

Quasicristaux sous champ magnétique

Ariane SORET¹
encadrée par Jean-Noël Fuchs^{2,3} et Julien Vidal³

¹ENS Cachan, France ; ² Laboratoire de Physique des Solides, UMR 8552 du CNRS et de l'Université Paris-Sud, Orsay, France ; ³ Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, UMR 7600 du CNRS et de l'Université Pierre et Marie Curie, Paris, France

Janvier - Mars 2016



Contents

1	Introduction	3
2	Pavages quasipériodiques	4
2.1	Construction	4
2.1.1	Méthode de coupe et projection	4
2.1.2	Méthode par inflation et déflation	5
2.2	Le pavage octogonal	6
2.2.1	Construction	6
2.2.2	Quelques remarques sur le pavage octogonal	8
3	Étude numérique du pavage octogonal, à champ nul et sous champ magnétique	8
3.1	Construction numérique	8
3.2	Modèle des liaisons fortes	9
3.2.1	Champ nul	9
3.2.2	En présence de champ magnétique	10
3.3	Étude spectrale	12
3.3.1	Papillon en conditions aux bords ouverts	12
3.3.2	Papillon en conditions aux bords périodiques	12
3.3.3	Densité d'états à champ nul	14
3.3.4	Diagramme de Wannier	14
3.4	Masse effective	15
3.4.1	Analogie avec les niveaux de Landau	15
3.4.2	Tenseur de masse effective	16
3.5	Susceptibilité magnétique orbitale	17
4	Discussion	19
4.1	Retour sur la masse effective	19
4.2	Densité d'état et susceptibilité magnétique orbitale	19
4.3	Niveaux de Landau	20
4.4	Structure du papillon et nombres d'Octonacci	20
4.5	Diagramme de Wannier - Nombres de Hall	20
5	Conclusion et perspectives	22

1 Introduction

La découverte, en 1984, par Shechtman, Blech, Gratias et Cahn, d'une "phase métallique ayant un ordre positionnel à longue distance et aucune symétrie de translation" [1], a bouleversé la communauté scientifique et a fourni le cadre d'une nouvelle et riche théorie, tant en mathématiques qu'en physique. Il avait été admis pendant plusieurs siècles que les cristaux étaient nécessairement périodiques, c'est-à-dire obtenus par répétition dans l'espace d'une maille élémentaire. Par ailleurs, on peut démontrer [2] que les seules symétries de rotation compatibles avec une structure périodique (dans le plan ou dans l'espace) sont celles d'ordre 1, 2, 3, 4 et 6. Fondée sur cet axiome et ce théorème, la théorie de la cristallographie donne la liste exhaustive de tous les systèmes cristallins (ou réseaux de Bravais) possibles ; il en existe 5 en $2D$, et 14 en $3D$ [3], [4]. En revanche, il est impossible de remplir périodiquement le plan ou l'espace avec une structure ayant une symétrie d'ordre 5, comme le pentagone ou l'icosaèdre. La découverte, de Shechtman et al., d'un alliage d'aluminium et de manganèse présentant une symétrie icosaédrique, et n'ayant donc aucune périodicité spatiale, mais présentant des pics de Bragg fins, comme pour un cristal, a donc profondément dérouté la communauté scientifique de l'époque. La notion de "cristal" a ensuite été étendue, pour désigner les solides ayant un diagramme de diffraction discret ; la symétrie d'un tel solide est alors donné par les symétries de son diagramme de diffraction [2]. Parmi les exemples connus de structures quasipériodiques figurent notamment le pavage de Penrose - construction mathématique à 2 dimensions, découverte par R. Penrose dans les années 1970 (fig. 2.a) - la séquence de Fibonacci (1D), le pavage de Rauzy (2D) (fig. 2.b) et le pavage octogonal (2D) (fig. 4).

Au-delà de leur géométrie très intéressante, les quasicristaux présentent expérimentalement des propriétés différentes de celles attendues des métaux qui les constituent (pour une revue, voir [4], chap. 6). La conductivité thermique de AlPdMn ou AlCuFe , par exemple, est de deux ordres de grandeur inférieure à celle de l'Al pur. Ceci indique que la structure géométrique de ces matériaux a des conséquences profondes sur leur propriétés physiques et a motivé de nombreux travaux sur ces structures depuis les années 1980. Pour citer d'autres comportements anormaux : les quasicristaux sont très cassants à basse température et à température ambiante, mais deviennent super-élastiques proche du point de fusion ; ils présentent aussi une conductivité optique anormale. Les propriétés de transport électrique ont fait l'objet de nombreux travaux [5]: l'évolution d'un paquet d'onde, décrit par la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$, est en effet caractérisée par le déplacement moyen $\Delta \mathbf{r}(t) = \sqrt{\int_{\text{espace}} \mathbf{r}^2 |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}} \sim t^\beta$, avec $\beta < 1$. Cet exposant est plutôt bien compris pour le cas 1D mais moins pour autres dimensions. Enfin, le spectre en énergie d'un système d'électrons évoluant dans un quasicristal a suscité beaucoup d'intérêt et continue d'être étudié. Dans le cas des cristaux (périodiques), la structure périodique est à l'origine de l'ouverture de gaps dans le spectre en énergie [3]. Pour les quasicristaux, il n'y a pas de structure périodique dans l'espace réel, et l'on observe, numériquement [6] et expérimentalement [7], l'apparition de pseudo-gaps.

En parallèle, l'étude des cristaux sous champ magnétique fait également toujours l'objet de nombreux travaux, notamment avec la découverte de l'effet Hall quantique entier. Si les électrons sont placés dans un cristal ou un quasicristal, la compétition entre l'effet du champ magnétique et le potentiel lié à la structure du réseau donne naissance à un spectre énergétique complexe. Pour le réseau carré, on obtient par exemple le papillon de Hofstadter [8]. Si le cas d'un cristal périodique est bien compris sur le plan théorique, il reste beaucoup de questions ouvertes dans le cas des structures quasipériodiques.

L'objet de ce stage est d'étudier les propriétés spectrales de pavages quasipériodiques sous champ magnétique. On se concentrera sur le cas du pavage octogonal. Contrairement à la plupart des autres quasicristaux étudiés, celui-ci provient de la coupe et projection d'une structure périodique en dimension 4 vers un plan en dimension 2 (nous détaillerons ce point par la suite): on dit qu'il est de codimension 2, alors que les pavages de Rauzy (ayant déjà été étudié par mes encadrants) ou la séquence de Fibonacci, par exemple, sont de codimension 1. Or, il semble, empiriquement, que la codimension joue un rôle déterminant dans les propriétés spectrales et de transport électronique ; l'étude du pavage octogonal devrait apporter des éléments nouveaux pour la compréhension des quasicristaux.

