

# 准周期 Fibonacci 不等能格点链的 hopping 电导<sup>\*</sup>

建文<sup>1)</sup> 颜晓红<sup>1)</sup> 方显承<sup>2)</sup>

**【摘要】** 考虑格点能的客观差异, 从 Miller-Abrahams 理论推导出一个实际应用方程. 利用实空间重正化群方法研究了 Fibonacci 准晶链的温度相关电导. 结果发现不等能格点链的 hopping 电导与等能格点链的基本相似, 但格点能的差值不同可能使电导率虚部的低频峰变成一个谷; 而且计算表明高低频电导率有两种不同的温度依赖性, 并且跃迁率、格点能、格点距离及费米能对温度相关电导有不同的影响.

**关键词** Fibonacci 准晶; 重正化群方法; 温度相关电导

**分类号** O738

准晶结构的发现<sup>[1]</sup>, 突破了固态物质分为晶态和非晶态两大类的传统观念, 为凝聚态物理开辟了一个新的研究领域. 一维 Fibonacci 准晶的实验发现<sup>[2]</sup> 及一维 Fibonacci 超晶格的成功制备<sup>[3]</sup>, 推动了对准晶物理性质广泛而深入的研究, 如对电子谱和声子谱的研究<sup>[4-6]</sup> 及一些可以直接测量的物理量如电导率等的研究<sup>[7-10]</sup>. Sutherland 等<sup>[7]</sup> 和 Roy 等<sup>[8]</sup> 利用转移矩阵方法研究了一维 Fibonacci 准晶的 Landaur 电导, 发现其电导随样品长度及能量而变化. 在假定格点能相等的条件下, Aldea 等<sup>[9]</sup> 和 Newman 等<sup>[10]</sup> 利用 Miller-Abrahams (M-A) 方程<sup>[11]</sup> 研究了一维 Fibonacci 准晶的电导率与外场频率的关系, 得到了一些有趣的结果. 最近的实验和理论都表明准晶的 DC 电导随温度及纯度而变化, 显示出不同于一般金属和晶体的反常电导行为.<sup>[12-14]</sup> 考虑格点能的客观差异, 本文研究一维 Fibonacci 准晶链的 hopping 电导及其影响因素.

## 1 格点能不等的 Miller-Abrahams 方程

考虑格点能的客观差异, 我们导出了加有外电场  $Ee^{i\omega t}$  时一维晶格链对应的 M-A 方程为

$$\left[ \frac{1}{C_n} + \frac{1}{C_{n+1}} + \frac{1-f(\epsilon_n)}{1-f(\epsilon_{n+1})} \cdot \frac{i\omega}{C_n U_n} \right] I_n = \frac{I_{n-1}}{C_n} + \frac{I_{n+1}}{C_{n+1}} + i\omega E d_n \quad (1)$$

其中  $\epsilon_n$  表示一个电子局域于格点  $n$  的格点能,  $U_n$  是无外场时单个电子从第  $n$  个格点向第  $n+1$  个格点的跃迁率,  $I_n$  和  $d_n$  如文献[10, 15] 所定义分别表示格点  $n$  到格点  $n+1$  的电流和距离, 参量  $C_n$  和费米函数均与格点能和温度有关, 分别表示为

$$C_n = e^2 f(\epsilon_n) [1 - f(\epsilon_n)] / kT, f(\epsilon_n) = [1 + e^{(\epsilon_n - \epsilon_F) / kT}]^{-1} \quad (2)$$

一维体系晶格链的电导率表达式则简化为

$$\sigma = \frac{1}{EL} \sum_n I_n d_n, \quad (3)$$

其中  $L$  为初始链的长度. 因而由此可求出各种一维体系的温度相关电导.

## 2 Fibonacci 链和重正化群方法

我们这里以 Fibonacci 准晶链为例. 该链由两类格点  $A$  和  $B$  按 Fibonacci 序列的迭代规则  $A$

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(59871044)和湖南省自然科学基金(96WLX001010)共同资助项目  
作者单位: 1) 湘潭大学物理系, 湘潭, 411105; 2) 中科院固体物理研究所, 合肥. 第一作者, 男, 1966 年生, 硕士, 讲师  
收稿日期: 1998-12-28

