

УДК 539.216; 538.913

© 1991

СКЕЙЛИНГОВЫЕ СВОЙСТВА ФОНОННОГО СПЕКТРА ОДНОМЕРНОГО КВАЗИКРИСТАЛЛА

О. В. Усатенко

Аналитически найдено число состояний низкочастотных фононов в одномерном квазикристалле с решеткой Фибоначчи в приближении взаимодействия ближайших соседей. Исследована зависимость максимальной частоты колебаний решетки от силовых констант. В рамках теории возмущений исследованы скейлинговые свойства щелей спектра. Указаны положение и величины щелей, образующих семейство с определенным свойством самоподобия.

1. В связи с недавним открытием нового объекта физики твердого тела — квазикристаллов [1] — произошло резкое увеличение интереса к изучению квазипериодических (КП) структур.

Богатство свойств КП систем обусловлено их исключительным (в некотором смысле промежуточным) положением между упорядоченными (кристаллическими) и неупорядоченными (аморфными) твердыми телами. Квазикристаллы, являясь достаточно сложными для изучения объектами, породили широкий фронт исследований более простых одномерных систем [2-6]. Одномерные КП структуры заслуживают внимания, с одной стороны, как первый шаг на пути исследования реальных кристаллов, а с другой — как самостоятельный объект, реализующийся в виде тонкоплочных сверхрешеток, представляющих практический интерес [7], а также, возможно, реализующихся в трехкомпонентных системах Al—Cu—Ni [8].

Численные расчеты [9] и результаты теоретического анализа [10, 11] электронных и фононных спектров 1D квазикристаллов показали, что спектры этих систем имеют фрактальную структуру типа множества Кантора, а скейлинговые свойства спектра обусловлены динамикой пнуров трансфер-матриц, рассматриваемых в ренормализационной схеме Комото, Каданова и Танга [10].

Целью настоящей работы является изучение граничных точек спектра, а именно вычисление числа состояний длинноволновых фононов, а также зависимости максимальной частоты колебаний от упругих модулей решетки в предельных случаях: а) мало отличающихся упругих констант решетки и б) при выполнении сильных неравенств между упругими модулями. В рамках теории возмущений рассмотрены скейлинговые свойства фононного спектра цепочки атомов.

2. Решетка Фибоначчи, представляющая собой одномерный аналог 2D-покрытия Пенроуза [12] и реальных икосаэдрических квазикристаллов, может быть построена с помощью рекуррентной композиции, задающей КП последовательности L и S интервалов

$$P_{n+1} = P_n U P_{n-1}; P_0 = S, P_1 = L, P_2 = LS, P_3 = LSL, \dots, \quad (1)$$

т. е. последовательность интервалов на $n+1$ -м этапе построения есть такое объединение двух предыдущих последовательностей, что всякий раз

P_{n-1} находится справа от P_n . Число интервалов на $n+1$ -м этапе построения есть число Фибоначчи

$$F_{n+1} = F_n + F_{n-1}, F_0 = F_1 = 1. \quad (2)$$

Построенная таким образом решетка является одной из реализаций КП последовательностей получаемых более общим методом проекций [13].

В нашей работе будет рассматриваться фононный спектр одномерного КП кристалла, состоящего из атомов массы $m=1$ при взаимодействии ближайших соседей. Силовые константы решетки принимают два значения K_L и K_S в соответствии с законом чередования интервалов (1).

Численный анализ аналогичной модели впервые был проведен в [9] при выборе $K_L=1$, $K_S=\tau=(1+\sqrt{5})/2$. Было отмечено, что спектр колебаний решетки имеет структуру типа множества Кантора. Впрочем, это неоднократно отмечалось и в более ранних работах [10, 11], где акцент делался на изучении электронных свойств КП систем.

