

## ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

*Д. В. Оленев\*, Э. И. Исаев, Ю. Х. Веккилов*

*Московский государственный институт стали и сплавов  
117936, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 14 июля 1997 г.

В приближении сильной связи исследованы электронный спектр и волновые функции икосаэдрических квазикристаллов в двухфрагментарной структурной модели (сети Аммана–Маккея) с «центральной» декорацией. Квазикристалл рассматривается как структурный предел ряда оптимальных кубических аппроксимантов с возрастающим периодом. Методом статистики уровней показано, что энергетический электронный спектр икосаэдрического квазикристалла содержит сингулярную (негладкую) часть. Рассчитана плотность электронных состояний для первых четырех оптимальных кубических аппроксимантов икосаэдрического квазикристалла и вычислены соответствующие меры Лебега энергетических спектров указанных аппроксимантов. Показано, что в отличие от одномерного квазипериодического случая энергетический спектр икосаэдрического квазикристалла не содержит иерархической шелевой структуры, характерной для канторова множества нулевой меры спектра одномерного квазикристалла. Исследован характер локализации волновых функций икосаэдрического квазикристалла и обнаружена их «критичность». Изучено влияние химического беспорядка замещения на электронные свойства икосаэдрических квазикристаллов. Показано, что химический беспорядок приводит к «сглаживанию» энергетического электронного спектра и к тенденции к локализации волновых функций.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Квазикристаллы — объекты, обладающие некристаллографической симметрией и координационным дальним порядком (способностью когерентно рассеивать падающее излучение) [1, 2]. Квазикристаллы — сплавы металлических элементов, но их физические свойства отличны от свойств как кристаллических, так и аморфных металлических фаз, хотя с последними у них много общего. Как и для металлов, для квазикристаллов характерен линейный по температуре вклад в теплоемкость, как правило, меньший, чем рассчитанный в приближении свободных электронов [3]. В то же время электросопротивление квазикристаллов (в отличие от аморфных фаз близкого состава) аномально велико (у стабильной икосаэдрической фазы системы AlPdRe оно достигает величины порядка 2 Ом·см при 0.5 К [4]), крайне чувствительно к составу фазы, уменьшается при повышении температуры (температурный коэффициент имеет постоянный знак) и возрастает по мере увеличения структурного порядка и отжига дефектов [3, 5]. Для декагональных квазикристаллических сплавов характерна анизотропия проводимости: вдоль оси упаковки квазикристаллических плоскостей с конечным периодом (ось десятого порядка) проводимость ведет себя как в нормальном металле, а в самих плоскостях — описанным выше образом [6], причем проводимость вдоль периодического

\* E-mail: olenev@trf.misa.ac.ru

направления декагональных квазикристаллов на порядок больше проводимости в квазипериодических плоскостях [7]. Другая специфика — большая величина и сильная температурная зависимость константы Холла, недрудевский закон оптической проводимости, сильная температурная зависимость термоэдс [3, 6]. В слабых магнитных полях, как правило, наблюдается отрицательное магнитосопротивление [3]. Практически все квазикристаллические фазы, включая сплавы с переходными элементами, — слабые диамагнетики в широком интервале температур (исключение — сплавы, содержащие Mn) [6]. Были предложены различные модели такого поведения свойств, однако для оценки применимости этих объяснений нужна надежная информация об электронном спектре квазикристалла.

Электронная структура квазикристаллических объектов теоретически изучена довольно хорошо в случае одномерного и двумерного квазикристаллов в рамках двухфрагментарной структурной модели (одномерного и двумерного паркета Пенроуза соответственно) [8–11]. Энергетический спектр одномерной квазикристаллической решетки представляет собой канторово множество нулевой меры Лебега с самоподобной щелевой структурой, волновые функции ведут себя критически, не являясь ни локализованными, ни делокализованными [8, 9]. В двумерном случае энергетический спектр имеет ненулевую меру Лебега, содержит сингулярную часть и большинство волновых функций являются критическими [10, 11]. Следствие экзотической электронной структуры одномерных и двумерных квазикристаллов — степенной закон зависимости сопротивления от размера объекта [10]. Исследование электронных свойств трехмерных икосаэдрических квазикристаллов с модельной структурой Данзера (при построении которой используется набор из четырех тетраэдров) обнаружило наличие сильных осцилляций плотности электронных состояний во всем диапазоне спектра, а также локализацию отдельных состояний на специальных топологических конфигурациях [12]. Характер электронного спектра и вид волновых функций трехмерных квазикристаллов со структурой сети Аммана–Маккея (трехмерным аналогом паркета Пенроуза) изучены менее подробно, так как, начиная с публикации [13], многие исследователи были склонны считать подобную систему лишенной особенностей в поведении волновых функций и спектра (см., например, [12]). В действительности выводы существующих работ противоречивы. Так, Маркус при исследовании электронных свойств трехмерного квазикристалла со структурой сети Аммана–Маккея в приближении сильной связи не обнаружил принципиальных отличий от кристаллического случая, заключив, что энергетический спектр имеет гладкий характер и волновые функции электронов делокализованы [13]. Ниизеки и Акаматсу, напротив, предположили существование в трехмерном случае критических волновых функций и экзотического вида энергетического спектра, имеющего сингулярно непрерывный характер [14]. К подобному выводу приводят также результаты [15, 16]. Первопринципные расчеты, а также расчеты плотности электронных состояний в приближении слабой связи для отдельных кристаллических аппроксимантов — трехмерных периодических структур, у которых локальная атомная структура подобна квазикристаллической, — показали наличие сильно осциллирующей плотности состояний с глубокой псевдощелью на уровне Ферми. Это позволило предположить справедливость критерия Юм–Розери для объяснения стабильности квазикристалла (см., например, [3, 7, 17–25]). Однако наличие псевдощели не объясняет описанного выше поведения физических свойств квазикристаллов. Для их объяснения нужна более полная информация о волновых функциях и характере особенностей электронного спектра квазикристалла.

В настоящей работе в приближении сильной связи исследуются особенности электронного энергетического спектра и характер локализации волновых функций (трехмерного) икосаэдрического квазикристалла, рассматриваемого как структурный предел ряда оптимальных кубических аппроксимант. Данное исследование является продолжением работ [15, 16]. Статья построена следующим образом. В разд. 2 рассмотрена наиболее распространенная двухфрагментарная структурная модель квазикристалла, приведен формализм проекционного метода для сети Аммана–Маккея, рассмотрена структура периодических аппроксимант икосаэдрических квазикристаллов. Раздел 3 посвящен анализу в приближении сильной связи электронных свойств икосаэдрических квазикристаллов. В п. 3.1 описана методика исследования и сделанные приближения. В п. 3.2 приведены результаты расчетов электронного энергетического спектра и волновых функций совершенного икосаэдрического квазикристалла, а также рассмотрено влияние на результаты химического беспорядка (беспорядок замещения) в квазикристаллическом объекте. Раздел 4 посвящен обсуждению полученных результатов. Раздел 5 содержит заключение.

