

一次元準結晶の電子状態

東大理 二宮敏行

一次元準結晶にともなう電子状態は、これまで主に計算機により調べられていたが、次のような特異な性質を持っている。すなわち、a) エネルギー・スペクトルがカントール的である、b) ギャップ幅の分布が逆中則にしたがう、c) バンド幅の和が、準結晶のサイズの逆中で与えられる、d) 波動関数がクリティカルである、などである。

ここでは、電子状態の以上の特徴を直観的に理解するために、Fibonacci 列の構造を考えなおし、その構造の特徴に基づいて、電子状態を議論する。

Fibonacci 列の構造

Fibonacci 列は、普通、 $A \rightarrow AB$ $B \rightarrow A$ という操作をくり返すことにより作られる。2回の操作を一度に行うと

$$A \rightarrow ABA, \quad B \rightarrow AB \quad (1)$$

である。今、 $ABA = X_1$, $AB = Y_1$ と書く。操作 (1) により、 X_1, Y_1 は

$$X_1 \rightarrow X_1 Y_1 X_1, \quad Y_1 \rightarrow X_1 Y_1 \quad (2)$$

と変換される。同様に、

$$X_m = X_{m-1} Y_{m-1} X_{m-1}, \quad Y_m = X_{m-1} Y_{m-1} \quad (3)$$

とすると、操作 (1) により、

$$X_m \rightarrow X_{m+1}, \quad Y_m \rightarrow Y_{m+1} \quad (4)$$

である。 X_m は、普通の Fibonacci 数列を、一つおきにとったものである。以下で、 X_2 を結晶から出発し、これに構造の modulation を加えたことにより得た方法を考えてみる。

出発点として、 3^{j-1} 個の X_1 からなる結晶 $X_1 X_1 X_1 \cdots X_1$ を考える。最初の modulation として、3つ目毎の X_1 を Y_1 にする：

$$X_1 X_1 X_1 X_1 X_1 X_1 \cdots X_1 X_1 X_1 \rightarrow X_1 Y_1 X_1 X_1 Y_1 X_1 \cdots X_1 Y_1 X_1 = \underbrace{X_2 X_2 \cdots X_2}_{3^{j-2} X_2} \quad (5)$$

次に、周期的な modulation として、3つ目毎の X_2 を Y_2 に変換する：

$$X_2 X_2 X_2 X_2 X_2 X_2 \cdots X_2 X_2 X_2 \rightarrow X_2 Y_2 X_2 X_2 Y_2 X_2 \cdots X_2 Y_2 X_2 = \underbrace{X_3 X_3 \cdots X_3}_{3^{j-3} X_3} \quad (6)$$

同様の変換を繰り返すと、 $(s-1)$ 回目の変換の後、 X_s を得る。このようにして、われわれは、一次元準結晶が、結晶から出発し、次々に、周期的 modulation をくり返すことによって (周期 $n, n^2, n^3, \dots, n^s$, 相似的 modulation) 得られたことを見出した。

電子状態

一次元準結晶の電子状態を、上述の構造の特徴にもとづいて議論しよう。

出発点の結晶 $X_1, X_1, X_1, \dots, X_1$ ($N_s = n^{s-1}$ 個の X_1) の電子状態を、cyclic boundary condition で求めると、波数 k の範囲が $-\pi \leq k \leq \pi$ で、 3 つのバンドが得られる ($X_1 = ABA$ に注意)。一つのバンドの幅を b_0 とする。

最初の周期的 modulation (周期 n) により、 b_0 の幅のバンドは、 n 個のバンドと $(n-1)$ 個のギャップに分れる。詳細を無視して、これらのバンド (ギャップ) は同じ幅 $b_1(\varepsilon_1)$ を持つとしよう。 $\varepsilon_1 = \lambda b_0$ とする。

$$b_1 = \frac{1}{n} \{1 - (n-1)\lambda\} b_0 \quad (7)$$

である。次々に、周期的 modulation を加えると (周期 $n^2, n^3, n^4, \dots, n^{s-1}$)、各ステップ毎に、各々のバンドが n 個のバンドと $(n-1)$ 個のギャップに分れる。 m 番目の modulation によりつくられるバンドの幅を b_m 、ギャップの幅を ε_m とする。 modulation が相似であることから、

$$\varepsilon_m = \lambda b_{m-1} = \lambda \left[\frac{1}{n} \{1 - (n-1)\lambda\} \right]^{m-1} b_0 \quad (8)$$

$$b_m = \frac{1}{n} \{1 - (n-1)\lambda\} b_{m-1} = \left[\frac{1}{n} \{1 - (n-1)\lambda\} \right]^m b_0 \quad (9)$$

となることを期待される。一つのバンドの中の状態の数は N_s/n^m である。また、ギャップの幅 ε_m のギャップの数は $(n-1)n^{m-1}$ である。

これより、 ε より大きな幅を持つギャップの数 $g(\varepsilon)$ は

$$g = \text{const.} \times \varepsilon^{-\alpha} \quad (10)$$

$$\alpha = \frac{\ln n}{\ln n - \ln \{1 - (n-1)\lambda\}}$$

である。

また、バンドの幅の和は

$$B_s = B_0 N_s^{-\delta} \quad (11)$$

$$B_0 = 3b_0$$

$$\delta = -\frac{\ln \{1 - (n-1)\lambda\}}{\ln n}$$

である。

なお、Fibonacci 列の電子状態は、すべてクリティカルと秀えられたのに対し、フォノン系は $\omega \rightarrow 0$ で結晶の場合と同様に振舞う。これは、以下のように理解される。電子に於ける方程式は

$$\psi_{n-1} + \psi_{n+1} = (E - V_n) \psi_n \quad (12)$$

$$n \text{ が } A \text{ 位 } \quad V_n = V_A$$

$$n \text{ が } B \text{ 位 } \quad V_n = V_B$$

フォノンに於ける式は

$$K_{n+1}(\psi_{n+1} - \psi_n) - K_n(\psi_n - \psi_{n-1}) = -\omega^2 \psi_n \quad (13)$$

$$n \text{ が } A \text{ 位 } \quad K_n = K_A$$

$$n \text{ が } B \text{ 位 } \quad K_n = K_B$$

とすると、(13) を少し変形して (12) と比較すると、 $\omega \rightarrow 0$ のフォノンスベクトルは、 $(V_B - V_A) \rightarrow 0$ の電子スベクトルに対応し、従って、結晶と同様に振舞うことになる。

T. Ninomiya, Jour. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 3709 ~ 3712