$\rightarrow AB$  和  $B \rightarrow A$  从一个  $A$  格点开始迭代而成, 格点  $A$  和  $B$  的参量  $\{d_n, \varepsilon_n, U_n\}$  分别选取为  $\{d_A, \varepsilon_A, U_A\}$  和  $\{d_B, \varepsilon_B, U_B\}$ . 根据格点在链中的局域环境, 将各格点重新标定为  $\alpha$ 、 $\beta$  和  $\gamma$  三类赝格点 [如图 1(a) 所示]. 每类赝格点的格点能  $\varepsilon_i$  ( $i$  为  $\alpha$ 、 $\beta$  或  $\gamma$ )、格点距离  $d_i$  ( $i$  为  $\alpha$ 、 $\beta$  或  $\gamma$ ) 和格点间赝作用系数  $\{t_A, t_B\}$  分别为

$$\begin{aligned} \varepsilon_\alpha &= \frac{2}{C_A} + \frac{i\omega}{C_A U_A}, \quad \varepsilon_\beta = \frac{1}{C_A} + \frac{1}{C_B} + \frac{1-f(\varepsilon_A)}{1-f(\varepsilon_B)} \cdot \frac{i\omega}{C_A U_A} \\ \varepsilon_\gamma &= \frac{1}{C_A} + \frac{1}{C_B} + \frac{1-f(\varepsilon_B)}{1-f(\varepsilon_A)} \cdot \frac{i\omega}{C_B U_B} \\ d_\alpha &= d_A, d_\beta = d_A, d_\gamma = d_B, t_A = \frac{1}{C_A}, t_B = \frac{1}{C_B} \end{aligned} \quad (4)$$

其中参量  $C_A$  和  $C_B$  为方程(2)中分别与格点能  $\varepsilon_A$  和  $\varepsilon_B$  对应的  $C_n$  值. 为了方便, 将每一类赝格点对应的 M-A 方程重写为

$$\begin{aligned} \varepsilon J_n &= t_A I_{n-1} + t_A I_{n+1} + i\omega E d_\alpha, n \in \alpha \\ \varepsilon J_n &= t_A I_{n-1} + t_B I_{n+1} + i\omega E d_\beta, n \in \beta \\ \varepsilon J_n &= t_B I_{n-1} + t_A I_{n+1} + i\omega E d_\gamma, n \in \gamma \end{aligned} \quad (5)$$

至此赝格点链及对应的方程与文献[10]中的格点链和方程具有相同的形式, 因而可用该文献中类似的重正化群方法求出该体系的电导率.

在每一次重正化过程中链中的  $\beta$  型格点将被抽杀掉, 并将原格点链重正化为一具有相似结构的子链 [如图 1(b) 所示]. 重正化参量  $\{\varepsilon_i^{(n)}, d_i^{(n)}, t_A^{(n)}\}$  ( $i$  为  $\alpha$ 、 $\beta$  或  $\gamma$ ) 一样地满足文献[10]中递推关系(11)式. 经过无穷次重正化后, 该链重正化为一简周期链, 从而可获得该链的电导率<sup>[10, 16]</sup>

$$\sigma = \frac{i\omega}{L} \left[ \frac{N_\alpha [d_\alpha^{(\infty)}]^2}{\varepsilon_\alpha^{(\infty)} - 2t_A^{(\infty)}} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{N_\beta^{(n)} [d_\beta^{(n)}]^2}{\varepsilon_\beta^{(n)}} \right], \quad (6)$$

其中  $N_\alpha$  为简周期链的  $\alpha$  型格点数,  $N_\beta^{(n)}$  是第  $n$  次重正化中抽杀的型格点数.

### 3 数值计算

作为特例, 我们根据 Fibonacci 序列的排列规则经过 24 次迭代产生一具有 121 393 个格点的有限链, 并用它近似表示 Fibonacci 准晶链, 从而计算了一类格点能不同的 Fibonacci 链的 hopping 电导及其影响因素.

图 2 中的图(a)和图(b)分别示出了格点能差值不同时电导率(任意单位)的实部和虚部随频率的变化关系. 选取参量  $\{U_A, U_B, d_A, d_B\} = \{1, 0.01, 1, 1\}$ <sup>[10]</sup>, 温度  $T$  为 300 K, 而参量  $\{\varepsilon_A, \varepsilon_B, \varepsilon_\gamma\}$  在图 2(a)和图 2(b)分别取为  $\{12, 1.5, 10\}$  meV 和  $\{12, 11, 10\}$  meV, 频率以  $U_A$  为单位. 从图 2(a)中可以看出, 对某些格点能, 虽然差值不同, 该体系的 hopping 电导与 Newman 等人<sup>[10]</sup>得出的等能格点链的基本相似. 不过, 当改变格点能的差值时, 电导率虚部的低频峰可能变成一个谷, 并伴随一定的频移, 如图 2(b)所示.