## 2. ПЕРИОДИЧЕСКИЕ АППРОКСИМАНТЫ ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

Среди предложенных моделей остова структуры квазикристаллов, по-видимому, самой распространенной следует считать модель, основанную на квазипериодической укладке двух элементарных структурных единиц (двухфрагментарная модель). Для одномерного квазикристалла данная модель приводит к последовательности Фибоначчи коротких и длинных отрезков. В двумерном случае двухфрагментарная модель представляет собой паркет Пенроуза, составленный из двух типов ромбов с острыми углами при вершинах  $36^\circ$  и  $72^\circ$  («узкий» и «широкий» ромбы соответственно), а в трехмерном — обобщение паркета Пенроуза (именуемое иначе сетью Аммана–Маккея), образуемое «острыми» и «тупыми» ромбоэдрами. Для реальных квазикристаллических структур обычно используется сложндекорированная сеть Аммана–Маккея — атомы располагаются на позициях различных фрагментов составляющих сеть ромбоэдров (вершины ромбоэдров, ребра, грани, внутренности ромбоэдров), причем не каждая позиция занимает атомом (структурные вакансии) и может существовать химический беспорядок (беспорядок замещения) (см., например, [25]).

Существуют три основных способа построения сети Аммана–Маккея: проекционный метод, метод мультигридов и метод, использующий свойство самоподобия квазипериодической структуры [10, 11, 26, 27]. Наиболее распространенным является проекционный метод, суть которого заключается в следующем. Для построения сети Аммана–Маккея с примитивной декорацией (атомы расположены только в вершинах ромбоэдров) используются целочисленная гиперрешетка в шестимерном пространстве и трехмерные подпространства, параллельное ( $\parallel$ ) и перпендикулярное ( $\perp$ ), ориентированные иррациональным образом к гиперрешетке. Узлы решетки, близкие к параллельному подпространству, проецируются в него, и эта проекция представляет собой модель остова структуры квазикристалла. Ориентация подпространств относительно гиперрешетки выбирается так, чтобы спроецированные в параллельное подпространство орты шестимерной гиперрешетки были направлены вдоль осей симметрии пятого порядка икосаэдра. Узел шестимерной гиперрешетки  $\mathbf{r}$  присутствует на проекции в параллельном подпространстве, если  $n(\mathbf{r}_\perp) = 1$ , где  $n(\mathbf{r}_\perp)$  — функция формы проекции элементар-

ной ячейки гиперрешетки на ортогональное подпространство (функция формы равна единице внутри проекции и нулю вне ее). Здесь  $\mathbf{r}_\perp$  — перпендикулярная компонента  $\mathbf{r}$ . Внутренняя часть гиперячейки удовлетворяет условию

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^6 x_i \mathbf{a}_i, \quad 0 < x_i < 1,$$

где  $\mathbf{a}_i$  — базисные векторы шестимерной кубической решетки. Поэтому

$$n(\mathbf{r}_\perp) = \begin{cases} 1, & \text{если } \mathbf{r}_\perp = \sum_{i=1}^6 x_i \mathbf{a}_{i\perp}, \quad 0 < x_i < 1, \\ 0, & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (1)$$

Следуя [28], будем пользоваться набором базисных векторов в перпендикулярном и параллельном подпространствах

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{1\perp} &= \eta(1, 0, -\tau), & \mathbf{a}_{2\perp} &= \eta(1, 0, \tau), \\ \mathbf{a}_{3\perp} &= \eta(-\tau, 1, 0), & \mathbf{a}_{4\perp} &= \eta(0, -\tau, 1), \\ \mathbf{a}_{5\perp} &= \eta(0, \tau, 1), & \mathbf{a}_{6\perp} &= \eta(-\tau, -1, 0); \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{1\parallel} &= \eta(\tau, 0, 1), & \mathbf{a}_{2\parallel} &= \eta(\tau, 0, -1), \\ \mathbf{a}_{3\parallel} &= \eta(1, \tau, 0), & \mathbf{a}_{4\parallel} &= \eta(0, 1, \tau), \\ \mathbf{a}_{5\parallel} &= \eta(0, -1, \tau), & \mathbf{a}_{6\parallel} &= \eta(1, -\tau, 0), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\eta = (1 + \tau^2)^{-1/2}$ . Полиэдр, описывающий область ненулевых значений  $n(\mathbf{r}_\perp)$  в (1), является ортогональным срезом «трубы проецирования» (области шестимерного пространства, при попадании в которую радиуса-вектора шестимерной гиперрешетки происходит его проецирование в параллельное подпространство) и представляет собой ромбический триаконтаэдр. Иррациональное число  $\tau$ , описывающее ромбический триаконтаэдр, равно  $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$  и называется «золотым сечением».

Оставляя прежним базисный набор (3), изменим набор (2) на базисные векторы  $\overline{\mathbf{a}}_{i\perp}$ ,  $i = 1, \dots, 6$ , полученные из  $\mathbf{a}_{i\perp}$  равенств (2) заменой числа  $\tau$  его рациональным приближением (отношением двух последовательных чисел из ряда Фибоначчи  $f_n$ , для которого  $f_0 = f_1 = 1, f_{n+1} = f_n + f_{n-1}$ , где  $n \geq 1$  и  $\lim_{n \rightarrow \infty} [f_{n+1}/f_n] = \tau$ ), равным  $\bar{\tau} = f_{n+1}/f_n$ , где  $f_{n+1}$  и  $f_n$  — целые числа. В этом случае ортогональный срез «трубы проецирования» будет представлять искаженный ромбический триаконтаэдр и, как следствие, процедура проецирования приведет к построению в параллельном подпространстве кубических структур, локально изоморфных сети Аммана-Маккея. Чем ближе к  $\tau$  его рациональное приближение  $\bar{\tau}$ , тем больше будет период получающейся кубической структуры (для случая  $\bar{\tau} = f_{n+1}/f_n$  период равен  $L = 2\eta(f_{n+1}\tau + f_n)$ ), и тем лучше она будет «аппроксимировать» квазикристалл. Поэтому принято называть данные структуры периодическими аппроксимантами икосаэдрических квазикристаллов. При использовании в качестве  $\bar{\tau}$  отношения последовательных чисел из ряда Фибоначчи аппроксиманты получаются оптимальными в смысле, обсуждаемом в [28]. При нумерации аппроксимант воспользуемся обозначением  $f_{n+1}/f_n$ . Запись « $f_{n+1}/f_n$ -аппроксиманта» означает, что при построении искаженной «трубы проецирования»  $\tau$  заменено на  $f_{n+1}/f_n$ . Причем  $f_{n+1}/f_n$ -аппроксиманты при  $n = 1, 4, \dots, 3k + 1, \dots$  имеют ОЦК-симметрию, аппроксиманты с другими  $n$  имеют простую кубическую симметрию. Итак, икосаэдрический

квазикристалл можно рассматривать как структурный предел последовательности оптимальных кубических аппроксимант с возрастающим периодом. Для получения сложно-декорированной сети Аммана–Маккея используется шестимерная кубическая гиперрешетка с базисом и набор «труб проецирования» (для каждой базисной позиции шестимерной гиперрешетки — своя «труба»). «Трубы проецирования», отвечающие разным декорационным позициям декорированной сети Аммана–Маккея, «сужаются» с ростом размерности фрагмента структуры. Многогранниками, описывающими ортогональные срезы «труб проецирования» для позиций на ребрах, двумерных и трехмерных гранях шестимерной гиперрешетки, являются соответственно ромбический икосаэдр, ромбический додекаэдр и ромбоэдр (острый или тупой) [25].