Dans un premier temps, nous introduirons les notions mathématiques nécessaires pour comprendre la géométrie des quasicristaux, et donnerons une méthode de construction de ces structures.

Ensuite, nous présenterons les résultats de l'étude numérique des propriétés spectrales du pavage octogonal, en l'absence de champ magnétique puis en présence de champ magnétique. Dans une dernière partie, nous discuterons les résultats numériques obtenus, les comparerons aux résultats connus et tenterons d'apporter une interprétation théorique aux observations numériques.

2 Pavages quasipériodiques

Nous introduisons dans ce chapitre quelques éléments mathématiques nécessaires à la compréhension des structures quasipériodiques, rappelons quelques résultats connus et présentons en détail le pavage octogonal, sujet central du stage.

2.1 Construction

Il convient, tout d'abord, de comprendre comment construire une structure quasipériodique.

2.1.1 Méthode de coupe et projection

La méthode de coupe et projection est l'approche la plus naturelle pour décrire un pavage quasipériodique, et qui donne une intuition permet de comprendre leur géométrie particulière. Le principe est de projeter une structure périodique de l'hyper-espace de dimension D sur un sous-espace de dimension $d < D$ engendré par des vecteurs de coordonnées irrationnelles. On parle alors de projection $D \rightarrow d$. Plus précisément, il s'agit de projeter l'intersection de \mathbb{Z}^D avec le volume engendré lorsque l'hypercube unité de l'hyper-espace de dimension D parcourt un sous-espace E_{\parallel} de dimension d (zone de sélection), sur ce même espace E_{\parallel} , parallèlement à un espace complémentaire E_{\perp} ; les noeuds du pavage sont définis par la projection des points de coordonnées entières, et les arêtes par les projections des arêtes du réseau hypercubique de dimension D .

Illustrons la méthode sur un exemple $2 \rightarrow 1$: la séquence de Fibonacci. Considérons un réseau carré, et traçons la droite passant par l'origine O , de pente $\tau^{-1} = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ (l'inverse du nombre d'or $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$). Cette droite définit l'espace E_{\parallel} sur lequel nous allons projeter la zone de sélection. Traçons maintenant la droite passant par O , orthogonale à E_{\parallel} ; elle définit l'espace E_{\perp} . Maintenant, considérons la tranche du réseau carré obtenue en faisant glisser le carré unité le long de E_{\parallel} : il s'agit de la zone de sélection ; nous avons réalisé l'étape de coupe.

Remarque : Il ne faut pas garder le bord supérieur de la tranche, pour la construction ; le volume projeté est donc fermé sur le bord contenu dans E_{\parallel} , et ouvert sur l'autre bord.

Projetons maintenant les points de coordonnées entières, ainsi que les arêtes reliant ces points, sur E_{\parallel} , parallèlement à E_{\perp} . On obtient une séquence $1D$ de segments de deux longueurs différentes, que nous noterons A et B . La séquence obtenue est quasipériodique.

Pour s'en convaincre, reconstruisons cette séquence à partir d'approximants périodiques S_n : au lieu de considérer une droite de pente $\tau^{-1} = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ pour E_{\parallel} , prenons une droite de pente rationnelle $\frac{p_n}{q_n}$, où $p_n = F_n$ et $q_n = F_{n+1}$ sont deux nombres successifs de la suite de Fibonacci, définie par récurrence par :

$$\begin{cases} F_1 = 1 \\ F_2 = 1 \\ F_{n+1} = F_n + F_{n-1} \end{cases}$$

et dont le rapport tend vers $\tau^{-1} : \frac{p_n}{q_n} \rightarrow_{n \rightarrow \infty} \tau^{-1}$. Le cas $\frac{p_n}{q_n} = \frac{3}{5}$ est illustré fig. 1. On reprend maintenant la construction décrite précédemment. Il est évident que la séquence S_n obtenue est périodique : en effet, lorsque l'angle inférieur gauche du carré atteint le point de coordonnées $(q_n, p_n) \in E_{\parallel}$, on se retrouve dans la même configuration que lorsque le carré était à l'origine, et la séquence tracée entre O et (q_n, p_n) se répète. Cette séquence a pour longueur $L_n = F_n + F_{n+1}$. Les premières séquences périodiques pour $\frac{p_n}{q_n} = 1, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{3}{5}$ sont :

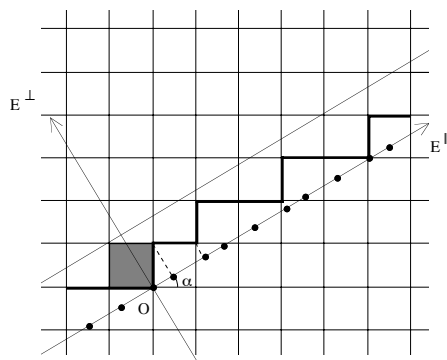


Figure 1: Construction d'un approximant rationnel de la séquence de Fibonacci ; le carré gris est translaté le long de la droite de pente $\frac{3}{5}$ et définit ainsi la zone de sélection ; les points sélectionnés et les arêtes les reliant sont projetés sur E_{\parallel} parallèlement à E_{\perp} . Source : [6]

$$\begin{aligned}
 n = 1 & : AB \\
 n = 2 & : ABA \\
 n = 3 & : ABAAB \\
 n = 4 & : ABAABABA
 \end{aligned}$$

On remarque que les séquences S_n vérifient la relation de récurrence : $S_{n+1} = [S_n, S_{n-1}]$, où $[S_n, S_{n-1}]$ est la concaténation des deux séquences S_n et S_{n-1} . Par passage à la limite $n \rightarrow \infty$, on obtient une séquence quasipériodique.

De façon similaire, on peut construire une infinité de pavages quasipériodiques. Par exemple, pour les $2 \rightarrow 1$, n'importe quelle droite de pente irrationnelle générera un pavage quasipériodique. Parmi les plus connus, outre la séquence de Fibonacci, on retrouve les pavages de Penrose (de type $5 \rightarrow 2$) (fig. 2.a) et de Rauzy (de type $3 \rightarrow 2$) (fig. 2.b).

