

要旨

一様な磁場をかけた2次元ペンローズ格子上の1電子状態のエネルギースペクトルを強結合近似を用いて数値的に求め、次の結果を得た。

- (1) 状態密度は磁場中でもエネルギー0を中心に鏡映対称を持ち、しかもエネルギー0の所に幅0の鋭いピークをもつ。このピークを構成する状態は、外場の無いときと同様、原点を中心にある幅のサークル状に完全に局在した"ring state"である。
- (2) エネルギー準位は、周期系のランダウ準位に類似した準位に集積する傾向を示す。
- (3) エネルギースペクトルは、磁場の強さに対して黄金比の周期を持ち、エネルギースペクトルを磁場の強さに対して描いた形状は自己相似の構造を持つ。

[1]はじめに

準結晶の原子構造は、結晶ともランダム系とも異なることから、その電子状態も双方における電子状態とは異なったエキゾチックな性質を持つと期待され、数多くの理論的研究が行われている。特に1次元準結晶については研究が活発に行われ、準周期に由来する特異な電子構造が報告されてきた^{1,2)}。2次元の準結晶であるペンローズ格子上の電子状態に関する報告は、まだ緒についたばかりで、シミュレーション的考察が主流である。

ペンローズ格子の電子状態は仙場によって初めて研究がおこなわれた³⁾。最近小田垣⁴⁾と Nguyen, Choy および、甲元⁵⁾と Sutherland は図1に示したペンローズ格子で電子状態の計算を行った。特に甲元らは、状態密度の中央に幅0のピークがありそのピークを構成する状態は、リング状に完全に局在した状態であること指摘している。ここで図1のペンローズ格子は太ったひし形と瘦せたひし形からなる³⁻⁶⁾。

本研究で、我々は磁場中のペンローズ格子の電子状態について議論する。Hofstadter は、磁場中の正方向格子の電子のエネルギースペクトルについて、単位胞を通る磁束を磁束量子でわった無次元のパラメタが有理数であるときに、スペクトルが有限個のランダウ準位にわかれ、無理数のときにカントール・セットになることを示した⁷⁾。ペンローズ格子の場合には更に奇妙な状況になる事を予想して本研究を始めた。すなわちペンローズ格子を構成する2つのひし形の面積比は黄金比であるため、磁場をかけたとき二つのひし形を通る磁束の比も無理数である黄金比になることから、磁場中のペンローズ格子のエネルギースペクトルがランダウ準位に単に分かれるのか、あるいはまたカントール・セット的な自己相似の構造を持つのかに大きな関心があり、この点を明らかにするのが本研究の目的である。

我々は、この研究でペンローズ格子上のエネルギー準位がランダウ準位に集積し、エネルギースペクトルは磁場の強さに対して黄金比の周期を持ち自己相似の構造をもつことを示す。一方、磁場の無いときの完全に局在した状態は磁場中でも存在し、状態密度の中央に幅0のピークを作ることも示す。さらに我々はその状態の解析的な解を求める。

[2]研究の方法

以下のような強結合ハミルトニアンをペンローズ格子上で定義する。

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle t_{ij} \langle j|, \quad (1)$$

ここで $|i\rangle$ は、 i 番目の格子点の波動関数を示し、 t_{ij} は i 番目の格子点と j 番目の格子点とのトランスファー積分である。磁場の無い場合には、隣接する格子点間の t_{ij} は1にとり、その他の場合は0とした。

磁場のある場合には t_{ij} は次のようになる、

$$t_{ij} = \exp[(ie/\hbar c) \mathbf{H} \cdot (\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j)], \quad (2)$$

ただしベクトルポテンシャルは $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{H} \times \mathbf{r}$ とした。ここで磁場は、二次元のペンローズ格子に対して垂直にかけられている。

我々は このハミルトニアンを数値的に解くことによりエネルギースペクトルを磁場の関数として求めた。

ペンローズ格子系は、五回対称を持つ小さなペンローズ格子系から "deflation" 操作により格子を増やして作った。こうして作ったペンローズ格子には境界ができる。もともとペンローズ格子には並進対称性が無いので有限系では系に必ず境界が存在する。そのため境界条件を固定端条件としなければならない。もちろんペンローズ格子を作るタイリング規則を少し変えてペンローズ格子を大きな単位胞とする結晶で近似して周期的境界条件を課すことも可能である⁸⁾。しかし我々は、並進対称性がないというペンローズ格子の特徴を重要と考え、あえて固定端条件を境界条件として選んだ。境界条件による有限サイズ効果はサイズ依存性を見ることによって識別を試みた。選んだ系のサイト数は、536, 1381, 2151である。

