についての研究が、1次元のFibonacci格子及び2次元のPenrose格子を用いて進められてきた。特にFibonacci格子に対しては非常によく調べられ、そのエネルギースペクトルがsingular continuousであることが数値的に示され[1]、またごく最近限られた条件下で解析的にも示された[2]。

一方、Penrose格子については、2次元系であるため解析的な取扱が難しく解決していないが、我々のグループの数値的な解析によれば[3]、エネルギースペクトルは有限のギャップを持つとすれば高々有限個であり、singular continuousである。さらに、ほとんどの状態の波動関数はlocalizeもextendもしていずcriticalである（空間的にpower－law－decay）と思われる。また、エネルギースペクトル自身の自己相似性についての議論も将来の課題である。準結晶の電子構造の完全な解明には、まだ多くの時間を要するであろうが、不規則系とも周期系とも異なる準周期的構造のため、それが特異なものであることは間違いない。このような特異な電子構造に対して外場がどう影響するかは興味深い問題である。例えば、上に述べたcriticalな状態は磁場のもとでよりextendするのか或はlocarizeするのか、また、はたしてLandauバンドを形成するのか。今回はこれら磁場の効果について調べた結果を述べる。

2次元の周期格子に磁場をかけたときの電子状態は、Hofstadterなどによって調べられている[4]。その結果によると、エネルギースペクトルは単位胞を通る磁束を磁束量子で割った量φで特徴づけられ、

$\varphi = q / p$　　（q，pは互いに素な整数）

のとき1つのエネルギーバンドがp個のサブバンドにわかれる。q個のサブバンドが1つのLandauバンドに対応し、系を貫く磁束の数に等しい状態数を持つことになる。これにたいして、Penrose格子の場合には系に並進対称性がなく、電子移動の最小ループ（閉じたpath）が複数個（center modelで7つ、vertex modelで2つ）存在し、それぞれの面積比が無理数になる。そのため系を特徴づける磁束の量も無理数の比で複数個存在することになって、Landauバンドに分かれるかどうかは自明でなくなる。

2　モデルと計算方法

各々のひし形の中心に原子を置き（center modelと呼ぶ）、最近接原子間の相互作用を考えたtight binding model

$$\sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} \psi_j = E \psi_i$$

をもちいる。外場の無い場合も含め、Penrose格子のひし形の頂点に原子を置くモデル（vertex model）とのエネルギースペクトルの性格の異同は現在のところ不明である。数値的に波動関数とエネルギーを求めなくてはならないわけであるが、このときPenrose格子の非周期性のため境界条件の選び方が問題になる。とくにエネルギースペクトルや波動関数の空間的振舞い（power－law-decay）を見る時には、この問題が重要になる。そこで、我々はPenrose格子を最良近似する周期格子を構成する方法を開発し、周期的境界条件を用いて解析を行ってきた。この周期的Penrose格子

は、Penrose格子の準周期性を表す黄金比 $\tau=(\sqrt{5}+1)/2$ をFibonacci数F_kを用いてF_{k+1}/F_kと近似することに対応している。Fibonacciの世代数kが大きくなるに従い、周期格子の単位胞の面積は$(F_{k+1}/F_k)^2$で大きくなり、$k\to\infty$としたときに周期的Penrose格子は正しくPenrose格子と一致する。この計算に主に使った格子（単位胞に含まれるひし形の数は５２１）をFig.１に示す。

磁場の効果は、

$$t_{ij} = t^0_{ij}\exp\left\{\frac{i}{2}h\cdot(R_i\times R_j)_z\right\}$$

$$h=\frac{eH}{\hbar c}$$

の形で位相の部分にとりいれられる。ただしR_iは原子の位置を表し、t^0_{ij}は磁場のないときの電子のトランスファーの値である。今回の計算では$t^0_{ij}=-1$とした。磁場があるときの周期的境界条件は、磁気的並進操作に対するものになる。一般には２次元の格子周期に対応する２つの磁気的並進操作が非可換になる。格子周期が磁気的並進操作の周期と一致する為には、磁場に対して

$$h\cdot S=2N\pi$$

S：系の面積

という制限がつく[5]。この式でNは系を貫く磁束量子の数、すなわち１つのLandauバンド（もし形成されるなら）の状態数を表す。以下磁場の強さをNで表す。

３　計算結果と議論

特徴的な積分状態密度をN＝０およびN＝２００についてFig.２に示す。磁場がないときE＝２に現れていたconfined stateによる縮退は磁場によって消える。また、磁場をかけるとE＝－３前後に大きなギャップが現れている。ギャップの下の状態数が（磁気的）単位胞を貫く磁束の数に等しいことから、Landauバンドが形成されていることがわかる。これに対してエネルギーの高いところではLandauバンドに対応するギャップが現れない。通常の周期格子系では、格子の種類によらず、また格子が部分格子を形成する場合もしない場合も（hexagonal,rectangular）、全てのエネルギーに対してLandauバンドを形成する[4]。このことからPenrose格子では、エネルギーの高いところと低いところで波動関数の性質が異なる可能性も考えられる。或いは各固有状態を特徴ずける長さのスケールがエネルギーの関数である可能性もある。

