

в фазах II и III, III'. В фазе II в обоих кристаллах при $T_1=50$ К возгорается мощный поляризованный с диагональными компонентами тензора (xx , yy , zz) низкочастотный пик с частотой $\nu=8.2$ см $^{-1}$. На фазовый переход в основном реагирует низкочастотный спектр, связанный с внешними колебаниями тетраэдрических анионов (MoO_4^{2-}) (увеличивается количество линий в спектрах). Естественно предположить, что фазовый переход в фазу II сопровождается перебросом в точку Г зоны Бриллюэна ненулевого вектора, направление которого в прямом пространстве совпадает с параметром решетки вдоль наиболее слабой связи в кристалле. Отметим, что дисперсия ветвей, отвечающих внутренним колебаниям тетраэдров вдоль такого направления, в слоистом кристалле практически отсутствует.

В фазе I возбуждение с частотой 8.2 см $^{-1}$ соответствует границе зоны и отвечает, по-видимому, антифазным смещениям слоев. Столь низкие частоты являются редкостью даже для сильно анизотропных кристаллов (из литературы можно привести пример графита [5]).

На рис. 2 показано изменение спектра внутренних колебаний при фазовом переходе II \rightarrow III, III'. Спектр сильно видоизменяется и в низкочастотной области (в частности, исчезает возбуждение 8.2 см $^{-1}$). Увеличение количества линий в спектрах позволяет предположить удвоение элементарной ячейки фазы I, однако, по-видимому, параметр перехода в фазы III, III' имеет другую физическую реализацию и связан со смещениями катионной подрешетки редкоземельного металла. Учитывая изложенные результаты, можно сделать предположение о «триггерном» механизме фазового перехода в фазы III, III' в чистом и примесном кристаллах. Отметим также, что наблюдаемое возбуждение с частотой 8.2 см $^{-1}$ хорошо коррелирует по температурному диапазону с «плато» теплопроводности $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$, обнаруженным в [6].

Список литературы

- [1] Клевцов П. В., Клевцова Р. Ф. // Журн. структ. хим. 1977. Т. 18. № 3. С. 419—439.
- [2] Нестеренко Н. М., Кутько В. И., Звягин А. И. // ФНТ. 1978. Т. 4. № 9. С. 1192—1196.
- [3] Гурскас А. А., Нестеренко Н. М., Попов В. П., Соколов А. Г. // Тез. докл. IV Всес. школы-семинара «Сегнетоэластика». Днепропетровск, 1988. С. 195—197.
- [4] Гурскас А. А., Попов В. П., Соколов А. Г. // Тез. докл. IV Всес. совещ. «Методы и приборы для точных дилатометрических исследований материалов в широком диапазоне температур». Л., 1988. С. 51—52.
- [5] Wakabayashi N. // Nuovo cim. 1977. V. 38. N 12. P. 256.
- [6] Andres Э. Е., Волчок И. В., Звягин А. И., Кокшанев В. Б., Старцев С. В. // ФНТ. 1985. Т. 11. № 7. С. 769—774.

Физико-технический институт
низких температур АН УССР
Харьков

Поступило в Редакцию
6 сентября 1988 г.

УДК 537.21

Физика твердого тела, том 31, № 5, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 5, 1989

СОПРОТИВЛЕНИЕ КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКОГО КРИСТАЛЛА

A. M. Сатанин

В последнее время большой интерес вызывают новые кристаллические структуры — квазикристаллы. Подобные структуры по ряду физических свойств занимают промежуточное положение между неупорядоченными системами и кристаллами с точной трансляционной симметрией. Удобным объектом для экспериментального изучения электронных свойств одно-

мерных систем является сверхрешетка. В работе [1] синтезирована квазипериодическая сверхрешетка, которая получена на основе чередующихся слоев GaAs и AlAs. Было изучено рентгеновское и рамановское рассеяние на синтезированной структуре. Особый интерес вызывает исследование электронных свойств одномерных квазикристаллов [2]. Плотность состояний и волновая функция в квазипериодических решетках изучены в работах [3–5], где было показано, что электронный спектр имеет вид канторовского множества нулевой меры, а волновая функция сосредоточена на определенном множестве узлов и не является локализованной или делокализованной в обычном смысле.