なおこのペンローズ格子系の格子点は、たとえばAとBという二種の部分格子に分類することができる。すなわち格子がすべて四角形のため、Aという部分格子に属する格子点に近接する格子点をすべてB型にし、また逆にB型の格子点に近接する格子点をA型にすることが可能である。さて、この対称性のためエネルギースペクトルは $E=0$ の上下で対称になる。というのは、AまたはB上の波動関数の符号をマイナスにすることによりハミルトニアンの符号が反転するからである。

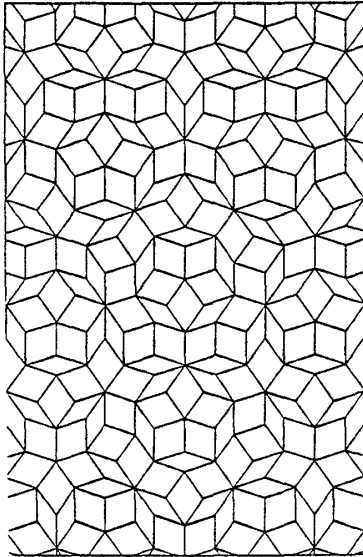


図1 ペンローズ格子

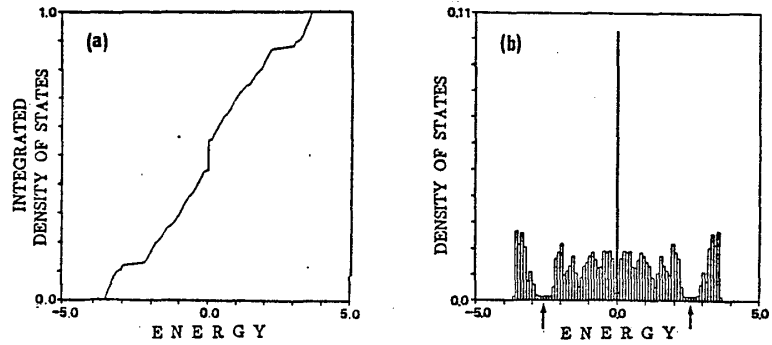


図2 $\tilde{H}=0.15$ のときの積分状態密度(a)、状態密度(b)

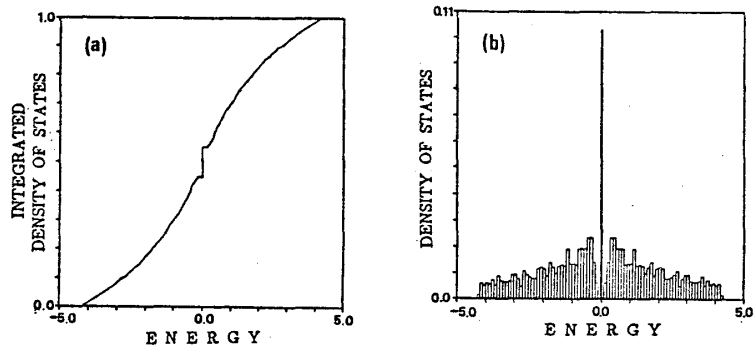


図3 磁場がない場合の積分状態密度(a)、状態密度(b)