磁場による固有エネルギーの変化をバーコードでしめしたものをFig.３に示す。バーコードが長くなっているところは、Landau量子化によってギャップの現れるべき状態数のところを表す。N＝１０以下の磁場が弱いときにはLandau量子化に対応したギャップが多く見られる。磁場を強くするに従ってエネルギーの高いギャップから消え始めて、N＝１００程度になるとギャップは１つしか残っていない。即ちエネルギーの低い方から約２０％程度の状態は高次のLandauバンドを形成するが、それよりエネルギーの高い状態は高次Landauバンドに関与しない。これに対して１番下のギャップは磁場を強くしていっても最後まで残っている。（この事実は、系を

さらに大きくしても変化しない。）これは非常に不思議な現象である。
　Penrose格子に対する磁場の影響は、以上のように通常の格子に対するものとはかなり異なっている。これらが準結晶の電子構造の特異性(singular continuous, criticalな波動関数）を直接的に反映したものなのか、あるいは別の原因によるものかを判断するにはより詳しい解析が必要であろう。

文献

(1) M.Kohmoto,L.P.Kadanoff and C.Tang, Phys. Rev. Lett. 50 1870 (1983)
(2) A.Suto, to be published.
(3) H.Tsunetsugu,T.Fujiwara,K.Ueda and T.Tokihiro, J.Phys.Soc.Jpn. 55 1420 (1986)
(4) D.R.Hofstadter, Phys. Rev. B14 2239 (1976),
　D.Langbein, Phys. Rev. 15 A1602 (1964)
(5) J.Zak, Phys. Rev.15 A1602 (1964)

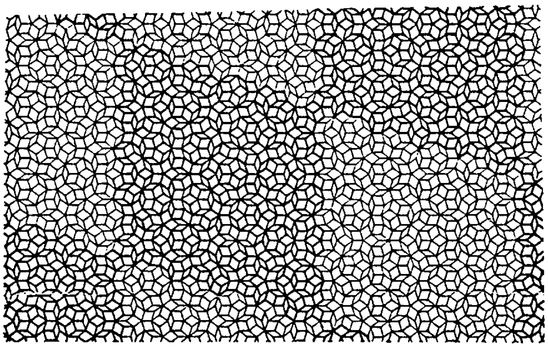

Fig. 1

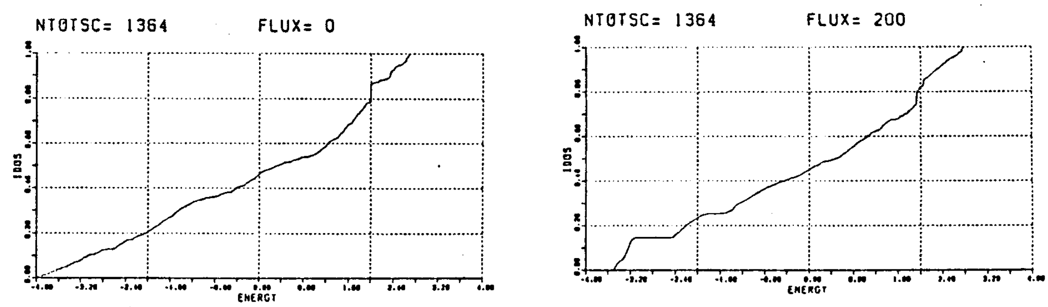

Fig. 2

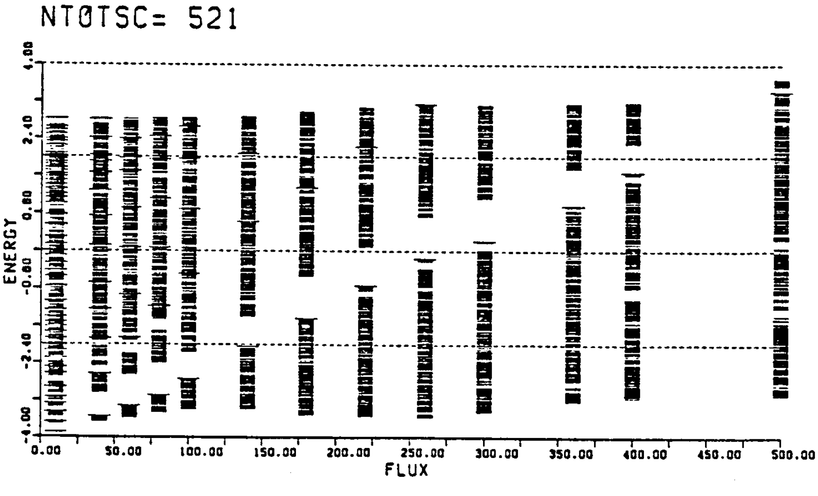

Fig. 3