### 3. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ДВУХФРАГМЕНТАРНОЙ МОДЕЛИ ИКОСАЭДРИЧЕСКОГО КВАЗИКРИСТАЛЛА

К настоящему времени не существует достаточно общей методики исследования электронных свойств квазипериодических структур. В силу отсутствия у квазикристаллов трансляционной симметрии традиционные методы расчета зонной структуры твердых тел, основанные на теореме Блоха, становятся неприменимыми. Методы, не требующие трансляционной инвариантности системы (например, рекурсионный метод и подобные ему), мало пригодны для исследования особенностей энергетического спектра и волновых функций квазикристалла [12, 13]. Поэтому объектом исследования данной работы выбраны оптимальные кубические аппроксиманты икосаэдрических объектов. Таким образом, икосаэдрический квазикристалл рассматривается как структурный предел последовательности указанных аппроксимант.

#### 3.1. Модель, приближения и методика исследования

Электронные свойства двухфрагментарной структурной модели икосаэдрического квазикристалла исследовались в приближении сильной связи. Для минимизации числа свободных параметров задачи использовался гамильтониан с постоянными интегралами переноса для ближайших соседей. Как показывают результаты для одномерных и двумерных квазикристаллов, подобный вид гамильтониана позволяет воспроизвести характерные черты квазикристаллического объекта и качественно рассмотреть влияние квазипериодичности на электронную структуру квазикристалла соответствующей размерности [8–11, 29]. В работе рассмотрена «центровая» декорация аппроксимант атомами одного сорта: атомы с одной  $s$ -орбиталью на атом расположены в центрах ромбоэдров. Для этого случая гамильтониан системы можно написать в следующем виде:

$$H = \sum_j |j\rangle \epsilon_j \langle j| + \sum_{j,j \neq i} |i\rangle t_{ij} \langle j|.$$

При наличии в системе атомов только одного компонента диагональные элементы  $\epsilon_j$  можно положить равными нулю. В этом случае уравнение Шредингера в приближении сильной связи запишется следующим образом:

$$\sum_j t_{ij} \psi_j = E \psi_i, \quad (4)$$

где интегралы переноса считаются не равной нулю константой ( $t_{ij} = -1$ ) только для ближайших соседей — для атомов, принадлежащих ромбоэдрам, имеющим общую грань (учет последующих соседей не вносит качественно нового и усложняет расчет). Поскольку при увеличении порядка аппроксиманты на единицу (порядок 1/1-аппроксиманты соответствует единице, 2/1-аппроксиманты — двойке и т. д.) объем зоны Бриллюэна уменьшается в несколько раз (порядка  $\tau^{-3}$ ), в термодинамическом пределе для икосаэдрического квазикристалла особой точкой становится точка  $\mathbf{k} = 0$ . Поэтому для анализа электронных свойств трехмерного квазикристалла была проведена численная диагонализация матриц гамильтониана уравнения (4) для различных оптимальных периодических аппроксимант при наложенных периодических граничных условиях и исследовано распределение энергетических уровней в точке  $\mathbf{k} = 0$ .

Для исследования гладкости энергетического спектра использовался метод статистики уровней (LS-метод) [10, 11, 29]. Ключевыми здесь являются два соотношения. Первое — доля соседних межуровневых промежутков с шириной  $\Delta E \leq BN^\beta$ :

$$D(\beta) = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \theta \left( \beta - \log_N \left[ \frac{\varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j}{B} \right] \right), \quad (5)$$

где  $N$  — число атомов в базисе аппроксиманты,  $B = \varepsilon_N - \varepsilon_1$  — общая ширина зоны,  $\theta$  — тета-функция Хевисайда. Второе — доля заполнения зоны межуровневыми промежутками с шириной  $\Delta E \leq BN^\beta$ :

$$F(\beta) = \frac{1}{B} \sum_{j=1}^{N-1} (\varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j) \theta \left( \beta - \log_N \left[ \frac{\varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j}{B} \right] \right). \quad (6)$$

Если  $B = \text{const}$ , то в термодинамическом пределе вне зависимости от степени гладкости спектра эти функции должны удовлетворять следующим условиям [10, 11, 29]:  $D(\beta) = 1$  при  $\beta > -1$  и  $F(\beta) = 0$  при  $\beta < -1$ . Для кристаллических и аморфных систем (с гладкими спектрами) кривые  $D(\beta)$  и  $F(\beta)$  в термодинамическом пределе испытывают скачок от нуля до единицы при  $\beta = -1$  [10, 11, 29]. Поэтому считается, что энергетический спектр является негладким или сингулярным, если в термодинамическом пределе зависимость от размера системы величины межуровневых промежутков отличается от закона  $1/N$ .

Локализационное поведение волновых функций икосаэдрического квазикристалла исследовалось методом статистики  $2p$ -норм волновых функций [10, 11], которые определяются следующим образом:

$$\|\psi\|_{2p} \equiv \frac{\sum_n |\psi_n|^{2p}}{\left( \sum_n |\psi_n|^2 \right)^p}, \quad (7)$$

где  $\psi_n$  — амплитуды электронной волновой функции (коэффициенты разложения волновой функции по базису сильной связи).

Рассматривая икосаэдрический квазикристалл как структурный предел ряда оптимальных кубических аппроксимант с возрастающим периодом, можно попытаться найти термодинамический предел в поведении кривых, описывающих статистику распределения  $2p$ -норм собственных векторов гамильтониана уравнения (4). В данной работе статистический анализ распределения  $2p$ -норм волновых функций икосаэдрического

квазикристалла осуществлялся при помощи расчета величины  $I_{2p}(\gamma)$  [10, 11], описывающей долю состояний, у которых  $2p$ -нормы  $\|\psi\|_{2p} \leq N^\gamma$ , т. е.

$$I_{2p}(\gamma) \equiv \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \theta(\gamma - \log_N \|\psi^{(n)}\|_{2p}). \quad (8)$$

Классификация волновых функций проводилась по нормировочному интегралу [10]. Волновые функции считаются делокализованными, если

$$\int_{|\mathbf{r}| < R} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \sim R^d,$$

где  $d$  — размерность пространства, локализованными, если существует нормировка

$$\int_{\infty} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}.$$

Волновые функции, которые не могут быть нормированными в бесконечной системе, но не являются делокализованными, считаются «критическими».