[3]数値解析の結果および考察

図2の(a)は1に規格化した積分状態密度(IDOS)、(b)は1サイトあたりの状態密度(DOS)である。総サイト数は2151。磁場は太ったひし形を通る磁束を磁束量子で割ることにより無次元化したパラメータ $\tilde{H} (\tilde{H} = eH a^2 / 2\pi \Phi_0) / \kappa_c$, a は格子の辺の長さ) を用いて表す。図2は $\tilde{H}=0.15$ の強さの場合である。図3(a)、(b)でそれぞれ比較のために磁場のない場合のIDOS, DOSをしめした。図2、図3を見比べると、図2に矢印で示した部分のDOSが激減していることがわかる。この領域を仮に“擬ギャップ”と名づけよう。この領域の状態の電子密度を計算してみると、どの状態も端の部分にのみ大きな値を持つ。さらに数値解析を行った系のサイト数を変化させることにより、我々は擬ギャップ中の状態数の総サイト数 N に対する比は N を大きくすると $1/\sqrt{N}$ で減少することを見いだした。これらのことから擬ギャップ中の状態はすべて有限サイズ効果による“boundary state”である、と結論できる。このことは磁場中のペンローズ格子のエネルギースペクトルが、ギャップで隔てられた一種のランダウ準位に集積することを示している。

図4では、おのおのの状態のエネルギーを $\tilde{H}$ の関数として示した。ここではペンローズ格子のサイト数を536に取っている。 $\tilde{H}$ の(2)の表現は $\tilde{H} < 1$ の領域で有効だが、試みに $\tilde{H}=2$ までエネルギー準位の計算を拡張した。ペンローズ格子のエネルギースペクトルの磁場依存性は全体として蝶が羽を広げた様な形をしており、かつ類似の構造があちこちに散見されることから自己相似性をもつことがわかる。エネルギーが $\tilde{H}$ の増大に対して急激に減少している領域は上で指摘した擬ギャップに相当し、このエネルギーの磁場依存性はboundary state特有のものである。従って無限系ではこの領域は、状態の存在しないギャップとなる。この様にこのダイアグラムを解釈すると、このスペクトルの形はHofstadterが2次元正方格子に磁場をかけた場合に指摘したバタフライダイアグラムに非常に似ているといえよう。しかし規則格子との特筆すべき違いは繰り返しの周期が黄金比であることである。一例をあげれば AB/BC は正確に黄金比である。さらに我々は $\tilde{H}$ の強さを拡張すると繰り返しの周期がフィボナッチ列になっている事も見いだした。すなわち、スペクトルの磁場依存性は準周期系の特徴を明瞭に示すことが明らかになった。

図2、図3を見比べてみると、中央の0エネルギーにおける縮退は磁場がかかった状態でも依然として存在することがわかる。また図4を見ると反転対称の中心の0エネルギーに、すべての磁場の値に対して状態が存在する。しかも、状態の存在を示す線がほぼ孤立していることから縮退が全く解けないことがわかる。我々はこの状態の波動関数を調べることで、波動関数の振幅が5回対称の中心のリング状の領域にのみ存在することを見いだした。この数値解析を考察することにより更に解析的に解を求めた。その解の一例を以下に記述する。

図5にペンローズ格子の最も基本的なパターンをしめす。振幅はA, B, C及びDのタイプのサイトでのみ有限で、他のサイトでは零である。5回対称を持った波動関数は次のように書ける、

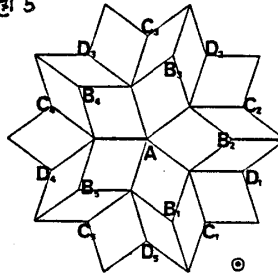
$$\Phi_{ring} = c_A |A\rangle + c_B \sum_{i=1}^5 |B_i\rangle + c_C \sum_{i=1}^5 |C_i\rangle + c_D \sum_{i=1}^5 |D_i\rangle. \quad (3)$$

$$\oint \Phi_{ring} = 0.$$

であるから、次の連立方程式を得る。

$$\begin{aligned} c_C e^{i\alpha} + c_D e^{-i\alpha} &= 0, \\ c_B + c_C e^{-i\alpha} + c_D e^{i\alpha} &= 0, \\ c_A + c_B e^{i\beta} + c_B e^{-i\beta} + c_C e^{i\gamma} + c_D e^{-i\gamma} &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

