

準結晶の電子構造について

NTT 電気通信研究所 仙場 浩一

一次元準結晶（フィボナッチ系）の特異な電子構造は応答関数にどのように反映するかについて比熱、交流電気伝導度を例に定性的な考察を行った。スペクトルの自己相似の中心とフェルミ準位とが一致する half-filled band の場合 τ^{-3} のスケール不変性をもつ応答が最も顕著に現れる。

二次元準結晶（ペンローズ格子）の電子構造について自由電子からの近似を一体の範囲で試みた。

〔1〕 応答関数への電子構造の反映

<低温比熱>

ハミルトニアン $H = \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i C_i^\dagger C_j + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} C_i^\dagger C_j$ ($\varepsilon_i = 0$ 、最近接 t_{ij} が t_a 、 t_b の フィボナッチ列) で記述される一次元準結晶の典型的なエネルギー・スペクトルを図1に示す。バンド状に見えるスペクトルの束に属する状態数の間には分岐則があることが知られている。⁽¹⁾ 中央のバンドについての分岐則は $F_N \rightarrow F_{N-2}, F_{N-3}, F_{N-2}$ と表される。 F_N は N 番目のフィボナッチ数である。 N が大きいとき τ を黄金比として $F_N \sim \tau^{N+1}/\sqrt{5}$ なので分岐比は $\tau^{-2} : \tau^{-3} : \tau^{-2}$ となる。 $k_B T$ の分解能で状態密度が一定と見なせる場合これはバンド幅の比と等しい。

1) M. Fujita and K. Machida Solid State Commun. 59, 61 (1986)

フェルミ準位を中心とする幅 B のようなバンドの比熱は $T \sim 0.12 B/k_B$ で停留する。上記フィボナッチ系で half-filled band の場合を考える。この場合自己相似の中心とフェルミ準位は一致し、 $T \rightarrow 0$ にともない系はつきつぎに $B, \tau^{-3}B, \tau^{-6}B, \dots$ のバンド幅を見る。比熱は低温で図2に示すような τ^{-3} のスケール不変性をもつ階段状になる。ただし両軸ともにLogスケール。

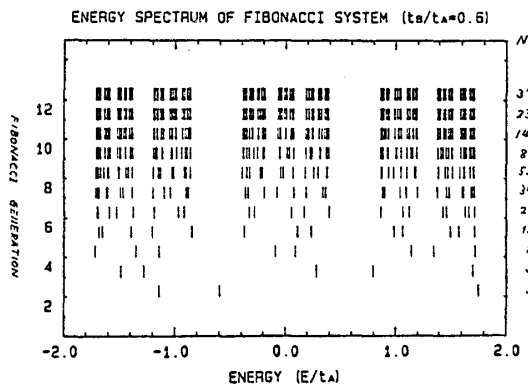


図1

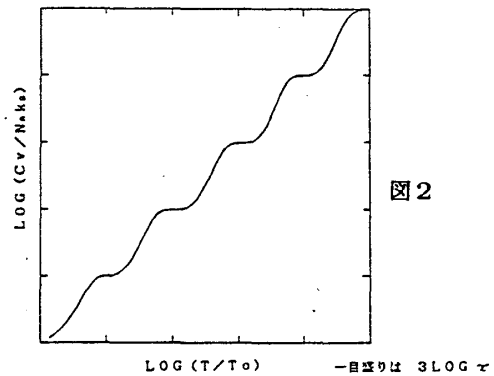


図2

<交流電気伝導度>

上記ハミルトニアン（サイト数233、周期的境界条件）から求めた波動関数をもとに久保Greenwoodの公式を用いて $T=0$ での交流電気伝導率 $\sigma(\omega)$ を計算した。やはり half-filled band を仮定。

$$\sigma(\omega) = 2\pi e^2 \hbar^2 Q/m^2 \int \{f(E) - f(E + \hbar\omega)\} |D|^2 N(E) N(E + \hbar\omega) / \hbar\omega dE$$

(ただし $|D|^2 = |\langle E + \hbar\omega | d/dx | E \rangle|^2$ である)