При исследовании электронных свойств важное значение имеет изучение поведения сопротивления квазикристалла в зависимости от его параметров и длины. В данной работе получено и исследовано рекурсионное уравнение непосредственно для сопротивления квазикристалла, построенного по алгоритму Фибоначчи.

Рассмотрим квазикристалл, состоящий из блоков, в каждом из которых потенциальная энергия принимает значения V_A или V_B в соответствии с алгоритмом Фибоначчи $|V_A|V_B|V_A|V_AV_B|V_AV_BV_A|\dots$. Будем интересоваться сопротивлением такого кристалла, полученного на шаге n алгоритма. Весь кристалл считается замкнутым в цепь с помощью идеальных проводников. Волновую функцию слева и справа от элементарного блока (типа A или B) можно связать с помощью трансфер-матрицы

$$T = \begin{pmatrix} a^3 & * \\ * & * \end{pmatrix}, \det(T) = 1.$$

Для рассматриваемой структуры она подчиняется рекурсионному уравнению

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

Согласно формуле Ландауэра, безразмерное сопротивление выражается через T соотношением $\rho_n = (y_n - 1)/2$, $y_n = \text{Tr}(T_n^+ T_n)/2$. Рекурсионное уравнение удобно записать для величины y_n и двух вспомогательных величин $x_n = \text{Tr}(T_n^+)/2$ и $z_n = \text{Tr}(T_{n+1}^+ T_n^{-1} + \text{c.c.})/4$. Используя (1) и соотношение $T_n^{-1} + T_n = 2x_n I$, нетрудно получить

$$x_{n+1} = 2x_n x_{n-1} - x_{n-2}, \quad (2)$$

$$y_{n+1} = 4x_n^2 y_{n-1} + y_{n-2} - 4x_n z_{n-2}, \quad (3)$$

$$z_{n+1} = 2x_{n+1} z_n + z_{n-2} - 2x_n y_{n-1}. \quad (4)$$

Уравнение (2) было ранее исследовано в [3, 5]. Это дискретное отображение имеет инвариант $I = x_n^3 + x_{n-1}^3 + x_{n-2}^3 - 2x_n x_{n-1} x_{n-2}$, величина которого определяет предельные свойства (2) при $n \rightarrow \infty$. Уравнения (3) и (4) образуют систему «неавтономных» отображений, динамика которых зависит от поведения x_n .

Некоторые общие выводы относительно поведения решений (2)–(4) можно сделать вблизи фиксированной точки $x=y=z=1$. Линеаризованное уравнение (2) имеет общее решение $x_n = 1 + c_1 (-1)^n + c_2 \tau^{2n} + c_3 \tau^{-2n}$, где $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2$, $\tau < 1$. Частное решение, соответствующее растущему решению $c_3 \tau^{-2n}$, для сопротивления имеет вид $\rho_n \approx 4c_3 \tau^{-2n}$. При больших n (если $x_n \gg 1$) $\ln x_n \approx B_1 \tau^n + B_2 \tau^{-n}$. Согласно (3), сопротивление экспоненциально возрастает $\rho_n \approx \exp\{2B_2 \tau^{-n}\}$.

Рекурсионные уравнения позволяют провести численный расчет сопротивления во всей области изменения параметров. Ввиду резкого изменения ρ_n удобно проследить за изменением длины локализации, введенной по аналогии с неупорядоченными системами, соотношением $l_n^{-1} = -\ln(2\rho_n + 1)/n$.