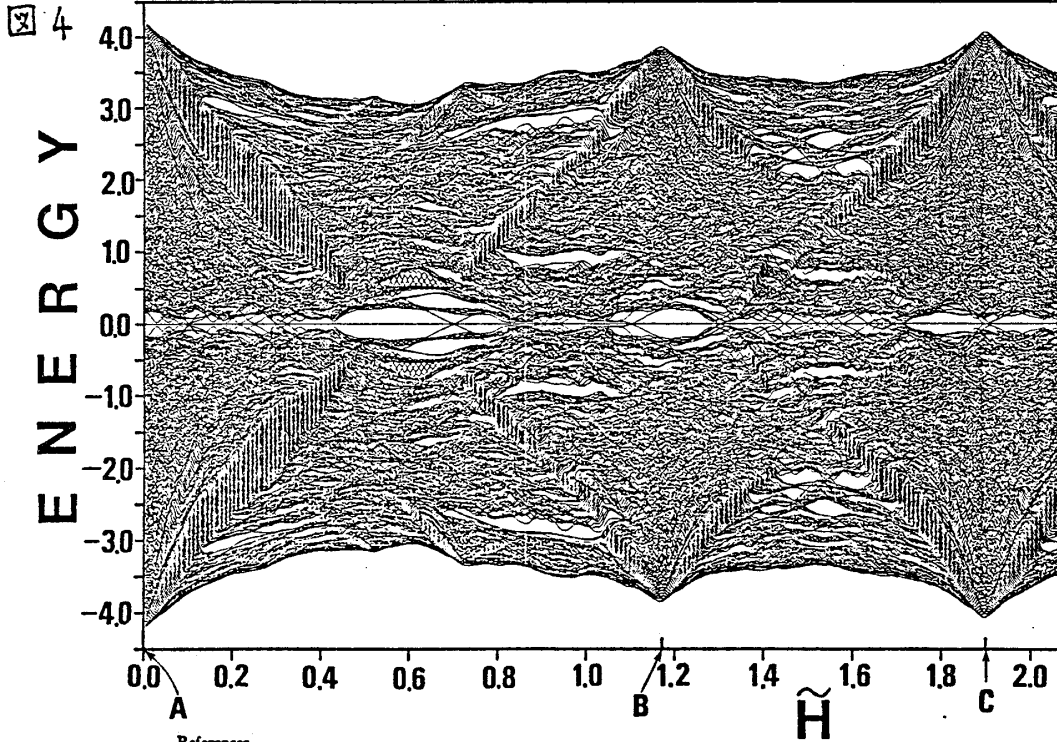
図 5



ここで c_A, c_B, c_C 及び c_D はそれぞれ A, B, C および D タイプのサイトの振幅である。また指数関数の肩の係数はトランスファー積分による。それぞれ $\alpha = 2\pi \tilde{H} \cos(\pi/5)$, $\beta = \pi \tilde{H}$, $\gamma = 2\pi \tilde{H} \cos(2\pi/5)$ となる。上の方程式を解くことにより次の解をえる。

$$\begin{aligned} c_A &= -2\cos\beta + \sin(\alpha - \gamma)/\sin 2\alpha, \\ c_B &= 1, \\ c_C &= \exp[-i(\alpha + \pi/2)]/2\sin 2\alpha, \\ c_D &= \exp[i(\alpha + \pi/2)]/2\sin 2\alpha. \end{aligned} \quad (5)$$

この解は物理的に意味があり、従って磁場中のエネルギー 0 の状態の解のひとつが得られたことになる。



- References
1. D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias, and J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
 2. D. Levine and P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
 3. R. Penrose, *Bull. Inst. Math. Appl.* **10**, 266 (1974).
 4. M. Gardner, *Sci. Am.* **238**, No.1, 110.
 5. N.G. de Bruijn, *Ned. Akad. Weten. Proc. Ser. A43*, 39 (1981).
 6. N.G. de Bruijn, *Ned. Akad. Weten. Proc. Ser. A43*, 53 (1981).
 7. S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H.J. Schellnhuber and E.D. Siggia, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1873 (1983).
 8. M. Kohmoto, L.P. Kadanoff and C. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **50** (1970).
 9. K. Semba, *Master Thesis*, University of Tokyo (1983), (unpublished).
 10. T.C. Choy, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2915 (1985).
 11. T. Odagaki, and D. Nguyen, *Phys. Rev. B33*, 2184 (1986).
 12. M. Kohmoto, and B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2740 (1986).
 13. H. Tsunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda and T. Tokihiro, *J. of Phys. Soc. Japan*, **55**, 1420 (1986).
 14. D.R. Hofstadter, *Phys. Rev. B14*, 2239 (1976).
 15. H. Aoki, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1136 (1985).