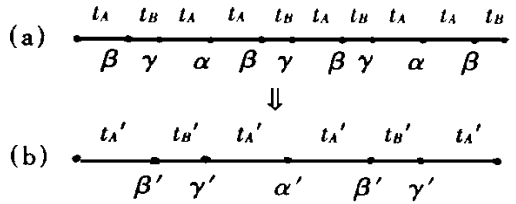


图 1 Fibonacci 链和重正化过程图示

a) 一维 Fibonacci 链; b) 重正化的 Fibonacci 链

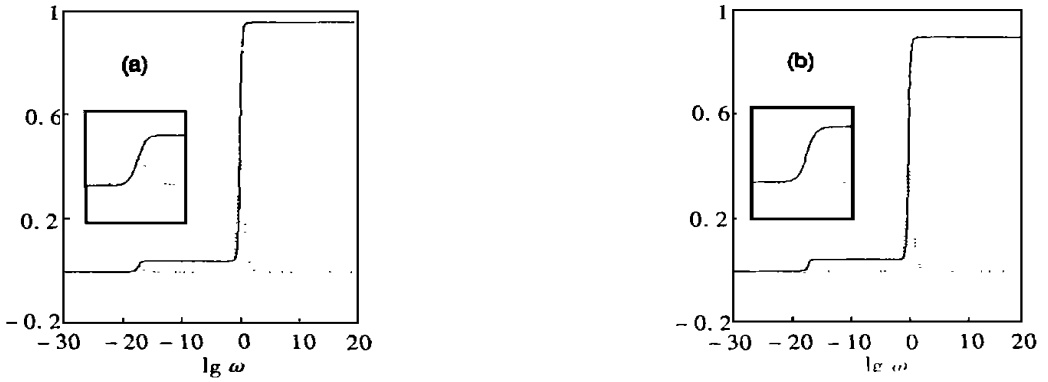


图2 电导率(任意单位)的实部和虚部随频率的变化  
 Fibonacci 链格点数为 121 393 个, 参量  $\{U_A, U_B, d_A, d_B\} = \{1, 0.01, 1, 1\}$ ,  
 温度  $T$  为 300 K, 参量在图 2(a) 和图 2(b) 分别取为  $\{12, 11, 5, 10\}$  meV 和  
 $\{12, 11, 10\}$  meV, 频率以  $U_A$  为单位, 实线和虚线分别对应电导率实部和虚部

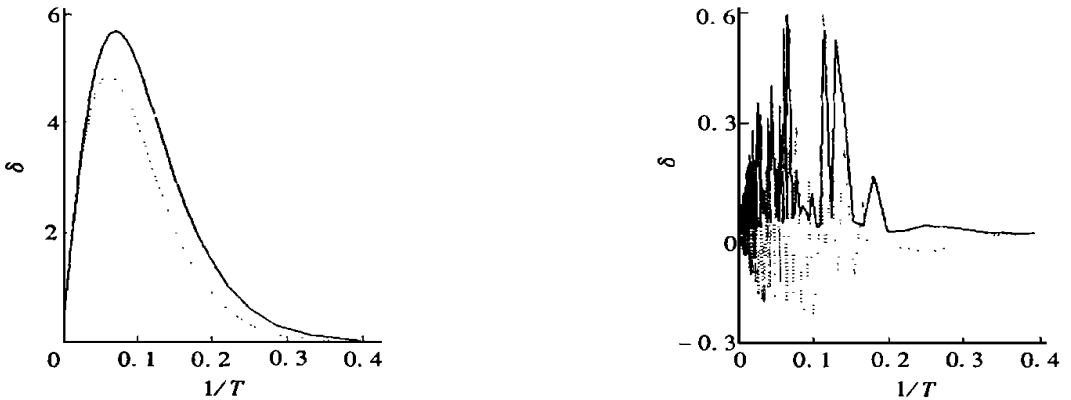


图3 电导率(任意单位)的实部和虚部随温度倒数的变化  
 图(a)和(b)中频率分别取为 1 和  $10^{-18}$  (以  $U_A$  为单位), 其它各参量与图 2(a) 一样,  
 实线和虚线分别对应电导率实部和虚部

图 3 中的图 (a) 和图 (b) 分别示出了频率为 1 和  $10^{-18}$  时电导率(任意单位)的实部和虚部随温度倒数  $1/T$  的变化关系. 选取参量  $\{\varepsilon_A, \varepsilon_B, \varepsilon_F\} = \{12, 11, 5, 10\}$  meV 和  $\{U_A, U_B, d_A, d_B\} = \{1, 0.01, 1, 1\}$ . 可以看出高低频电导率具有完全不同的温度依赖性. 在高频  $\omega = 1$  时, 电导率的实部及虚部随温度单调变化[如图 3(a)所示], 类似于掺杂锗(Ge)半导体的 dc 电导<sup>[17]</sup>. 但在低频  $\omega = 10^{-18}$  时电导率随温度变化出现激烈振荡, 实部呈现复杂的峰值结构并存在明显的断沟, 而虚部的波峰和波谷却交替出现. 随着温度降低电导率实部和虚部在低温区的振荡均趋于平缓, 其值趋近于零[如图 3(b)所示]. 计算表明电导率随  $\varepsilon_F$  变化也呈现类似的变化, 因而电导率随温度的变化可能与体系的谱带结构相关<sup>[18]</sup>.