Для анализа влияния химического беспорядка (беспорядок замещения, см. [25]) на электронный энергетический спектр и локализационное поведение волновых функций икосаэдрического квазикристалла в базис используемых оптимальных периодических аппроксимант случайным образом вводились атомы другого компонента (рассматривалась двухкомпонентная система). В этом случае гамильтониан задачи можно записать следующим образом:

$$H = \sum_j |j\rangle \epsilon_j \langle j| + \sum_{j,j' \neq i} |i\rangle t_{ij} \langle j|.$$

Диагональные элементы  $\epsilon_j$  принимают два возможных значения,  $\epsilon^A$  и  $\epsilon^B$ , в зависимости от того, атом А или В находится на  $j$ -м узле. Отличие  $\epsilon^A$  от  $\epsilon^B$  характеризуется энергетическим параметром  $\delta$  равным

$$\delta = \epsilon^A - \epsilon^B.$$

Интегралы переноса для ближайших соседей принимают значения  $t^{AA}$ ,  $t^{AB}$ ,  $t^{BB}$  в зависимости от того, какими атомами заняты узлы  $i$  и  $j$ . Различие интегралов переноса для атомов разных сортов характеризуется энергетическим параметром  $\delta_1$ , равным

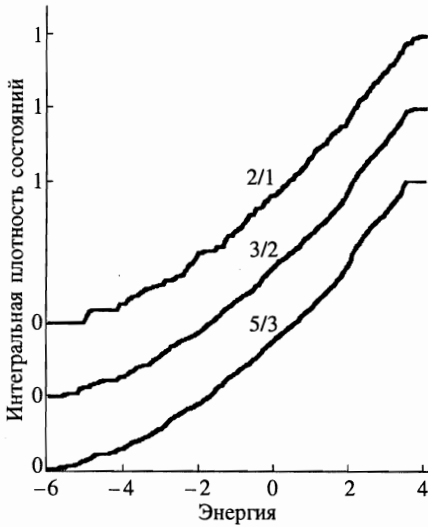
$$\delta_1 = t^{AA} - t^{BB}.$$

Для  $t^{AB}$  использовался аддитивный предел [30]

$$t^{AB} = (t^{AA} + t^{BB})/2.$$

### 3.2. Результаты расчета

В работе исследовались четыре оптимальные кубические аппроксиманты икосаэдрического квазикристалла: 1/1, 2/1, 3/2, 5/3. Элементарные ячейки данных аппроксимант содержат в базисе 32, 136, 576 и 2440 атомов соответственно. На рис. 1 показаны



**Рис. 1.** Интегральная плотность состояний для периодических аппроксимант 2/1, 3/2, 5/3 икосаэдрического квазикристалла. Единицы условные

графики интегральной плотности состояний, рассчитанной по значениям энергетических уровней в точке  $k = 0$ , для кубических аппроксимант икосаэдрического квазикристалла: 2/1, 3/2, 5/3 (график для 1/1-аппроксиманты не показан ввиду довольно большого объема ее зоны Бриллюэна по сравнению с зонами Бриллюэна аппроксимант более высоких порядков и, как следствие, непредставительности расчета по значениям энергетических уровней в одной  $k$ -точке зоны Бриллюэна).

Как видно из рис. 1, кривые интегральной плотности состояний довольно быстро сходятся и не обнаруживают наличия иерархической щелевой структуры, характерной для канторова множества спектра одномерного квазикристалла. На рис. 2 и 3 показаны кривые  $D(\beta)$  и  $F(\beta)$ , рассчитанные для трех икосаэдрических аппроксимант: 2/1, 3/2 и 5/3. Из рис. 2 видно, что кривые  $D(\beta)$  для этих трех аппроксимант почти сошлись к термодинамическому пределу в области  $\beta < -1$ . Это означает, что термодинамическое количество межуровневых промежутков при  $N \rightarrow \infty$  имеет ширину меньше, чем в традиционных системах (для кристаллических и аморфных систем в термодинамическом пределе зависимость величин межуровневых промежутков от размера системы определяется соотношением  $\Delta E \propto 1/N$  [10]). Рисунок 3 показывает сходимость кривых  $F(\beta)$  для упомянутых аппроксимант в окрестности  $\beta > -1$ , что свидетельствует о заполнении конечной доли зоны более широкими, чем в традиционных системах, межуровневыми промежутками. Итак, полученные результаты показывают, что при  $N \rightarrow \infty$  энергетический спектр икосаэдрического квазикристалла содержит сингулярную часть.

Как и в двумерном случае [10], ввиду вычислительных трудностей нет возможности однозначно определить наличие регулярной части в энергетическом спектре икосаэдрического квазикристалла, поскольку для этого нужно исследовать поведение кривых  $D(\beta)$  и  $F(\beta)$  в малой области около  $\beta = -1$  для более высоких, чем рассмотренные, порядков аппроксимант.

Для определения наличия в энергетическом спектре икосаэдрического квазикристалла сингулярной части были рассчитаны плотности электронных состояний для рассмотренных аппроксимант. Расчет плотности состояний для первых трех аппроксимант (1/1, 2/1, 3/2) был выполнен методом тетраэдров с использованием значения энергетического



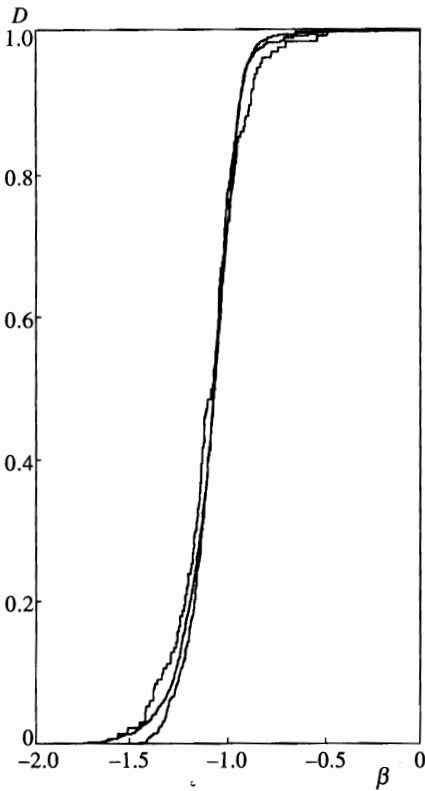


Рис. 2

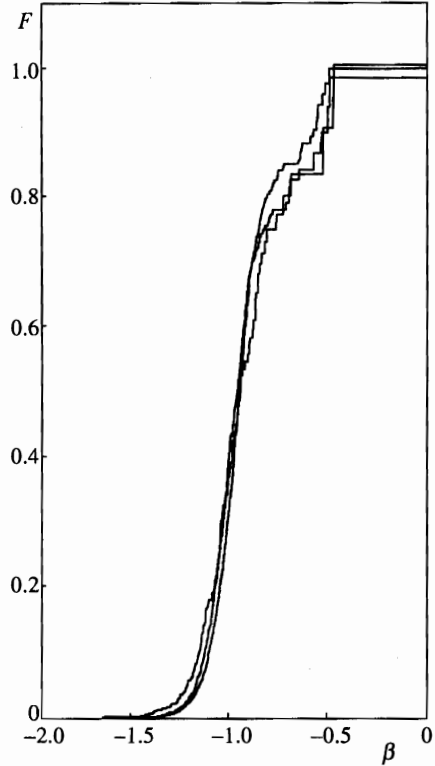


Рис. 3

**Рис. 2.** Доля  $D(\beta)$  межуровневых промежутков с шириной  $\Delta E \leq BN^\beta$  для периодических аппроксимант  $2/1$ ,  $3/2$ ,  $5/3$  икосаэдрического квазикристалла. Более гладкие кривые соответствуют более высокому порядку аппроксиманты. При расчете общая ширина зоны принята равной предельной величине  $B_\infty = 9.69$