波動関数は各サイトの原子軌道の重ね合わせで近似される。

$$|E\rangle = \sum_n C_n^E |\phi_n\rangle \quad |\phi_n\rangle : \text{atomic orbital at site } n$$

$$\text{仮定: } \langle \phi_n | \phi_{n-1} \rangle = \text{一定} \quad \langle \phi_n | \phi_{n-2} \rangle = 0$$

$$\sigma(\omega) / |\langle \phi_n | \phi_{n-1} \rangle|^2 \propto \sum_E |\sum_n C_n^E \hbar\omega (C_{n-1}^E - C_{n+1}^E)|^2 / \omega$$

計算の結果を図3 (a) に示す。交流電気伝導率 $\sigma(\omega)$ も低振動数領域で図3 (b) に模式的に示すような τ^{-3} のスケール不変性をもつ

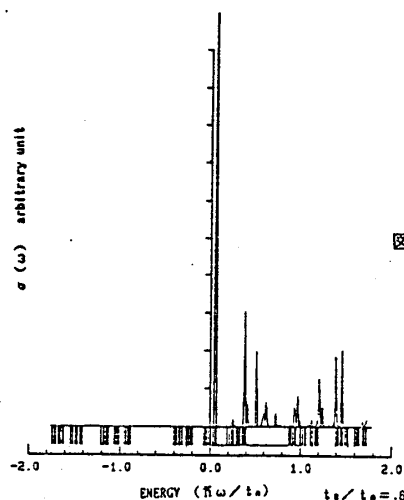


図 3 (a)

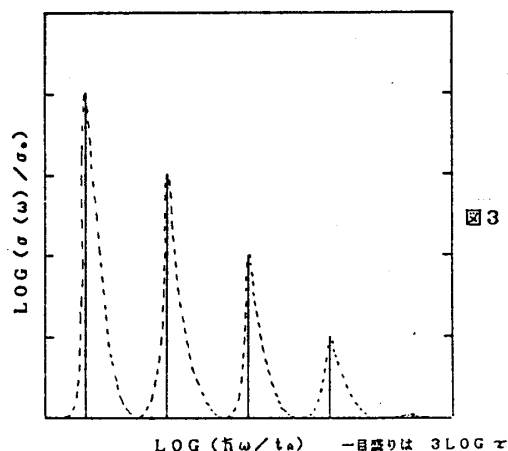


図 3 (b)

【高次元準結晶の電子構造へのアプローチ】

二次元系、三次元系で電子構造を記述する場合、結晶の時と同様に運動量空間をうまく利用することが出来ると便利である。準結晶の場合、発見の発端となった電子線回折像は、対称性は結晶が持つことのできるものではないが、結晶で得られるものと変わらぬきれいな点状である。電子は結晶での場合と同様にブラッグ反射を経験している。並進対称性がないため第一ブリルアンゾーンという便利な道具はないけれども、結晶の電子構造を考えたときのように運動量空間をうまく利用した準結晶の電子構造の解析ができる可能性を示している。

また実際の準結晶の物性測定では微弱な準周期ポテンシャルの影響は種々のゆらぎで消されてしまうと考えられる。よって主にゆらぎの大きさより大きい準周期ポテンシャル成分を考慮した運動量空間での電子構造の記述が重要となると考えられる。

上記の考えに基づき今回は三次元準結晶より構造が簡単でかつ準結晶の本質的な性質を有している理想的な二次元準結晶について第一次近似での等エネルギー線を求めた。二次元準結晶のモデルにはペンローズ非周期的な変形タイルの頂点に原子が位置するもの (vertex model) を用いた。図 4 (a) にそのモデルを示す。原子数は 1961 個である。原子ポテンシャルを δ 関数で近似し、この二次元準周期ポテンシャルのフーリエ変換を求めると図 4 (b) の様になる。結晶と異なり厳密には運動量空間の到る所にフーリエ成分が存在するのであるが、微小な成分を無視できる場合は結晶対称性と相入れない対称性をもってフーリエ成分が離散的に配置しているのと同じである。しかし準周期系の本質は、ポテンシャルのフーリエ変換に関していえば、大きなフーリエ成分の回りに衛星状に小さなフーリエ成分が存在し、またその回りに衛星状により小さなフーリエ成分が存在し...と階層

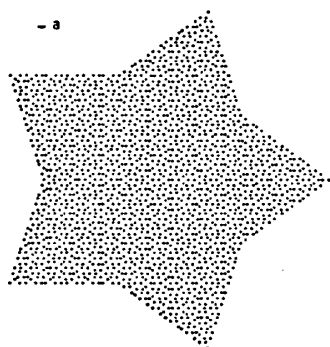


図 4 (a)