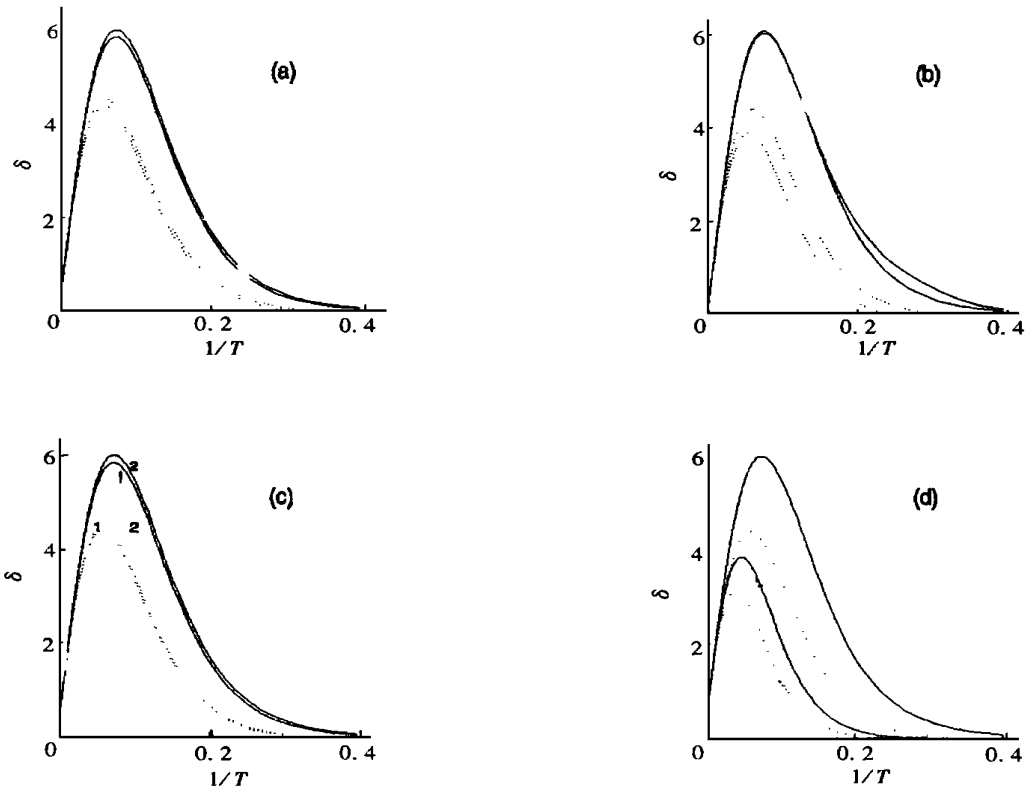


图 4 各因素对温度相关电导率(任意单位)的影响

变量的改变分别是(a)  $U_B: 10^{-2} \rightarrow 0.5 \times 10^{-2}$ , (b)  $11.5 \rightarrow 11.2 \text{ meV}$ , (c)  $d_B: 1 \rightarrow 0.9$ , (d)  $\epsilon_F: 10^{-9} \rightarrow 9 \text{ meV}$   
 各图中相应的其它各参量与图 3(a) 一样. 实线和虚线分别对应电导率实部和虚部,  
 曲线边的数字 1 和 2 分别对应参量变化前后的电导率