**Рис. 3.** Доля  $F(\beta)$  заполнения зоны межуровневыми промежутками с шириной  $\Delta E \leq BN^\beta$  для периодических аппроксимант  $2/1$ ,  $3/2$ ,  $5/3$  икосаэдрического квазикристалла. Более гладкие кривые соответствуют более высокому порядку аппроксиманты. При расчете общая ширина зоны принята равной предельной величине  $B_\infty = 9.69$

ческих уровней в 40  $k$ -точках неприводимой части зоны Бриллюэна соответствующей аппроксиманты. Для расчета плотности электронных состояний  $5/3$ -аппроксиманты использовались четыре  $k$ -точки в неприводимой части зоны Бриллюэна. Ввиду довольно малого объема зоны Бриллюэна  $5/3$ -аппроксиманты (по сравнению с объемом зоны Бриллюэна для первой аппроксиманты) увеличение количества  $k$ -точек в расчете слабо влияет на рассчитанную картину плотности состояний. Подтверждением этому является довольно малое различие кривых интегральной плотности состояний для  $5/3$ -аппроксиманты для расчета по одной  $k$ -точке  $k = 0$  и для расчета по четырем  $k$ -точкам

в неприводимой части зоны Бриллюэна. Кривые плотности электронных состояний с увеличением порядка периодической оптимальной аппроксиманты становятся менее гладкими и более «пиковыми». Это подтверждает сделанный выше вывод о присутствии в энергетическом спектре икосаэдрического квазикристалла сингулярной части, так как в противном случае наблюдалась бы сходимость плотности электронных состояний к гладкой кривой. Кроме того, расчеты показали, что гладкость спектра зависит от энергетического диапазона: энергетический спектр более гладкий в области малых энергий спектра, а сильные осцилляции присутствуют в основном при высоких энергиях в спектре. Однако с ростом порядка аппроксиманты длина гладкого участка энергетического спектра уменьшается. Поэтому можно полагать, что в термодинамическом пределе (квазикристалл) сильные осцилляции плотности состояний, отражающие наличие сингулярной части в спектре, присутствуют во всем диапазоне энергий электронного спектра, свидетельствуя таким образом, что энергетические зоны в квазикристалле являются плоскими, практически бездисперсными, с нулевой групповой скоростью электронов. Это, очевидно, является причиной экспериментально обнаруженной сильной зависимости электрической проводимости от состава, наблюдаемой в квазикристаллических сплавах [6].

Проведенные расчеты хорошо согласуются с расчетами плотности электронных состояний первых четырех периодических аппроксимант в приближении слабой связи, проведенными Карлсоном [20]: обнаружено образование щелей в области малых энергий спектра  $5/3$ -аппроксиманты, хотя в энергетическом спектре аппроксимант более низкого порядка подобные щели отсутствуют.

Расчет плотности электронных состояний позволил определить меры Лебега энергетических спектров соответствующих аппроксимант. Мера Лебега энергетического спектра рассчитывалась как общая длина разрешенных участков в диапазоне энергий  $[-6; 6]$  (согласно известной теореме о границах спектра [30], энергетические уровни рассматриваемой системы лежат в интервале  $-6 \leq E \leq 6$ ). Нормированные на величину  $B = \epsilon_n - \epsilon_1$  (в расчетах ввиду быстрой сходимости кривых интегральной плотности состояний для различных аппроксимант полагалось значение  $B$  для  $5/3$ -аппроксиманты, см. рис. 1) меры Лебега энергетических спектров аппроксимант  $1/1$ ,  $2/1$ ,  $3/2$ ,  $5/3$  составили  $0.95$ ,  $0.98$ ,  $0.98$  и  $0.97$  соответственно. Поэтому можно заключить, что зависимость меры Лебега энергетического спектра от размера аппроксиманты в случае трехмерных икосаэдрических квазикристаллов мала в отличие от случая одномерного квазикристалла, когда мера Лебега энергетического спектра периодической аппроксиманты уменьшается с размером системы по степенному закону [8–10]. Довольно малое различие мер Лебега энергетических спектров двух последних рассчитанных аппроксимант свидетельствует о том, что энергетический спектр трехмерного икосаэдрического квазикристалла занимает на энергетической шкале область конечной ширины. Кроме того, близкие к 1 значения нормированных мер Лебега энергетических спектров рассматриваемых аппроксимант и тенденция к сходимости результатов говорят о том, что в спектре икосаэдрического квазикристалла нет щелей существенной величины. Данные результаты подтверждают вывод о «неканторовости» спектра, основанный на картине интегральной плотности состояний для первых четырех оптимальных периодических аппроксимант (см. рис. 1).

На рис. 4 показаны кривые  $I_8(\gamma)$ , рассчитанные для трех оптимальных кубических аппроксимант икосаэдрических квазикристаллов:  $2/1$ ,  $3/2$ ,  $5/3$ . Рисунок свидетельствует о сходимости в термодинамическом пределе кривых  $I_8(\gamma)$  в малой области  $\gamma \approx -2.3$ .

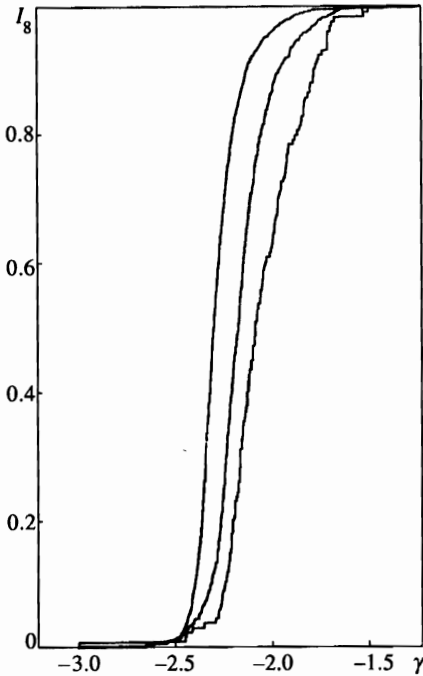


Рис. 4. Доля  $I_8(\gamma)$  состояний, в которых  $\|\psi\|_8 \leq N^\gamma$ , для периодических аппроксимант: 2/1, 3/2, 5/3. Более гладкие кривые соответствуют более высокому порядку аппроксиманты

Кроме того, из рисунка видно, что с увеличением номера аппроксиманты кривые  $I_8(\gamma)$  приближаются к ступенчатой функции со ступенькой, расположенной около  $\gamma \approx -2.3$ . Это означает, что в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ )  $2p$ -нормы ( $p = 4$ ) почти всех волновых функций икосаэдрического квазикристалла зависят от размера системы как  $\|\psi\|_8 \approx N^\gamma$ , где  $\gamma \approx -2.3$ .