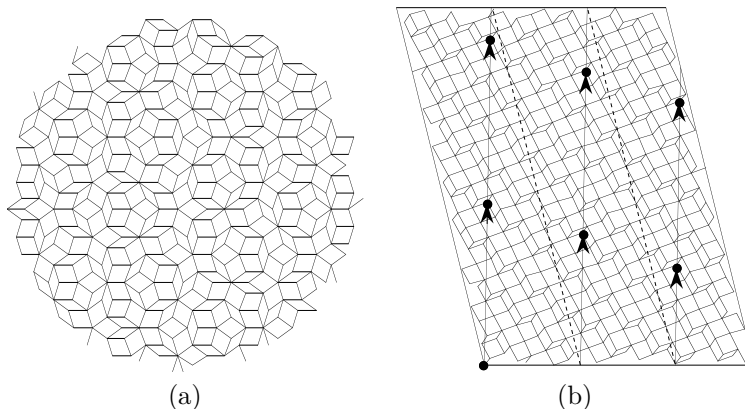


Figure 2: (a) Fragment du pavage de Penrose, $5 \rightarrow 2$. Source : [6]. (b) Fragment du pavage de Rauzy, $3 \rightarrow 2$. Source : [6].

2.1.2 Méthode par inflation et déflation

Les structures quasipériodiques peuvent aussi être construites par la méthode dite d'inflation et déflation (ou encore méthode de substitution et dilatation, bien que cela ne soit pas le nom officiel),

qui consiste à construire de façon itérative le pavage. Il s'agit, à chaque étape, de remplacer les tuiles élémentaires qui constituent la structure par un nouveau motif de tuiles ("inflation", ou "substitution"), puis de réajuster la taille des nouvelles tuiles obtenues pour retrouver des tuiles de la même taille que celles de départ ("déflation" ou "dilatation").

Pour la séquence de Fibonacci, les règles d'inflation sont :

$$\begin{aligned} A &\rightarrow AB \\ B &\rightarrow A \end{aligned}$$

Après cette opération, on obtient une séquence plus grande d'un facteur asymptotiquement égal au nombre d'or $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$; en effet, on passe une séquence de longueur F_n à une séquence de longueur F_{n+1} , et $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{F_{n+1}}{F_n} = \tau$.

Le cas du pavage octogonal est illustré fig. 3. On peut montrer [9] que cette construction donne une structure aperiodique.

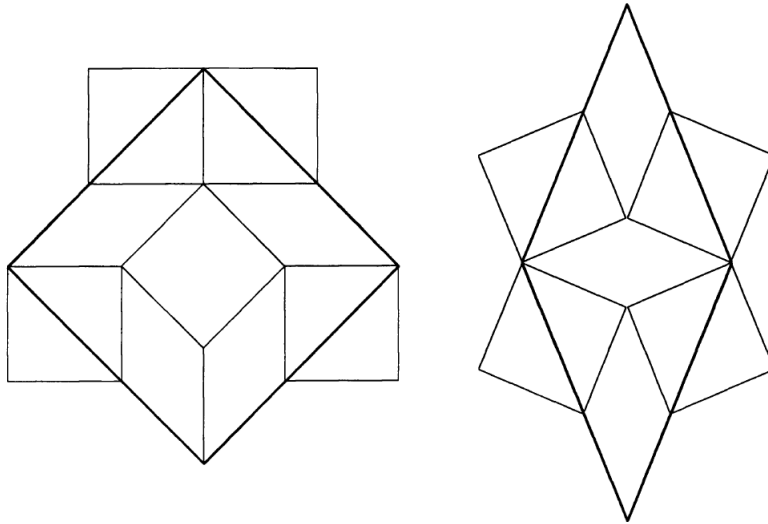


Figure 3: Règles d'inflation et déflation pour le pavage octogonal ; un carré est transformé suivant le schéma de gauche, un losange suivant le schéma de droite. Les traits gras donnent les tuiles avant substitution, les traits fins celles après l'inflation. Source :[2]

2.2 Le pavage octogonal

2.2.1 Construction

Détaillons maintenant la procédure de construction par coupe et projection pour le pavage octogonal. E_{\parallel} et E_{\perp} sont définis à partir de la matrice suivante, dite d'inflation :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

M a deux valeurs propres deux fois dégénérées : $\lambda_{+,-} = 1 \pm \sqrt{2}$. E_{\parallel} est le sous espace propre associé à $\lambda_+ = 1 + \sqrt{2}$, et E_{\perp} celui associé à $\lambda_- = 1 - \sqrt{2}$. On la réécrit :

$$M = \lambda_+ P_+ + \lambda_- P_-$$

où P_+ et $P_- = Id - P_+$ sont les matrices de projection sur les sous-espaces propres E_{\parallel} et E_{\perp} respectivement :

$$P_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & x & -x \\ 0 & 1 & x & x \\ x & x & 1 & 0 \\ -x & x & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ et } P_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -x & x \\ 0 & 1 & -x & -x \\ -x & -x & 1 & 0 \\ x & -x & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

où l'on a posé $x = \frac{1}{\sqrt{2}}$. On dit que M réalise une inflation algébrique [10].

La zone de sélection est l'intersection de \mathbb{Z}^4 avec le volume engendré par l'hypercube unité de dimension 4 parcourant E_{\parallel} . Celle-ci est ensuite projetée sur E_{\parallel} , parallèlement à E_{\perp} . Avec cette construction, on obtient un pavage constitué de deux types de tuiles, des losanges et des carrés, d'aires relatives $\sqrt{2}$. On peut jouer sur la direction de projection et sur la longueur des côtés des tuiles pour obtenir un pavage constitué de trois types de tuiles (un losange, un grand carré et un petit carré), tel que les losanges et les petits carrés aient la même aire, et tel que le rapport des aires des petits carrés sur celle des grands soit rationnelle. Nous choisissons pour la suite le cas de rapport d'aires rationnel (plus précisément, $\frac{\text{grande aire}}{\text{petite aire}} = 2$) pour des raisons que nous expliciterons en 3.2¹. En résumé, on peut obtenir deux types de configurations pour le pavage octogonal :

- avec la construction canonique : pavage avec des arêtes de même longueur, donnant un rapport d'aires irrationnel pour les tuiles : $\frac{\text{grande aire}}{\text{petite aire}} = \sqrt{2}$;
- en modifiant la direction de projection : pavage avec des arêtes de longueurs différentes, donnant des aires de rapport rationnel : $\frac{\text{grande aire}}{\text{petite aire}} = 2$.

De même que pour la séquence de Fibonacci, on peut définir des approximants périodiques pour le pavage octogonal (i.e. une suite de pavages, périodiques car obtenus par répétition dans le plan d'une maille élémentaire, qui converge vers le pavage octogonal) ; on donne ici l'idée générale de la construction (cf. [10] pour une preuve complète). De façon analogue au cas de Fibonacci, il s'agit d'approcher le plan de projection E_{\parallel} par une suite de plans rationnels $\{E_k\}_k$; les approximants rationnels du pavage octogonal sont alors obtenus par la projection sur E_{\parallel} de la zone de sélection, elle-même définie en translatant l'hypercube unité sur E_k .