В уравнении движения для продольных смещений n -го атома решетки u_n

$$\omega^2 u_n = K_n^-(u_n - u_{n-1}) + K_n^+(u_n - u_{n+1}), \quad (3)$$

ω — частота колебаний, $K_{n+1}=K_n^+$. Это уравнение с недиагональным беспорядком путем замены переменных $v_n = K_n^-(u_n - u_{n+1})$ может быть приведено к более удобному виду

$$-\omega^2 v_n / K_n^- = v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1}. \quad (4)$$

Таким образом, в новых переменных задача становится полностью эквивалентной задаче о фононном спектре решетки с квазипериодически чередующимися массами при замене $1/K_n \rightarrow m_n$.

Проблема нахождения спектра колебаний решетки может быть сформулирована в терминах следа трансфер-матрицы следующим образом [4, 10, 14]. Рекуррентное соотношение (1) позволяет построить матрицу, выражающую переменные $(v_{F_{n+1}}, v_{F_n})$ через (v_1, v_0) , так что для матриц выполняется соотношение, аналогичное (1)

$$M_{n+1} = M_{n-1} M_n, M_0 = \begin{pmatrix} 2 - \omega^2 / K_S & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

а M_1 получается из M_0 заменой K_S на K_L . Рекуррентное соотношение для следов $T_n = \text{Sp } M_n / 2$ было получено в работе [10] с использованием соотношения (5) и условия $\text{Det } M_n = 1$. Оно имеет вид

$$T_{n+1} = 2T_n T_{n-1} - T_{n-2}. \quad (6)$$

Начальными условиями при определении T_n , следующими из (1) и (5), являются

$$T_{-1} = 1, T_0 = 1 - \omega^2 / 2K_S, T_1 = 1 - \omega^2 / 2K_L. \quad (7)$$

Частоты, определяющие фононный спектр решетки, состоящей из F_n частиц, находятся из условия $|\text{Sp } M_n| \leq 2$, и задача сводится, таким образом, к определению множества значений ω , при которых $|T_n| \leq 1$ при $n \rightarrow \infty$. Соотношение (6) может рассматриваться также как движение точки $(x_n, y_n, z_n) = (T_n, T_{n-1}, T_{n-2})$ трехмерного пространства. Движение задается отображением

$$(x_n, y_n, z_n) \rightarrow (x_{n+1}, y_{n+1}, z_{n+1}) = (2x_n y_n - z_n, x_n, y_n). \quad (8)$$

Специфика звукового спектра такова, что он может быть проанализирован явно при малых частотах ω . Немаловажным обстоятельством здесь является то, что интеграл отображения

$$\mathcal{J}(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 - 2xyz = 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{K_L} - \frac{1}{K_S} \right)^2 \omega^4 \quad (9)$$

при малых значениях ω близок к единице, т. е. отображение¹ близко к тому, которое имеет место для периодических структур [14].

3. Для нахождения T_n линейризуем (8) вблизи неподвижной точки $P(1, 1, 1)$, представив его в виде

$$T_n = 1 - \xi_n, \quad |\xi_n| \ll 1. \quad (10)$$

В результате для ξ_n получаем линейное однородное уравнение

$$\xi_{n+1} = 2(\xi_n + \xi_{n-1}) - \xi_{n-2}, \quad (11)$$

имеющее своим решением

$$\xi_n = c_1 \tau^{2n} + c_2 \tau^{-2n} + c_3 (-1)^n.$$

Константы решения находятся из начальных условий (7), линейризованных по ω^2 .

Используя асимптотику для F_n при $n \gg 1$ (формула Бине), получаем

$$\xi_n = \omega^2 F_n^2 \overline{K^{-1}} / \sqrt{2}, \quad \overline{K^{-1}} = (1/K_S + \tau/K_L)/(1 + \tau). \quad (12)$$

Здесь K^{-1} — среднее значение обратной жесткости, так как числа интервалов L и S в решетке пропорциональны τ и 1. Заметим, что при нахождении спектра в пределе $n \rightarrow \infty$ необходимо устремить ω к нулю так, чтобы неравенство (10) не было нарушено.