В случае делокализованного состояния зависимость  $2p$ -нормы волновой функции от размера системы, как следует из (7), равна  $\|\psi\|_{2p}^{ext} \approx N^{1-p}$ , экспоненциально локализованные волновые функции характеризуются  $2p$ -нормой  $\|\psi\|_{2p}^{exp.loc} \approx 1$ . Поэтому найденная зависимость  $2p$ -норм ( $p = 4$ ) волновых функций икосаэдрического квазикристалла от размера системы исключает случаи как делокализации, так и экспоненциальной локализации состояний. Тем не менее известно, что зависимость  $2p$ -нормы волновой функции от размера системы вида  $N^{\gamma(p,\alpha)}$  выполняется для волновых функций со степенным спадом квадратов модулей амплитуд [10, 11] ( $\alpha \geq 0$  — локализационный показатель, причем случаи  $\alpha = 0$  и  $\alpha \rightarrow \infty$  следует отнести к делокализованному состоянию и к состоянию экспоненциальной локализации соответственно). Поэтому аналогично случаю двумерного квазикристалла [10, 11] в настоящей работе предполагается, что:

$$|\psi|^2 \propto |\mathbf{r}|^{-2\alpha}. \quad (9)$$

При вычислении  $2p$ -нормы волновой функции (9) на достаточно больших квазипериодических фрагментах обнаружено, что зависимость  $\gamma(p,\alpha)|_{p=4}$  при  $-3 \leq \gamma \leq -1.7$  описывается графиком, изображенным на рис. 5. Результаты были получены численно для первых пяти аппроксимант икосаэдрического квазикристалла — до сходимости к

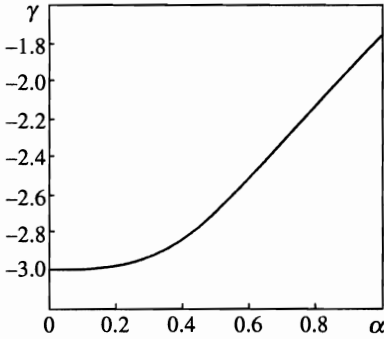


Рис. 5. Зависимость  $\gamma(p, \alpha)|_{p=4}$  при  $-3 \leq \gamma \leq -1.7$

термодинамическому пределу (на рисунке показаны результаты расчета для пятой аппроксиманты, содержащей в базисе порядка десяти тысяч атомов). Из рис. 5 видно, что  $\gamma \approx -2.3$  соответствует локализационному показателю  $\alpha \approx 0.75$ . Согласно классификации по нормировочному интегралу, волновые функции с подобным поведением следует отнести к критическим, так как нормировка функций с  $|\psi|^2 \propto |r|^{-2\alpha}$ ,  $\alpha > 0$  в трехмерном случае может быть осуществлена только при  $\alpha > 3/2$ .

На рис. 6, 7 и 8 изображены кривые  $D(\beta)$ ,  $F(\beta)$  и  $I_8(\gamma)$  при различных величинах химического беспорядка замещения, отражаемых коэффициентом  $\delta$ , и постоянной кон-

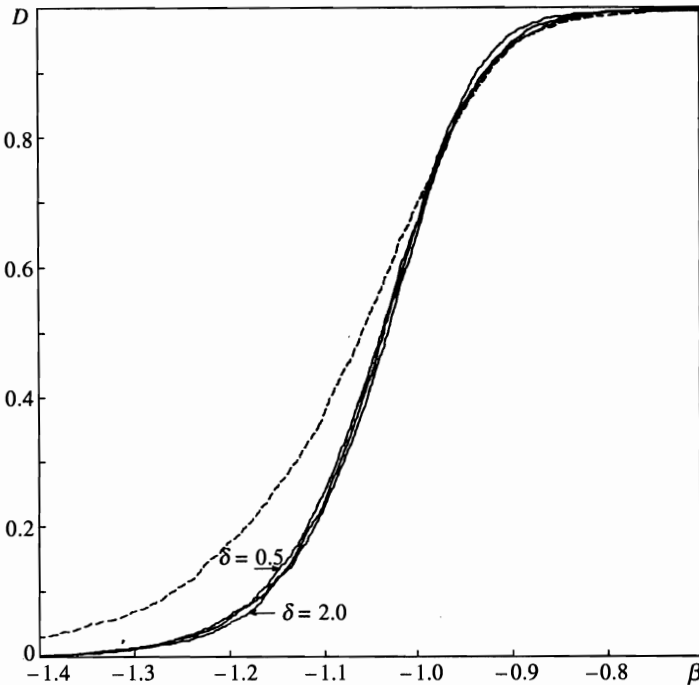


Рис. 6. Кривые  $D(\beta)$ , рассчитанные для 5/3-аппроксиманты при  $\delta = 0.5$ ,  $\delta = 1$ ,  $\delta = 2$  (концентрация  $C_B$  атомов типа В и параметр  $\delta_1$  постоянны и равны 50 ат. % и 0 соответственно). Штриховой линией показана кривая для идеального случая ( $\delta_1 = 0$ ,  $C_B = 0$ ,  $\delta = 0$ )

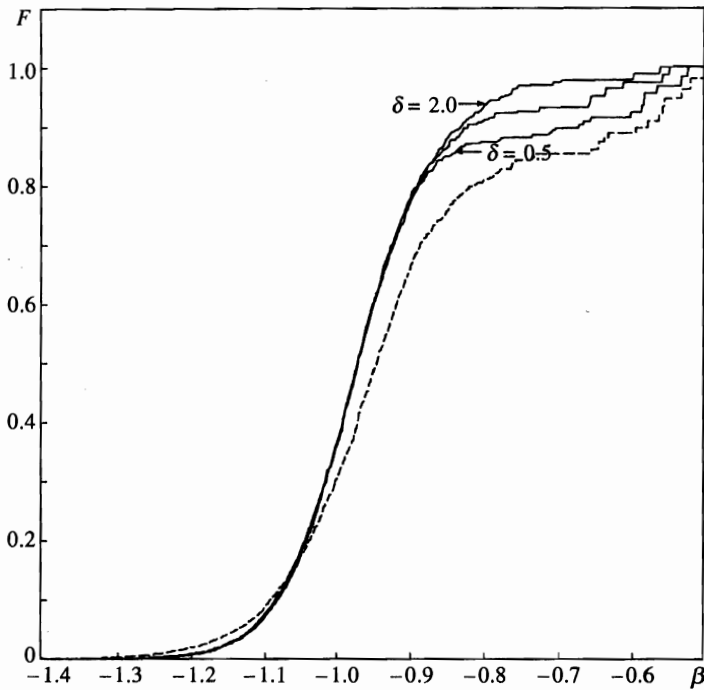


Рис. 7. Кривые  $F(\beta)$ , рассчитанные для 5/3-аппроксиманты при  $\delta = 0.5$ ,  $\delta = 1$ ,  $\delta = 2$  (концентрация  $C_B$  атомов типа В и параметр  $\delta_1$  постоянны и равны 50 ат. % и 0 соответственно). Штриховой линией показана кривая для идеального случая ( $\delta_1 = 0, C_B = 0, \delta = 0$ )