Les E_k s'obtiennent à partir des puissances successives de la matrice d'inflation M : partant d'un plan rationnel E_0 , par exemple celui engendré par deux vecteurs $\{1, 0, 0, 0\}$ et $\{0, 1, 0, 0\}$ de la base canonique de \mathbb{R}^4 , on a :

$$E_k = M^k(E_0)$$

Notons S_k la zone de sélection à l'ordre k , i.e. l'intersection de \mathbb{Z}^4 avec le volume défini en translatant l'hypercube unité le long de E_k . S_k est clairement périodique (car E_k est rationnel). L'approximant périodique d'ordre k , X_k , est la projection de S_k sur E_{\parallel} , parallèlement à E_{\perp} :

$$X_k = P_+(S_k)$$

En posant $Z_k = M^{-k}(S_k)$, et en utilisant la propriété de M :

$$P_+ M^k = \lambda^k P_+$$

on peut montrer que :

$$X_k = \lambda^k P_+(Z_k)$$

et la suite de pavages $\{X_k\}_k$ tend vers le pavage octogonal quand $k \rightarrow \infty$. Remarquons que X_k est bien un pavage périodique : en effet, S_k et donc Z_k le sont, donc par projection X_k est l'est aussi. De plus, puisque $\lambda > 0$, les mailles élémentaires des approximants périodiques dont de plus en plus grandes, la surface étant dilatée d'un facteur λ^2 à chaque étape. Enfin, de même que pour le pavage octogonal, on peut choisir de déformer le pavage X_k afin d'obtenir un pavage constitué de losanges, grands carrés et petits carrés, les losanges et grands carrés ayant la même aire, valant le double de celle d'un petit carré. On retiendra cette convention pour la suite.

¹Remarquons que cette transformation ne change rien à la matrice de connectivité associée au réseau (cf. chap. 3) ; en revanche, cela modifie le spectre du Hamiltonien en présence de champ magnétique, dans la mesure où la valeur du flux magnétique à travers les plaquettes dépend de l'aire des plaquettes.

Ordre k	1	2	3	4	5	6	7	8
Nombre d'Octonacci O_k	1	2	5	12	29	70	169	408
Nombre de sites N_k	7	41	239	1393	8119	47 231	275 807	1 607 521
Aire de l'approximant A_k	2	8	50	288	1682	9 800	57 122	332 928

Table 1: Relations entre les nombres de la suite d'Octonacci $\{O_k\}_k$, le nombre de sites N_k de l'approximant d'ordre k du pavage octogonal et la surface A_k de cet approximant ; N_k et A_k dépendent de O_k via les relations : $N_k = O_{2k+1} + O_{2k}$ et $A_k = 2O_k^2$.

Par la suite, afin d'alléger l'écriture, on désignera par approximant d'ordre k la maille élémentaire de l'approximant périodique d'ordre k du pavage octogonal.

On introduit maintenant la suite d'"Octonacci", qui intervient dans les coefficients de M^k et dans les caractéristiques des approximants (surface et nombre de sites) :

$$\begin{cases} O_1 = 1 \\ O_2 = 2 \\ O_{k+1} = 2O_k + O_{k-1} \end{cases}$$

Les premiers termes de cette séquence sont : $\{1, 2, 5, 12, 29, 70, 169, \dots\}$. La suite d'Octonacci est telle que : $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{O_{n+1}}{O_n} = 1 + \sqrt{2}$; on reconnaît la plus grande valeur propre de M , $\lambda_+ = 1 + \sqrt{2}$, aussi appelé nombre d'argent. Un calcul standard montre que :

$$M^{-k} = (-1)^k \begin{pmatrix} O_k + O_{k-1} & 0 & -O_k & O_k \\ 0 & O_k + O_{k-1} & -O_k & -O_k \\ -O_k & -O_k & O_k + O_{k-1} & 0 \\ O_k & -O_k & 0 & O_k + O_{k-1} \end{pmatrix}$$

On peut montrer [10] que : le nombre N_k de sites de l'approximant d'ordre k vaut :

$$N_k = O_{2k+1} + O_{2k}$$

et que la surface de l'approximant d'ordre k , avec pour unité de longueur la plus petite arête (côté d'un petit carré) vaut :

$$A_k = 2O_k^2$$

Ces relations sont résumées dans le tableau 1.

2.2.2 Quelques remarques sur le pavage octogonal

Avant d'aller plus loin, relevons quelques caractéristiques du pavage octogonal.

Tout d'abord, justifions la dénomination "pavage octogonal" : si l'on projette la zone de sélection sur l'espace perpendiculaire E_\perp et non sur E_\parallel (c'est la zone d'acceptance), on obtient un réseau borné, inclus dans un octogone (fig. 5.a). Ceci provient du fait que nous avons projeté sur un plan $2D$ un hypercube de dimension 4 (un cube en dimension 3 aurait donné un hexagone). La figure de diffraction (fig. 5.b) présente également une symétrie octogonale, d'où le nom.

Ensuite, remarquons que, dans le cas du pavage de Rauzy, les sites ont tous une coordinnence valant 3, 4 ou 5, alors que pour le pavage octogonal, on obtient des sites de coordinnence 3, 4, 5, 6, 7 et 8.

Pour finir, on observe, comme pour tous les quasicristaux, une répétition spatiale (mais pas périodique) d'environnements locaux ; par exemple, les étoiles à 8 branches se retrouvent à des espacements presque constants dans tout le pavage. Cette propriété est formulée plus précisément par le théorème de Conway, qui affirme que n'importe quel environnement de taille L se retrouve à une distance plus petite que $2L$, mais sans plus de précision sur l'emplacement exact de la réplique.

3 Étude numérique du pavage octogonal, à champ nul et sous champ magnétique

On s'intéresse maintenant aux propriétés électroniques d'un pavage quasicristallin, le pavage octogonal. On étudie la dynamique d'un électron évoluant sur un tel pavage, soumis au potentiel

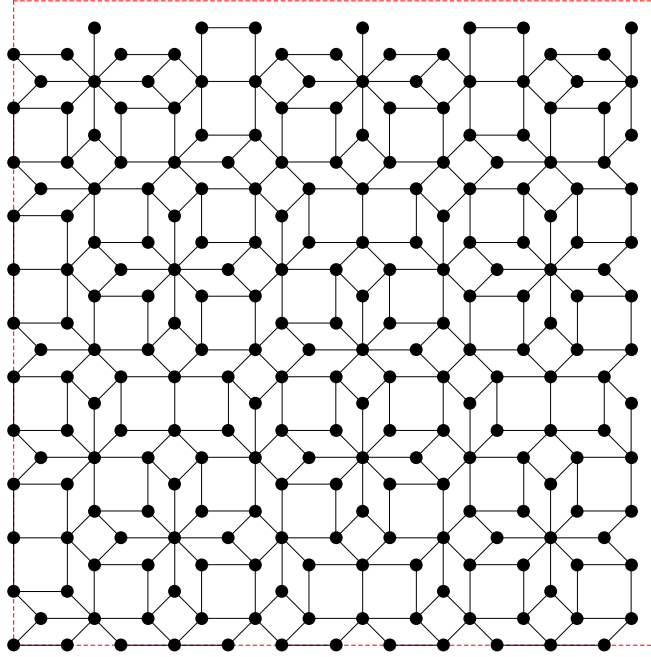


Figure 4: Approximant d'ordre 3 pour le pavage octogonal ; ici, les arêtes ont été légèrement déformées de façon à obtenir des plaquettes d'aires commensurables (i.e. de rapport rationnel).