Рассматривая квазикристалл как кристалл, составленный из блоков длины L_n , содержащих F_n частиц, можно записать дисперсионное уравнение

$$\cos \pi \nu F_n = T_n, \quad (13)$$

следующее из периодических условий, наложенных на u_n на границах блоков. Здесь ν — относительное число осцилляций решения уравнения (3), связанное с общепринятым определением квазиволнового числа q (при $K_L = K_S$ и $L = S$) соотношением $\nu = ql/\pi$, $l = L_n/F_n$.

Из дисперсионного уравнения и (12) при $\omega \rightarrow 0$ имеем

$$\nu = \frac{1}{\pi} \sqrt{\overline{K^{-1}}} \omega. \quad (14)$$

Аналогичный результат был получен ранее в [3] из качественных соображений, а в модели равных жесткостей и квазипериодически чередующихся масс в работе [15] — несколько иным методом.

Из (10), (11) следует, что полученный результат справедлив только у дна первой зоны. Однако его можно распространить на более широкий интервал частот. Заметим для этого, что решение уравнения (6) при $n \gg 1$ может быть представлено в виде $T_n = \cos \alpha F_n$. Производя сшивку этого решения с полученным ранее выражением (12), находим

$$T_n = \cos \sqrt{\overline{K^{-1}}} \omega F_n, \quad (15)$$

т. е. снова приходим к результату (14). Условие его применимости теперь имеет вид $\omega^2 \ll \min(K_L, K_S)$ с дополнительной оговоркой, что ω не находится «вблизи» краев зон, где теория возмущений не применима.

4. Перейдем теперь к рассмотрению зависимости верхней границы спектра от упругих модулей. Будут рассмотрены два предельных случая: а) мало отличающихся жесткостей $|K_L - K_S| \ll K_L, K_S$; б) сильно отличающихся величин K , которые находятся либо в соотношении $K_L \ll K_S$, либо $K_S \ll K_L$.

а) При $\omega \sim \omega_{\max}$ спектр формируется циклом третьего порядка отображения (8): $Q(1, -1, -1) \rightarrow R(-1, 1, -1) \rightarrow S(-1, -1, 1) \rightarrow Q$. Линейризуем T_n , как и ранее, вблизи точек Q, R и S

$$T_1 = -1 + \xi_1, \quad T_2 = -1 + \xi_2, \quad T_3 = 1 - \xi_3, \quad \dots$$

Результатом линеаризации является уравнение, аналогичное (11), однако с иными начальными условиями, следующими из (7)

$$\xi_1 = 2 - \omega^2/2K_S, \quad \xi_2 = 2 - \omega^2/2K_L, \quad \xi_3 = 2(\xi_1 + \xi_2).$$

В результате приходим к следующему выражению для максимальной частоты колебаний:

$$\omega_{\max} = 2/\sqrt{\bar{K}^{-1}}. \quad (16)$$

Это выражение, как и (14), имеет прозрачный смысл: спектр КП решетки, интеграл отображения следов которой (9) близок к единице, близок

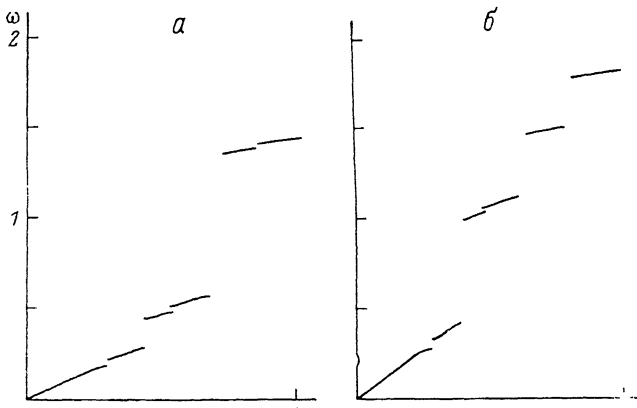


Рис. 1. Фононный спектр цепочки атомов. $K_L = 0.1, K_S = 1$ (а); $K_L = 1, K_S = 0.1$ (б).