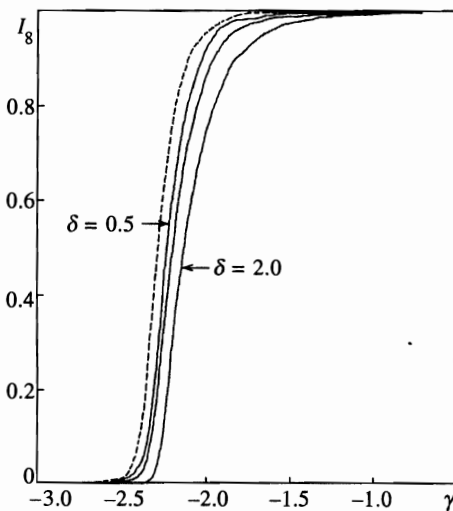


Рис. 8. Кривые  $I_8(\gamma)$ , рассчитанные для 5/3-аппроксиманты при  $\delta = 0.5$ ,  $\delta = 1$ ,  $\delta = 2$  (концентрация  $C_B$  атомов типа В и параметр  $\delta_1$  постоянны и равны 50 ат. % и 0 соответственно). Штриховой линией показана кривая для идеального случая ( $\delta_1 = 0, C_B = 0, \delta = 0$ )

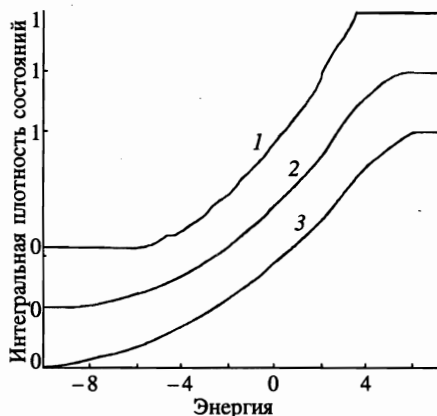


Рис. 9. Интегральная плотность электронных состояний для икосаэдрического квазикристалла с  $C_B = 0$  ат.% (1), 30 ат.% (2), 50 ат.% (3). Единицы условные

центрации атомов второго компонента (В) (использовалась 5/3-аппроксиманта). Данные рисунки показывают, что наличие беспорядка замещения существенно образом сглаживает энергетический спектр по сравнению со спектром квазикристалла без беспорядка замещения (с увеличением параметра  $\delta$  кривые  $D(\beta)$  и  $F(\beta)$  приближаются к ступенчатой функции со ступенькой, расположенной при  $\beta = -1$ ), а волновые функции имеют тенденцию к локализации (кривые  $I_g(\gamma)$  сдвигаются в сторону больших величин  $\gamma$ ). Подобные результаты — сглаживание спектра и тенденция к локализации волновых функций — обнаружены также и для случаев увеличения химического беспорядка замещения, отражаемого коэффициентом  $\delta_1$  и концентрацией атомов второго компонента (В). «Сглаживание» энергетического электронного спектра с ростом химического беспорядка в системе иллюстрирует рис. 9, на котором показаны кривые интегральной плотности состояний для 5/3-аппроксиманты при различных величинах концентрации атомов В (расчет по четырем  $k$ -точкам в неприводимой части зоны Бриллюэна).

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как следует из полученных результатов, электронные свойства трехмерного икосаэдрического квазикристалла со структурой сети Аммана–Маккея существенно образом отличаются от электронных свойств одномерного квазикристалла (цепочки Фибоначчи). Как и в случае одномерного квазикристалла, энергетический спектр трехмерного квазикристалла содержит сингулярную часть. Однако в отличие от одномерного случая из-за иной топологии задачи структура спектра икосаэдрического квазикристалла несамоподобна, и это приводит к ненулевой мере Лебега энергетического электронного спектра трехмерного квазипериодического объекта. Кроме того, энергетический спектр икосаэдрического квазикристалла, как показывают результаты работы, не содержит больших щелей, квазипериодичность структуры приводит к сильным осцилляциям плотности состояний во всем диапазоне энергий спектра. Подобная картина электронного спектра икосаэдрического квазикристалла согласуется с представлением о сильном рассеянии электронов на уровне Ферми (все электронные состояния имеют нулевую групповую скорость), обусловленном всюду плотным множеством векторов обратной решетки квазикристалла [31].

Большинство волновых функций икосаэдрического квазикристалла «критичны» (согласно классификации по нормировочному интегралу), проявляя степенной характер уменьшения с расстоянием квадратов модулей амплитуд. Последний факт хорошо согласуется с результатами работы [32], посвященной анализу электронных и фононных свойств самоподобной кластерной упаковки псевдомаккеевских икосаэдров в системе AlPdMn. Однако волновые функции с локализационным показателем  $\alpha = 2.5$ , полученные в [32] из условия самоподобия структуры, строго говоря, не «критичны», как утверждается в [32], а степенным образом локализованы (в силу классификации волновых функций по нормировочному интегралу, см. выше). Важным отличием от одномерного и двумерного случаев квазипериодических упаковок (цепочки Фибоначчи и паркета Пенроуза соответственно) является наличие у большинства волновых функций только одного локализационного показателя  $\alpha$ , а не непрерывного спектра значений  $\alpha$  [10]. С появлением в системе химического беспорядка электронный энергетический спектр «сглаживается», а волновые функции имеют тенденцию к локализации (т. е. с возрастанием химического беспорядка происходит увеличение локализационного показателя  $\alpha$ ).

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, показано, что в трехмерном случае электронный спектр идеального (бездефектного) квазикристалла содержит сингулярную (негладкую) часть, волновые функции являются критическими. Наличие химического беспорядка (беспорядка замещения) сглаживает энергетический спектр и приводит к тенденции к локализации электронных состояний. Полученные результаты позволяют кратко остановиться на проблеме электрической проводимости трехмерного квазикристалла (более полный анализ — предмет отдельного рассмотрения). Несмотря на уже сравнительно большое количество работ, еще нет однозначного объяснения причины низкой проводимости квазикристаллов и ее температурной зависимости.

В трехмерной задаче о проводимости икосаэдрического объекта в приближении слабой связи имеются противоречивые результаты: согласно [33] проводимость должна быть конечной, а согласно [34] (по теории возмущений) она бесконечна. В работе [35, 36] была рассмотрена модельная задача рассеяния электрона в трехмерном квазикристалле с многолистной поверхностью Ферми, состоящей из большого, но конечного количества электронных и дырочных «карманов». Авторы отметили, что в этом случае реализуется режим андерсоновской локализации электронов в «карманах» ферми-поверхности, что должно дать температурную зависимость проводимости  $\sigma \propto \sqrt{T}$  (электрон-электронное взаимодействие), когда состояния локализованы внутри «долин», и  $\sigma \propto T$ , когда начинаются «междолинные» переходы при более высоких температурах (рассеяние на фононах) [37]. Рассматривая квазикристалл как структурный предел ряда оптимальных аппроксимантов с возрастающим периодом, авторы работы [31] пришли к выводу, что в трехмерном квазикристалле на поверхности Ферми все электронные состояния испытывают сильное рассеяние, волновые функции должны осциллировать на всех масштабах (это подтверждает анализ критичности волновых функций) и реализуется режим прыжковой проводимости. Прыжковая проводимость была также предложена для самоподобной структуры икосаэдрического квазикристалла в системе AlPdMn с основным структурным блоком, представляющим 51 атомный псев-