quasipériodique de la structure sous-jacente ; son évolution est régie par un Hamiltonien H . Dans le cas d'un réseau cristallin (périodique), on peut déterminer les propriétés spectrales de H (structure de bandes), et on dispose du théorème de Bloch pour décrire analytiquement la fonction d'onde associée à l'électron [3] ; dans le cas quasipériodique en dimension $D \geq 2$, en revanche, il est beaucoup plus difficile de décrire le spectre en énergie du Hamiltonien, et il n'existe pas d'équivalent du théorème de Bloch pour décrire analytiquement la fonction d'onde. Une étude numérique du pavage octogonal devrait nous permettre de mieux comprendre ces structures quasipériodiques, et donner des pistes pour la compréhension théorique et la description analytique de ces structures.

Tous les codes ont été programmés avec Mathematica.

3.1 Construction numérique

Pour l'étude numérique, étant donné qu'on ne peut pas programmer un pavage de taille infinie, on utilise les approximants périodiques du pavage octogonal. Il a donc fallu coder, dans un premier temps, la construction de ces approximants. Cette partie s'est effectuée en collaboration avec R. Mosseri, que je remercie pour le temps qu'il m'a consacré.

Le code est conçu pour construire une maille élémentaire des approximants périodiques du pavage octogonal ; il calcule les coordonnées des points du réseau, la liste des couples de points reliés par une arête, et permet de tracer aussi bien le pavage que la zone d'acceptance (i.e. la projection de la zone de sélection dans les plans E_{\parallel} et E_{\perp} respectivement).

Nous avons, grâce à ce code, la possibilité d'exécuter des calculs en un temps raisonnable (quelques jours maximum) pour des approximants jusqu'à l'ordre 8 (1 607 521 sites). Pour donner un ordre de grandeur, avec les machines à notre disposition, il faut compter environ une seconde pour construire et diagonaliser une matrice de de taille 1000×1000 (correspondant à l'approximant d'ordre 4), quelques heures pour une matrice $10^5 \times 10^5$ (approximant d'ordre 7) et quelques jours pour une matrice $10^6 \times 10^6$ (approximant d'ordre 8).

Dans la suite, on notera N_k le nombre de sites de la maille élémentaire de l'approximant périodique d'ordre k , et A_k sa surface ; cela correspondra à la surface de l'échantillon modélisé numériquement. On prendra toujours la maille du pavage d'aires commensurables. L'unité de longueur est fixée par la plus petite arête du pavage ; avec cette convention, l'aire de la maille

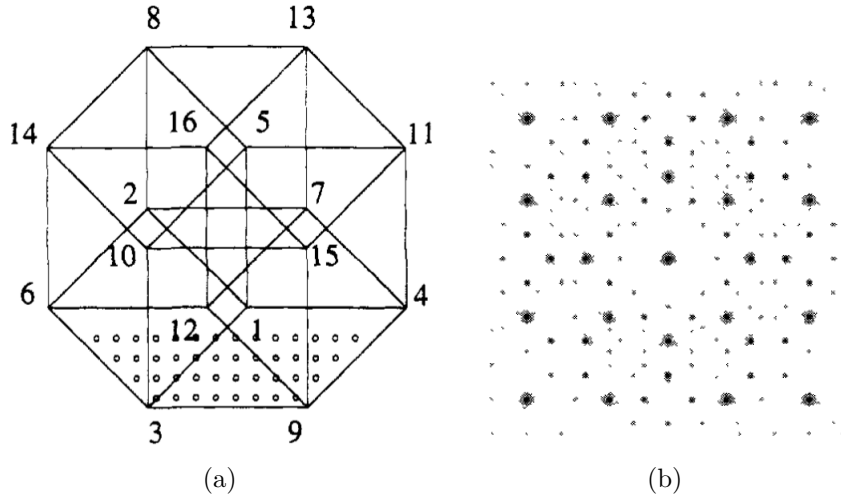


Figure 5: (a) Projection de la zone de sélection pour le pavage octogonal sur le plan perpendiculaire E_{\perp} . Source : [10] (b) Diagramme de diffraction du pavage octogonal. Ces deux images mettent en évidence la symétrie d'ordre 8 sous-jacente à la structure du pavage octogonal. Source : [2]

élémentaire de l'approximant k vaut : $A_k = \sqrt{2}N_k$. La fig. 4 montre la maille élémentaire d'ordre 3.

3.2 Modèle des liaisons fortes

On s'intéresse maintenant au spectre du Hamiltonien décrivant l'évolution d'un électron, de charge $-e$, évoluant dans un cristal ayant la géométrie du pavage octogonal, en l'absence ou en présence de champ magnétique. On choisit pour cela le modèle des liaisons fortes ; le Hamiltonien pour ce modèle est de la forme :

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} |i\rangle \langle j|$$

où $\langle i,j \rangle$ désigne un couple de sites i,j proches voisins (i.e. reliés par une arête) et $t_{i,j}$ l'amplitude de couplage. Pour la suite, on choisira $t_{i,j} = -1$ constant.

3.2.1 Champ nul

En champ nul, le Hamiltonien décrivant le système est alors :

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle \langle j|$$

En terme matriciel, le Hamiltonien peut s'écrire sous la forme d'une matrice $N \times N$, N désignant le nombre de sites de l'échantillon considéré, dite matrice de connectivité.

Avant de discuter le cas avec champ magnétique, nous pouvons déjà remarquer que la matrice de connectivité dépend du choix des conditions aux limites.

Étant donné que nous ne pouvons pas modéliser numériquement un pavage infini, nous travaillons avec des approximants périodiques (définis au chapitre précédent) de taille finie. On peut alors choisir d'imposer des conditions aux bords ouvertes (OBC), avec une fonction d'onde nulle en dehors du pavage, ce qui donne une matrice de connectivité de terme général

$$H_{i,j}^{OBC} = \begin{cases} -1 & \text{si } i,j \text{ reliés par une arête} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ce cas est simple à modéliser, mais le spectre en énergie sera "pollué" par des états de bords. Pour éviter ce problème, on peut choisir des conditions aux bords périodiques (PBC), ce qui consiste à mettre le système sur un tore et qui revient à ajouter des liens dans la matrice de connectivité.