к спектру периодической решетки, а в качестве эффективной жесткости фигурирует величина $(\bar{K}^{-1})^{-1}$. Заметим, однако, что (16) справедливо только с точностью до членов, линейных по $\Delta K = K_L - K_S$. Это не явно предполагалось при записи начальных условий для ξ_n .

б) В этой ситуации метод линеаризации уже не работает, однако может быть применена теория возмущений. Когда один из коэффициентов жесткости стремится к нулю, решетка распадается на ряд слабо связан-

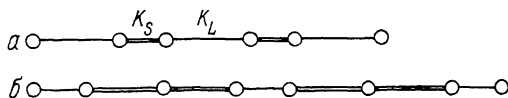


Рис. 2. Комплексы частиц, дающие вклад в максимальную частоту колебаний в первом порядке теории возмущений. $K_L \ll K_S$ (а), $K_S \ll K_L$ (б).

ных между собой «молекул», наибольшая из которых и определяет максимальную частоту колебаний решетки, а взаимодействие молекул определяет поправки к частоте.

При $K_L \rightarrow 0$ спектр состоит из низкочастотного участка, на котором атомы, принадлежащие двухатомным молекулам, колеблются в фазе и отщепленного высокочастотного участка $\omega \simeq \sqrt{2K_S}$ (рис. 1, а). Зависимость ω_{\max} от K_L может быть найдена по теории возмущений. В первом ее порядке основной вклад дает комплекс (рис. 2, а)

$$\omega_{\max}^2 = 2K_S + 3K_L/2.$$

При $K_S \rightarrow 0$ решетка представляет собой совокупность двух- и трехатомных молекул. Спектр состоит из низкочастотного участка, на котором колебания молекул еще не возбуждены, и трех высокочастотных участков;

$\omega \simeq \sqrt{2K_L}$ — частота колебания двухатомных молекул, $\omega \simeq \sqrt{K_L}$ и $\omega \simeq \sqrt{3K_L}$ — две нормальные частоты колебаний трехатомной молекулы (рис. 1, б). Поправка к максимальной частоте $\sqrt{3K_L}$, вычисленная по теории возмущений в линейном приближении по K_S , равна

$$\omega_{\max}^2 = 3K_L + K_S/2.$$

Комплекс частиц, дающий вклад в это выражение, изображен на рис. 2, б.

На рис. 3 представлены результаты численного расчета максимальной частоты колебаний и результаты аналитических вычислений. Заметим, что сплошные кривые несут полную информацию о зависимости ω_{\max} от K_L и K_S . Это связано со свойством однородности ω как функции K_L и K_S

$$\omega(\lambda, K_L, \lambda K_S) = \lambda^{1/2} \omega(K_L, K_S),$$

следующего из вида уравнения (3).

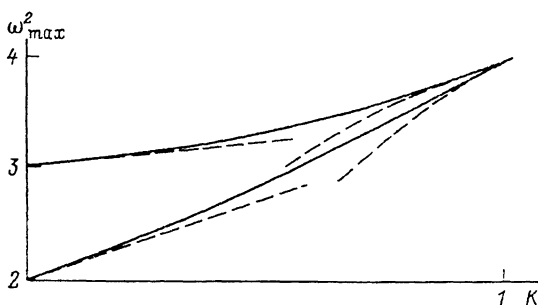


Рис. 3. Зависимость квадрата максимальной частоты колебаний от упругих модулей. Сплошные кривые — численный расчет, $K_L = 1, 0 \leq K_S \leq 1$ (верхняя кривая), $K_S = 1, 0 \leq K_L \leq 1$ (нижняя кривая); пунктирные линии — аналитические результаты.