домакеевский икосаэдр [32], а также для икосаэдрических квазикристаллов в системе AlCuFe [38]. Был проведен эксперимент, показывающий, что низкотемпературная электропроводность икосаэдрических квазикристаллов системы  $\text{Al}_{70.5}\text{Pd}_{21}\text{Re}_{8.5-x}\text{Mn}_x$  описывается моттовским законом для прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\left[\frac{T_0}{T}\right]^p\right),$$

где  $p = 1/2$  для  $x = 2, 2.5, 3, 3.5$  и  $p = 1/4$  для  $x = 0$  (диапазон температур от 0.45 до 10 К) [39]. Этот результат указывает на наличие порога подвижности и на состояние «металлического стекла». Более подробно обсуждать температурную зависимость проводимости квазикристаллов здесь нецелесообразно — это предмет отдельного рассмотрения, однако сказанное подтверждает справедливость вывода о критичности волновых функций и их тенденции к локализации при усилении беспорядка в системе (в особенности на краях зоны).

В случае, когда волновые функции убывают с расстоянием по степенному закону  $\psi \propto 1/r^\alpha$ , в режиме прыжковой проводимости температурная зависимость частоты прыжков  $1/\tau$  ( $\tau$  — время релаксации) имеет вид  $1/\tau \propto T^{\alpha/n}$ , если активационный барьер прыжка  $\Delta E$  связан с длиной прыжка  $\lambda$  как  $\Delta E = \text{const} \cdot \lambda^{-n}$ , где  $n$  — целое положительное число [32] (это справедливо, как подтверждает эксперимент [39], для не слишком низких температур, при которых наблюдается моттовский закон прыжковой проводимости). Кроме того, «сглаживание» электронного энергетического спектра с ростом беспорядка в системе приводит к увеличению плотности состояний на уровне Ферми (если учесть экспериментальный факт, что уровень Ферми для стабильных икосаэдрических квазикристаллов попадает в локальный минимум плотности состояний, т. е. в «псевдощель»). Таким образом, с учетом сказанного из соотношения Энштейна  $\sigma \propto e^2 N(E_f) \lambda^2 / \tau$  для квазикристалла в режиме прыжковой проводимости [31] следует, что с повышением температуры и введением беспорядка в систему проводимость должна увеличиваться.

В заключение авторы благодарят П. А. Коржавого и Д. В. Ливанова за внимание к работе и ценные замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 96-02-16143).

## Литература

1. D. Shechtman, 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. S. J. Poon, Adv. Phys. **41**, 303 (1992).
4. F. S. Pierce, S. J. Poon, and Q. Guo, Science **261**, 737 (1993); C. Berger, T. Grenet, P. Lindqvist, P. Lanco, J. C. Grieco, G. Fourcaudot, and F. Cyrot-Lackmann, Solid State Commun. **87**, 977 (1993).
5. H. Akiyama, Y. Honda, T. Hashimoto, K. Edagava, and A. Takeuchi, Jpn. J. Appl. Phys. B **7**, L1003 (1993); Y. Honda, K. Edagava, A. Yoshika, T. Hashimoto, and S. Takeuchi, Jpn. J. Appl. Phys. A **9**, 4929 (1994).
6. Z. M. Stadnik, G. W. Zhang, A.-P. Tsai, and A. Inoue, Phys. Rev. B **51**, 11358 (1995).



7. T. Fujiwara, S. Yamamoto, and G. T. Laissardiere, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4166 (1993).
8. П. А. Калугин, А. Ю. Китаев, Л. С. Левитов, *Письма в ЖЭТФ* **41**, 119 (1985).
9. M. Kohmoto, B. Sutherland, C. Tang, *Phys. Rev. B* **35**, 1020 (1987).
10. H. Tsunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda, and T. Tokihiro, *Phys. Rev. B* **43**, 8879 (1991).
11. H. Tsunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda, and T. Tokihiro, *J. Phys. Soc. Jap.* **55**, 1420 (1986).
12. G. Kasner, H. Schwabe, and H. Böttger, *Phys. Rev. B* **51**, 10454 (1995).
13. M. A. Marcus, *Phys. Rev. B* **34**, 5981 (1986).
14. K. Niizeki and T. Akamatsu, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 2759 (1990).
15. Д. В. Оленев, Ю. Х. Векилов, *Письма в ЖЭТФ* **63**, 101 (1996).
16. Д. В. Оленев, Ю. Х. Векилов, *Письма в ЖЭТФ* **64**, 559 (1996).
17. T. Fujiwara and T. Yokokawa, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 333 (1991).
18. G. T. Laissardiere and T. Fujiwara, *Phys. Rev. B* **50**, 5999 (1994).
19. D. N. Davydov, D. Mayou, C. Berger, C. Gignoux, A. Neumann, A. G. M. Jansen, and P. Wyder, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3173 (1996).
20. A. E. Carlsson, *Phys. Rev. B* **47**, 2515 (1993).
21. A. P. Smith and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1365 (1987).
22. J. Friedel, *Helv. Phys. Acta* **61**, 538 (1988).
23. V. G. Vaks, V. V. Kamysenko, and G. D. Samolyuk, *Phys. Lett. A* **132**, 131 (1988).
24. М. А. Фрадкин, *Письма в ЖЭТФ* **49**, 612 (1989).
25. Д. В. Оленев, П. А. Коржавый, Ю. Х. Векилов, *ЖЭТФ* **104**, 4130 (1993).
26. V. Elser, *Phys. Rev. B* **32**, 4892 (1985).
27. C. L. Henley, *Phys. Rev. B* **34**, 797 (1986).
28. L. J. Shaw, V. Elser, and C. L. Henley, *Phys. Rev. B* **43**, 3423 (1991).
29. L. Yamamoto and T. Fujiwara, *Phys. Rev. B* **51**, 8841 (1995).
30. H. Ehrenreich and L. Schwartz, *The Electronic Structure of Alloys*, Academic Press, New York (1976).
31. Ю. Х. Векилов, П. А. Коржавый, Д. В. Оленев, *Письма в ЖЭТФ* **62**, 349 (1995).
32. C. Janot, *Phys. Rev. B* **53**, 181 (1996).
33. А. Ю. Китаев, *Письма в ЖЭТФ* **48**, 270 (1988).
34. J. B. Sokoloff, *Phys. Rev. B* **36**, 6361 (1987).
35. S. E. Burkov, A. A. Varlamov, and D. V. Livanov, *Письма в ЖЭТФ* **62**, 338 (1995).
36. S. E. Burkov, A. A. Varlamov, and D. V. Livanov, *Phys. Rev. B* **53**, 11504 (1996).
37. B. L. Altshuler and A. G. Aronov, *Electron-electron interaction in disordered systems*, ed. by A. L. Efros and M. Pollak, Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam (1985).
38. D. Mayou, C. Berger, F. Cyrot-Lackmann, T. Klein, and P. Lanco, *Phys. Rev. Lett* **70**, 3915 (1993).
39. Q. Guo and S. J. Poon, *Phys. Rev. B* **54**, 12793 (1996).