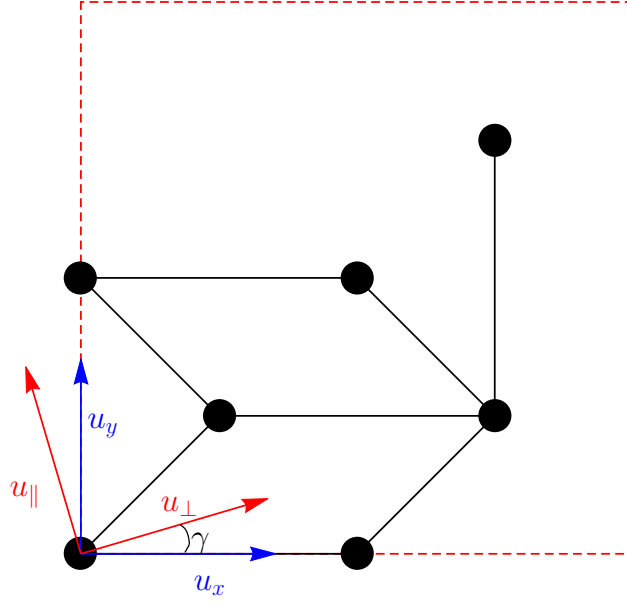


Figure 6: Maille de l'approximant d'ordre 1 pour le pavage octogonal ; γ désigne l'angle entre les vecteurs \mathbf{u}_x , \mathbf{u}_y de base du repère orthonormé de référence et la base $\{\mathbf{u}_\perp, \mathbf{u}_\parallel\}$.

À titre d'exemple, les matrices de connectivité, à champ nul, en conditions aux bords ouverts et périodique, pour l'approximant d'ordre 1 (7 sites) sont :

$$H_{B=0}^{OBC} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H_{B=0}^{PBC} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

3.2.2 En présence de champ magnétique

On choisit pour la suite le système d'unités tel que : la constante de Planck $\hbar = 1$, et tel que le quantum de flux magnétique $\phi_0 = \frac{h}{e} = 1$; ceci impose pour la charge élémentaire $e = 2\pi$.

Pour tenir compte d'un champ magnétique \mathbf{B} , il faut ajouter une phase (dite de Peierls, [11]) au terme de couplage $t_{i,j} \rightarrow te^{-i\theta_{i \rightarrow j}} = te^{-i2\pi \int_i^j \mathbf{d}\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}}$, où \mathbf{A} est un potentiel vecteur dont dérive le champ : $\mathbf{B} = \mathbf{\Delta} \times \mathbf{A}$. On veut modéliser un champ magnétique constant et uniforme de direction perpendiculaire au plan du pavage. On choisit pour cela une jauge de Landau : $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = B(\mathbf{r} \cdot \mathbf{u}_\parallel)\mathbf{u}_\perp$, avec

$$\begin{cases} \mathbf{u}_\perp = \cos \gamma \mathbf{u}_x + \sin \gamma \mathbf{u}_y \\ \mathbf{u}_\parallel = -\sin \gamma \mathbf{u}_x + \cos \gamma \mathbf{u}_y \end{cases} \quad (1)$$

et où γ désigne l'angle entre les vecteurs \mathbf{u}_x , \mathbf{u}_y de base du repère orthonormé de référence et la base $\{\mathbf{u}_\perp, \mathbf{u}_\parallel\}$, comme illustré sur la fig. 6.

Un calcul standard donne alors pour la phase de Peierls :

$$\theta_{i \rightarrow j} = \int_i^j 2\pi d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A} = 2\pi B(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{u}_{\parallel} \times \frac{1}{2}(\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{u}_{\perp} \quad (2)$$

et pour le flux magnétique à travers une plaquette d'aire S : $\phi = BS$. On introduit le paramètre adimensionné $f = \frac{\phi}{\phi_0} = \phi$, car $\phi_0 = 1$ dans notre système d'unités. On obtient alors pour le terme de Peierls :

$$\theta_{i \rightarrow j} = 2\pi \frac{f}{S} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{u}_{\parallel} \times \frac{1}{2}(\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{u}_{\perp} \quad (3)$$

Il est important de noter que, avec le choix d'un pavage octogonal avec des plaquettes d'aires commensurables et avec pour unité de longueur la longueur de la plus petite arête, on obtient des valeurs de flux valant $f = B$ (pour la plaquette carré de côté 1 et la plaquette losange de côtés 1 et $\sqrt{2}$) ou $f = 2B$ (pour la plaquette carré de côté $\sqrt{2}$). Dans la cas général d'une maille avec des plaquettes de deux aires différentes, de rapport ρ , le flux prendrait les valeurs $f = B$ et $f = \rho B$. En termes matriciels, les valeurs du flux à travers chaque plaquette sont les termes diagonaux de la puissance quatrième de la matrice de connectivité M^4 ; ces termes diagonaux $M_{j,j}^4$ sont de la forme : $e^{2i\pi B}$ ou $e^{2i\pi\rho B}$. On voit ainsi que, si $\rho = \frac{p}{q}$ est rationnel, alors le système est périodique en B , de période q . Si, en revanche, ρ est irrationnel, alors le système n'est pas périodique en B . En choisissant dans notre cas $\rho = 2$, on peut ainsi étudier l'effet de la quasipériodicité du pavage seule, sans les effets de la non-périodicité du spectre en flux.

En conditions aux bords périodiques, il faut de plus s'assurer que le flux dans les plaquettes identifiées par périodicité soit le même. Dans un premier temps, il s'agit de bien comprendre comment la translation de la maille dans l'espace réel se traduit au niveau du terme de jauge ; celui-ci est en fait soumis à une translation magnétique. Plus de détails sur la translation magnétique pour la jauge symétrique sont donnés dans [12] ; on se place ici dans le cas d'une jauge générale.

Introduisons un opérateur de translation $T_{\mathbf{a}}$, où \mathbf{a} désigne un vecteur de maille tel que le pavage soit invariant par translation suivant \mathbf{a} .