5. В п. 3 и 4а было показано, что при мало отличающихся упругих модулях, т. е. при

$$|K_L - K_S| \ll K_L, K_S, \quad (17)$$

частота колебаний решетки в граничных точках $\nu=0$ и $\nu=1$ определяется усредненным значением \bar{K}^{-1} . Ниже мы обобщим этот результат и покажем, что во всех фибоначчи-рациональных точках, т. е. точках ν вида $\nu = p + q\varphi$, где p и q — рациональные числа, спектр определяется выражением, близким к тому, которое имеет место для периодической цепочки

$$\omega_0^2(\nu) = \frac{4}{K^{-1}} \sin^2 \frac{\pi\nu}{2}, \quad (18)$$

где в качестве характеристики упругих свойств решетки фигурирует усредненное значение обратной жесткости.

Будем действовать стандартным образом и произведем Фурье-преобразование уравнения (4). При этом порядок следования элементов K_n удобно определить с помощью метода проекций [13], задающего координаты частиц $x_n = an + b [(n - \xi)/\tau]$, где $[x]$ означает целую часть x . Последнее выражение определяет квазипериодический порядок следования элементов (отрезков) a и $a + b$, а ξ является параметром, определяющим различные последовательности. Используя эту «координатную» аналогию и выбирая $\xi = 1/2$, запишем K_n^- в виде

$$K_n^- = K_S + (K_L - K_S) \Phi(n), \quad \Phi(n) = [(n + 1/2)\varphi] - [(n - 1/2)\varphi]. \quad (19)$$

При таком выборе ξ , K_n^- оказывается четной функцией n , а соответствующее ему преобразование Фурье — вещественным. Проведя указанное

преобразование уравнения (4), приходим к уравнению для компонент Фурье

$$v_\nu = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} v_n \exp(-i\pi\nu n),$$

$$(\omega^2 - \omega_0^2(\nu)) v_\nu = \omega^2 \sum'_{k=-\infty}^{\infty} B_k v_{\nu-2k\varphi}, \quad (20)$$

где

$$B_k = \frac{K_S^{-1} - K_L^{-1}}{\tau K^{-1}} \frac{\sin \pi k \varphi}{\pi k \varphi}, \quad \varphi = 1/\tau,$$

а $\omega_0(\nu)$ определено соотношением (18). Знак «прим» у суммы означает отсутствие в сумме слагаемого с $k=0$, включенного в левую часть уравнения. Как следует из определения v_ν и $\omega_0(\nu)$ функция v_ν оказывается периодической, а уравнение (20) инвариантным относительно замены $\nu \rightarrow \nu + 2n$ (n — целое). Поэтому в дальнейшем будем приводить ν к интервалу $[-1, 1]$.

Спектр колебаний определяется теперь вместо дисперсионного уравнения (13) из условия разрешимости системы уравнений (20) относительно v_ν , т. е. обращения в нуль бесконечного детерминанта, составленного из коэффициентов при v_ν . Однако следующие ниже рассуждения показывают, что спектр колебаний в окрестностях некоторых точек, в рамках теории возмущений по малому параметру $\Delta K/K$, может быть найден либо путем пренебрежения правой частью уравнения (20), что эквивалентно существованию отдельных независимых мод колебаний, либо путем учета взаимодействия только двух мод.

Действительно, учтем в уравнении (20) взаимодействие мод ν и $\nu - 2k\varphi$, полагая формально все $B_{k'} = 0$ при $k' \neq k$. В результате комбинации (20) с уравнением, получающимся из него после замены ν на $\nu - 2k\varphi$ имеем

$$[\omega^2 - \omega_0^2(\nu)][\omega^2 - \omega_0^2(\nu - 2k\varphi)] = \omega^4 B_k^2. \quad (21)$$

Уравнение $\omega_0(\nu) = \omega_0(\nu - 2k\varphi)$ при $\nu \in [-1, 1]$ и фиксированном k имеет два корня, поэтому (21) определяет две щели в спектре при $\nu_{1,2} = k\varphi + \pm n_{1,2}$, $\nu_2 - \nu_1 = 1$. Их величина в рамках теории возмущений равна

$$\Delta\omega_{1,2} = \omega_0(\nu_{1,2}) |B_k|. \quad (22)$$

Поскольку $k = \pm 1, \pm 2, \dots$, то связывание мод с различными k дает бесконечное счетное число щелей в спектре $\omega = \omega(\nu)$ при $\nu = k\varphi + n$, $\nu \in [-1, 1]$. Можно показать [16], что в первом порядке по $\Delta K/K$ учет взаимодействия большего числа мод вклада в щель не дает. Об этом же свидетельствуют численные расчеты величин щелей, не основанные на теории возмущений и хорошо согласующиеся с выражением (22). Проанализируем его более подробно.