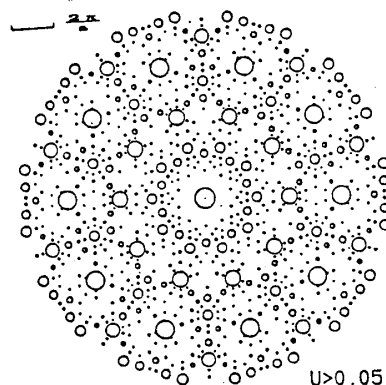


図 4 (b)

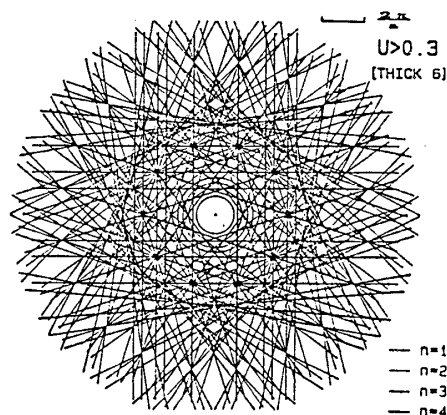


図 4 (c)

的な構造をとっている点にある。本来はこれらすべてのフーリエ成分を考慮した議論をすることが最も望ましいがそれができないため、まず主要な成分から順次摂動論的に考慮してゆくという手段を選んだ。今回得た電子構造は上記の意味での第一近似の電子構造である。

結晶のときと同様に、各ポテンシャル成分に一对一に対応するブラッグ面（ここでは線）が考えられる。図4（c）に比較的大きな成分のつくるブラッグ面を示す。ここに示すブラッグ面だけでもすべて考慮に入れるのは大変な努力を必要とすると思われるし、またそれだけの価値があるかどうかは疑問である。図4（c）に電子密度を原子当たり1個～4個（ $n=1\sim 4$ ）まで変えたときの自由電子フェルミ面（ここでは円）を示しておいた。隣合う円と円の囲む面積が結晶の場合だと第1～第4ブリルアンゾーンに属する面積に対応する。興味のあるのはこれらの円内での電子構造である。今回は図4（c）の原点に最も近い10本のブラッグ線のみを考慮にいった。計算は対称性を用いて $2\pi/10$ の角度領域で三波近似を用いて行った。

図5に得られた3枚のバンドの構造を示す。（a1）（a2）はエネルギーを縦軸にとったときの2本のブラッグ線の原点に最も近い交点におけるギャップ近傍でのバンドの鳥瞰図である。結晶の場合と異なり、2枚目のバンドはこの交点で自由電子のエネルギーとほとんど変わらぬエネルギーをもつ。これはここで考慮した3つのフーリエ成分 U_{G1} 、 U_{G2} 、 U_{G1-G2} の間に

$$|U_{G1-G2}| \ll |U_{G1}| \ll 1, \quad |U_{G1}| = |U_{G2}| \quad (*)$$

の関係があり、交点付近では2枚目のバンドはほとんど摂動の影響を受けないためである。これは準結晶の電子構造を探るうえで留意すべき点の一つだと思われる。結晶の場合は逆格子空間が定義できることを考えると一般にフーリエ成分 U_{G1} 、 U_{G2} 、 U_{G1-G2} の大きさはほぼ等しいと考えられるからである。

図5（b）、（c）、（d）に運動量空間における等エネルギー線をエネルギーが高いバンドから順に示した。考慮した10本のブラッグ線で作られる10角形は $n=1$ のフェルミ円と $n=2$ のフェルミ円の間にある。これより、ここに示すバンド構造は電子密度が $1 < n < 2$ で、省略したポテンシャル成分より高温での電子構造の概形を表すものと考えられる。まん中のバンド（c）は、10角形の辺上にかなり平坦な電子ポケットを持っている。また準結晶に特有なフーリエ成分間の関係（*）は電子のバンド有効質量を軽くする働きをしているようにみえる。

図5 三波近似で求めた二次元準結晶の等エネルギー線。

- （a）考慮した二本のブラッグ線の交点付近での3枚のバンドを（a1）原点方向から、（a2）ブラッグ線方向から見た鳥瞰図
- （b）最もエネルギーの高いバンドの等エネルギー線。
- （c）まん中のバンドの等エネルギー線。
- （d）最もエネルギーの低いバンドの等エネルギー線。