L'opérateur $T_{\mathbf{a}}$ agit de la manière suivante sur le ket $|\psi\rangle$:

$$\langle \mathbf{r} | T_{\mathbf{a}} | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} - \mathbf{a} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})$$

Considérons maintenant le Hamiltonien H_0 , obtenu à partir de la matrice de connectivité en conditions aux bords périodiques et dont les coefficients non nuls sont de la forme

$$(H_0)_{i,j} = -e^{-2i\pi\theta_{i \rightarrow j}}$$

Tel quel, $[H_0, T_{\mathbf{a}}] \neq 0$; en effet :

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{a}} H_0 (T_{\mathbf{a}})^{-1} &= T_{\mathbf{a}} H_0 T_{-\mathbf{a}} \\ &= \sum_{\langle i,j \rangle} e^{2i\pi \int_i^j d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l})} |\mathbf{i} + \mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{j} + \mathbf{a}| \\ &= \sum_{\langle i,j \rangle} e^{2i\pi \int_{i-\mathbf{a}}^{j-\mathbf{a}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l})} |i\rangle \langle j| \\ &= \sum_{\langle i,j \rangle} e^{2i\pi \int_i^j d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l} - \mathbf{a})} |i\rangle \langle j| \\ &\neq H_0 \end{aligned}$$

En fait, il manque un terme de phase aux termes $(H_0)_{i,j}$ correspondant aux liens reliant les sites du bord de la maille à un site d'une maille voisine (obtenue en translatant la première maille de \mathbf{a}), traduisant l'effet de la translation sur le terme de jauge. Cherchons donc une transformation de jauge $\chi(\mathbf{r})$ portant sur la phase des liens, qui laisse le système invariant par translation suivant \mathbf{a} , i.e. telle que :

$$e^{2i\pi\chi(\hat{\mathbf{r}})} T_{\mathbf{a}} H_0 T_{-\mathbf{a}} e^{-2i\pi\chi(\hat{\mathbf{r}})} = H_0$$

Calculons :

$$e^{2i\pi\chi(\mathbf{r})}T_{\mathbf{a}}H_0T_{-\mathbf{a}}e^{-2i\pi\chi(\mathbf{r})} = \sum_{\langle i,j \rangle} e^{2i\pi[\chi(\mathbf{r}_i)-\chi(\mathbf{r}_j)+\int_{\mathbf{i}}^{\mathbf{j}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l}-\mathbf{a})]} |i\rangle\langle j|$$

On choisit χ tel que :

$$\chi(\mathbf{r}_i) - \chi(\mathbf{r}_j) + \int_{\mathbf{i}}^{\mathbf{j}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l} - \mathbf{a}) = \int_{\mathbf{i}}^{\mathbf{j}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l})$$

On vérifie immédiatement que le choix :

$$\chi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{0}}^{\mathbf{r}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l})$$

avec une origine $\mathbf{0}$ fixée arbitrairement, convient.

L'opérateur $e^{2i\pi\chi(\mathbf{r})}T_{\mathbf{a}}$ est appelé opérateur de translation magnétique : il s'agit de la composition d'une translation $T_{\mathbf{a}}$ et d'une transformation de jauge $\chi(\mathbf{r})$.

Cette transformation permet de bien définir la matrice de connectivité en conditions aux bords périodiques.

On souhaite maintenant étudier les propriétés spectrales du système sous champ magnétique.

En parallèle de mon stage, mes encadrants l'ont implémenté pour le pavage de Rauzy pour vérifier la cohérence avec les papillons déjà tracés dans ce cas ; je l'ai codé pour le pavage octogonal.

3.3 Étude spectrale

3.3.1 Papillon en conditions aux bords ouverts

En conditions aux bords ouverts, il n'y a pas de contraintes sur les valeurs de flux que l'on peut appliquer au système. Le graphe du spectre en énergie en fonction du flux magnétique donne une figure appelée papillon, par analogie avec le papillon de Hofstadter (pour le réseau carré) [8]. La fig. 7 montre le papillon pour l'approximant d'ordre 4 (1393 sites). On vérifie bien que le spectre a la symétrie $E \rightarrow -E$; on observe de plus une symétrie $f \rightarrow 1 - f$, comme cela était attendu vue la forme de la phase de Peierls.

On observe des zones à faible densité d'états ; toutefois on ne peut pas affirmer à ce stade qu'il s'agit de vrais gaps en énergie, car en conditions en bords ouverts le spectre est pollué par des états de bord. Il faut tracer le papillon en conditions aux bords périodiques pour trancher.

Proche du champ nul, on voit apparaître une structure qui rappelle des niveaux de Landau ; celle-ci n'apparaît pas clairement sur la fig. 7 pour des raisons de résolution graphique, mais elle est bien visible si l'on zoom proche du champ nul : voir fig. 8.

3.3.2 Papillon en conditions aux bords périodiques

L'intérêt de l'étude spectrale en conditions aux bords périodique est de s'affranchir des états de bords, qui "polluent" le spectre et qui risquent de cacher des gaps en énergie.

Nous avons calculé, à la section précédente, le terme de translation magnétique, c'est-à-dire la façon dont la phase de Peierls est modifié lorsque l'on place la maille du réseau sur un tore.

On souhaite maintenant déterminer les valeurs de flux magnétiques autorisées, de telle sorte que le flux à travers les plaquettes soit bien de la forme $f = B$ ou $f = 2B$. Une condition nécessaire (mais non suffisante) pour que ceci soit réalisé est que la trace de la puissance quatrième de la matrice de connectivité associée à l'approximant d'ordre k soit de la forme :

$$\frac{1}{4} \text{tr}(M^4) = C + P_k \cos(2\pi f) + G_k \cos(4\pi f)$$

où P_k, G_k désignent respectivement le nombre de plaquettes d'aire 1 et d'aire 2 dans le pavage (on a donc $N_k = P_k + G_k$), et C une constante ; en effet, $\text{tr}(M^4)$ donne tous les chemins de longueur