Рассмотрим совокупность щелей, получающуюся при подстановке в (22) в качестве k последовательности $k_l = (-1)^l F_l$. Из соотношения

$$\varphi^{l+1} = (-1)^{l+1} (F_{l-1} - F_l \varphi) \quad (23)$$

следует, что имеется набор $n_l = (-1)^{l+1} F_{l-1}$, определяющий $\nu_l = k_l \varphi + \pm n_l$: $\nu \in [0, 1]$, $\lim_{l \rightarrow \infty} \nu_l = 0$. Используя (20) и (22), нетрудно видеть, что с ростом l величины щелей $\Delta\omega(\nu_l)$ обнаруживают скейлинговое поведение, а именно

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{\Delta\omega(\nu_l)}{\Delta\omega(\nu_{l+1})} = \tau^3, \quad \nu_l = \varphi^{l+1}. \quad (24)$$

то скейлинговые свойства щелей спектра, расположенных справа от ν , оказываются идентичными свойствам щелей, расположенных слева.

Таким образом, при $\nu_i \rightarrow \nu = p + q\varphi$ $\Delta\omega(\nu_i) \rightarrow 0$. Следовательно, мода $\omega(p + q\varphi)$ оказывается независимой от других мод и частота ω в этих точках определяется выражением (18) с точностью до членов линейных по ΔK .

Выражаю благодарность А. М. Косеичу и участникам его семинара за обсуждение результатов работы, а также В. И. Переседе за стимулирующую критику.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Schechtman D., Blech J., Gratias D., Cahn J. W. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. N 20. P. 1951—1953.
- [2] Luck J. M., Petritis D. // J. Stat. Phys. 1986. V. 42. N 3/4. P. 289—310.
- [3] Lu J. P., Odagaki T., Birman J. K. // Phys. Rev. 1986. V. B33. N 7. P. 4809—4817.
- [4] Калугин П. А., Китаев А. Ю., Левитов Л. С. // ЖЭТФ. 1991. № 2 (8). С. 692—704.
- [5] Kohmoto M., Sutherland B., Tang C. // Phys. Rev. 1987. V. B35. N 3. С. 1020—1033.
- [6] Гумен Л. Н., Усатенко О. В. // ФНТ. 1990. Т. 16. № 8. С. 1043—1050.
- [7] Merlin R., Bajema K., Clarke R. et al. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. N 17. P. 1768—1770.
- [8] Van Tendeloo G., Van Heurck C., Amelinckx S. // Solid. State Commun. 1989. V. 71. N 9. P. 705—710.
- [9] Nori F., Rodriguez J. P. // Phys. Rev. 1986. V. B34. N 4. P. 2207—2211.
- [10] Kohmoto M., Kadanoff L., Tang C. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 50. N 23. С. 1870—1872.
- [11] Ostlund S., Pandit R., Schellenhuber H. J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 50. N 23. С. 1873—1876.
- [12] Penrose R. // Math. Intelligencer. 1979. N 2 (1). P. 32—37.
- [13] Kramer P., Neri R. // Acta Crystallogr. 1984. V. A40. P. 580—587.
- [14] Kohmoto M., Banavar J. R. // Phys. Rev. 1986. V. B34. N 2. С. 563—566.
- [15] Würtz D., Schneider T., Politi A. // Phys. Lett. 1988. V. A129. N 2. С. 88—92.
- [16] Bellisard J., Lima R., Testard D. // Commun. Math. Phys. 1983. V. 88. P. 207—234.

Харьковский
государственный университет

Поступило в Редакцию
11 ноября 1990 г.