图 4(a) ~ (d) 中, 分别只改变了图 3(a) 中的一个参量如  $U_B$ 、 $\epsilon_b$ 、 $d_B$  或  $\epsilon_F$ , 从而考察这些因素对温度相关电导的影响. 各图中实线和虚线分别对应电导率的实部和虚部, 曲线边所标数字 1 和 2 分别对应参量变化前后的电导率, 各图中变量的改变分别是(a)  $U_B: 10^{-2} \rightarrow 0.5 \times 10^{-2}$ , (b)  $\epsilon_B: 11.5 \rightarrow 11.2 \text{ meV}$ , (c)  $d_B: 1 \rightarrow 0.9$ , (d)  $\epsilon_F: 10^{-9} \rightarrow 9 \text{ meV}$ . 从图中可以看出, 当这些因素改变时电导率在高温和低温区基本上不受各因素的影响, 但在中间温度各因素的影响明显不同: 当  $U_B$  减少时, 电导率实部有所减少虚部有所增加 [如图 4(a) 所示]; 当  $\epsilon_B$  减少时, 电导率实部有所增加虚部有所减少 [如图 4(b) 所示]; 当  $d_B$  减少时, 电导率实部和虚部均有所增加 [如图 4(c) 所示]; 当  $\epsilon_F$  减少时, 电导率实部和虚部均有所减少, 并且峰位明显左移 [如图 4(d) 所示]. 同样, 我们也计算了这些因素对图 3(b) 中  $\omega = 10^{-18}$  时的温度相关电导的影响, 结果表明这些因素对低频峰值结构也有不同的调制作用.

## 参 考 文 献

- 1 Schedtman D, Blech I, Gratias D, et al. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. Phys Rev Lett, 1984, 53: 1 951
- 2 He L X. One-dimensional quasicrystal in rapidly solidified alloys. Phys Rev Lett, 1988, 61: 1 116
- 3 Medin R. Quasiperiodic Heterostructures. Phys Rev Lett, 1985, 55: 1 768
- 4 Yan X H. Renormalization-group of generalized Fibonacci lattice. Phys Rev, 1986, 50: 1 870
- 5 颜晓红, 段祝平, 张立德, 等. 纳米结构体系的物理性质: 重正化群研究. 湘潭大学自然科学学报, 1998, 20(3) 72~ 77
- 6 Ostlund S, Pandit R. Renormalization-group analysis of the discrete quasiperiodic Schrodinger equation. Phys Rev B29: 1984, 1 394
- 7 Sutherland B, Kohmoto M. Resistance of an one-dimensional quasicrystal: Power law growth. Phys Rev, 1987, B36: 5 877
- 8 Roy L, Arif Khan. Landauer resistance of thue-Morse and fibonacci lattices and related issues. Phys Rev, 1994, B49: 14 979
- 9 Aldea A. AC conductivity of a disordered chain: real-space renormalization group approach. J Phys, 1986, 19: 4 055~ 4 062. Aldea A et al. Hopping conduction on Aperiodic chains. Phys Rev Lett, 1988, 60: 1 672
- 10 Newman M E J. Hopping Conductivity of the Fibonacci-chain quasicrystal. Phys Rev, 1991, B43: 1 183
- 11 Miller A, Abrahams E. Impurity conduction at low concentrations. Phys Rev, 1954, 120: 745
- 12 Zhang D L. Hall effect in a single two-dimensional quasicrystal. Phys Rev, 1990, B41: 8 557
- 13 Martin S, Hebard A F. Transport properties of and decagonal quasicrystals. Phys Rev Lett, 1991, 67: 719
- 14 Roche S. Electronic transport properties of quasicrystals. J Math Phys, 1997, 38(4): 1 794
- 15 丁建文, 颜晓红, 方显承, 等. 纳米结构链的 hopping 电导. 物理学报, 1999, 48(2): 314
- 16 Dulea M, Aldea A. Comment on 'Hopping Conductivity of the Fibonacci-chain quasicrystal'. Phys Rev, 1992, B46: 8 642
- 17 Debye P P, Conwell E M. Electrical properties of N-type Germanium, Phys Rev, 1992, 93: 693
- 18 Tsunetsugu H, Ueda K. Conductance of a Penrose tiling. Phys Rev, B38: 1988, 1 0109

## The Hopping Conductivity of the Fibonacci Quasilattice Dence of the Correlation Fluctua

*Ding Jianwen      Yan Xiaohong      Fang Xiancheng*

(Department of Physics, Xiangtan University, Xiangtan, 411105, China)

**【Abstract】** Considered site-energy differences, we deduce a practical equation from the Miller-Abrahams' theory and the temperature-dependent conductivity of Fibonacci lattice is investigated by a real-space renormalization-group approach. It is found that the hopping conductivity property of the chain with different site-energy is similar to that of the iso-energy site chain, however, the site-energy differences can cause the transformations between peak and valley of the imaginary conductivity at low frequency. Furthermore, our results show that there exist two types of temperature-dependent conductivity at low- and high-frequency, and transition rate, site-energy, Fermi-energy and distance between sites have different influences on the temperature-dependent conductivity.

**Subject words** Fibonacci quasilattice, renormalization-group approach, temperature-dependent conductivity