В качестве примера приведем результаты расчета l_n для модели сильной связи, в которой узельные потенциалы подчиняются алгоритму Фибоначчи. За единицу энергии примем половину ширины разрешенной зоны (при $V_A = V_B = 0$), за единицу длины — постоянную решетки; инвариант

$I=1+(V_A-V_B)^2/4$. Зависимость длины локализации от энергии вблизи центра зоны приведена на рис. 1 для двух решеток, состоящих из 233 (1) и 4181 (2) узлов, при одном значении инварианта $I=1.04$. На рис. 2 приведена зависимость длины локализации от I при $\epsilon=\epsilon_F$ (в центре зоны). Обозначения те же, что и на рис. 1.

Отметим, что длина локализации и сопротивление резко меняются при изменении энергии. Такое поведение имеет место для длинных цепочек и будет приводить к пикам тока при малом сме-

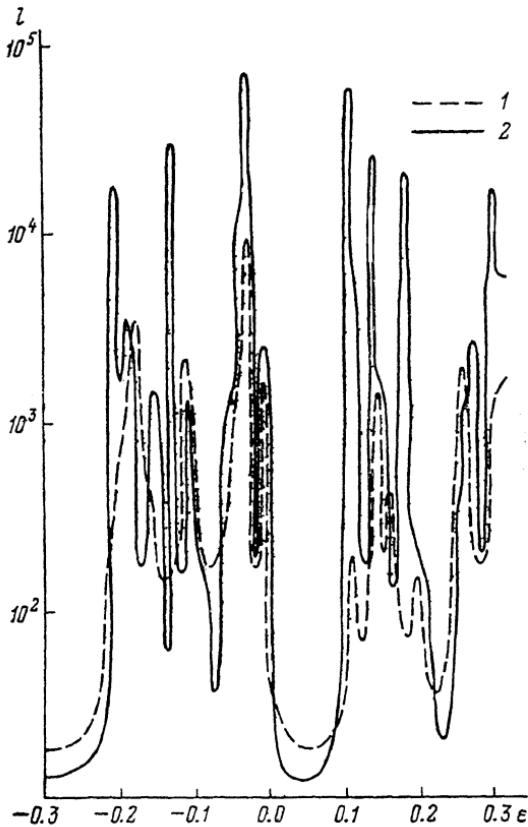


Рис. 1.

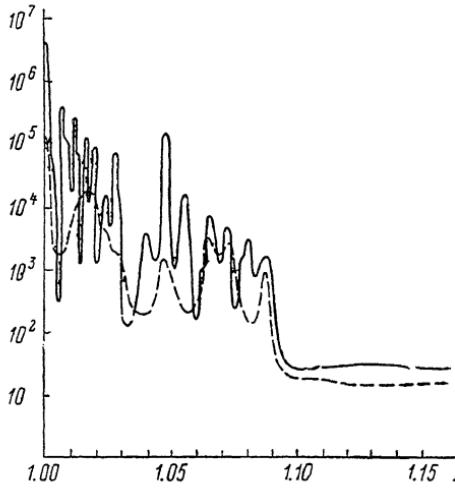


Рис. 2.

щении уровня Ферми. Этим квазикристалл отличается от неупорядоченного, где в силу самоусредняемости $l(\epsilon)$ для длинных цепочек монотонно зависит от энергии. Немонотонная зависимость l от I обусловлена тем, что при изменении амплитуд потенциала на уровне Ферми могут оказываться состояния, у которых масштаб волновой функции существенно различается.

Список литературы

- [1] Merlin R., Bajema K., Clarke R. et al. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. N 17. P. 1768–1770.
- [2] Sokoloff J. // Phys. Rept. 1985. V. 126. N 4. P. 189–244.
- [3] Kohmoto M., Kadanoff L. P., Tang C. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 50. N 16. P. 1870–1874.
- [4] Odagaki T., Friedman L. // Sol. St. Comm. 1986. V. 57. N 12. P. 915–919.
- [5] Калугин П. А., Китаев Л. Ю., Левитов Л. С. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 2 (8). С. 692–701.

Горьковский государственный
университет им. Н. И. Лобачевского
ГИФТИ
Горький

Поступило в Редакцию
12 сентября 1988 г.