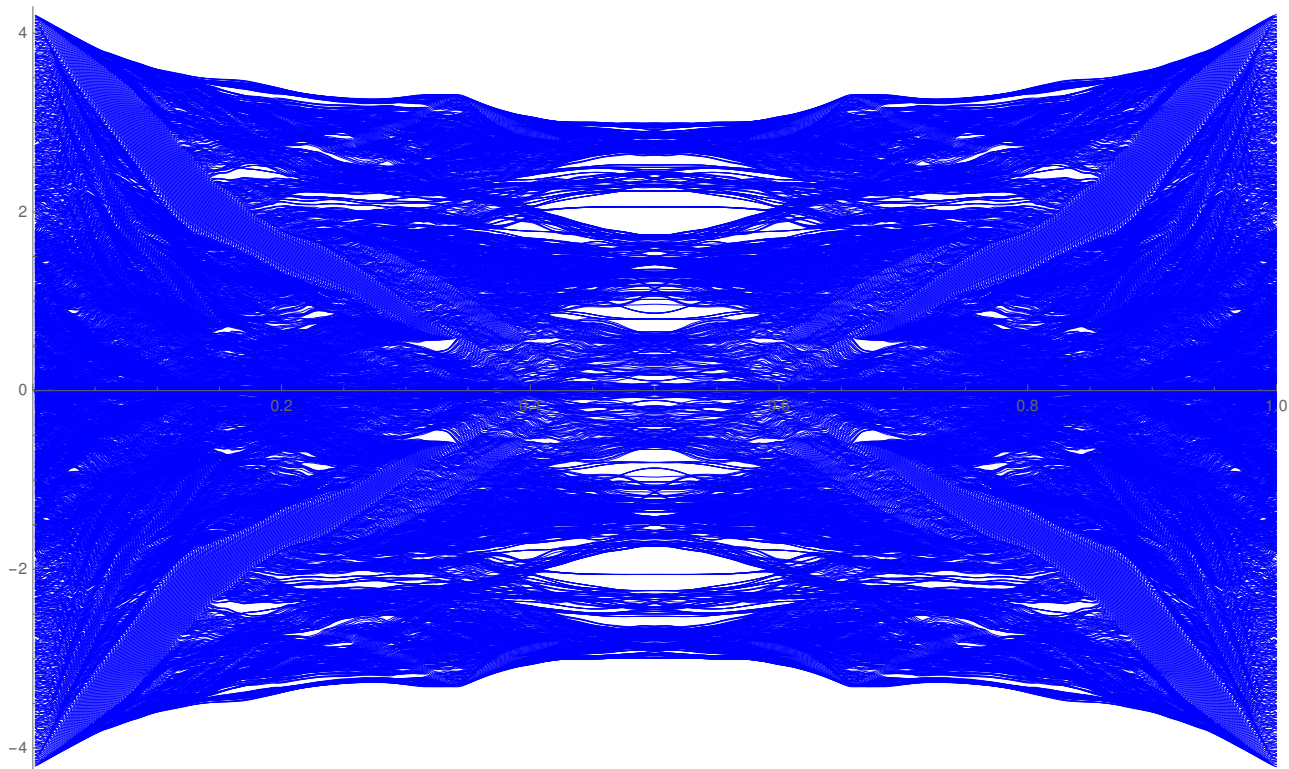


Figure 7: Papillon pour l'approximant d'ordre 4 (1393 sites) en conditions aux bords ouvertes. En abscisse : le flux f en unités de ϕ_0 ; en ordonnées : le spectre en énergies, en unités de la constante de couplage $t = 1$.

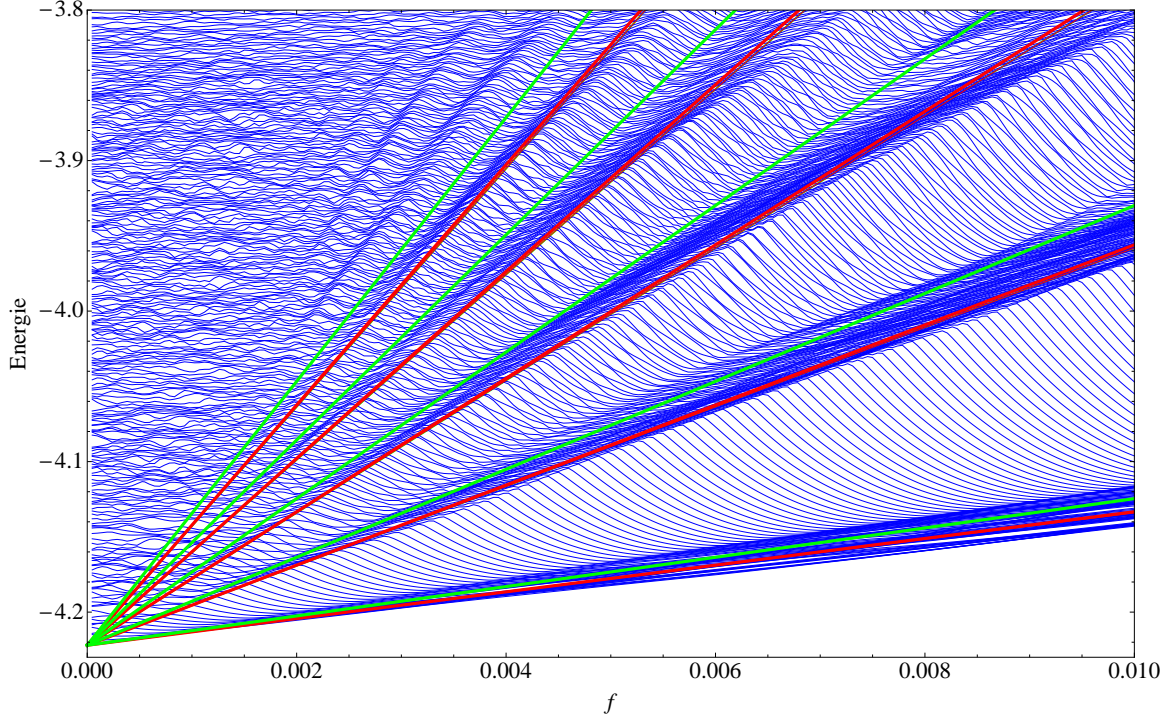


Figure 8: Zoom proche du flux nul pour le papillon de l'approximant d'ordre 6 (47 321 sites) en conditions aux bords ouvertes ; les droites verte et rouge délimitent les niveaux de Landau (cf. 3.4.1 pour une discussion de ces droites). En abscisse : le flux f en unités de ϕ_0 ; en ordonnées : le spectre en énergies, en unités de la constante de couplage $t = 1$.

4 qui reviennent au point initial, ce qui correspond à la somme des flux à travers les plaquettes, plus les termes de flux nul (chemins n'entourant pas une plaquette).

Or, pour un flux quelconque, on a :

$$\frac{1}{4} \text{tr}(M_k^4) = C_k + A_k \cos(2\pi f) + B_k \cos(4\pi f) + \cos((2O_k^2 - 1)2\pi f)$$

où A_k , B_k et C_k sont des constantes dépendant de k . Le terme $\cos((O_k^2 - 1)2\pi f)$ est le flux à travers une maille "de coin" (située à un coin de la maille élémentaire), et correspond à la différence entre le flux à travers la maille entière et le flux à travers une plaquette. Pour avoir un système invariant par périodicité, il faut mettre ce terme sous la forme $\cos(2\pi f)$ ou $\cos(4\pi f)$; on choisit $\cos(2\pi f)$, il faut donc imposer un flux de la forme :

$$f = \frac{p}{2O_k^2} \text{ avec } p \in [0, 2O_k^2]$$

Remarque : Le raisonnement ci-dessus est valable pour n'importe quelle jauge ; pour l'analyse numérique, nous avons choisi la jauge de Landau introduite en 3.2.2. Par ailleurs, un test supplémentaire de la validité de cette prescription consiste à vérifier l'invariance du spectre par changement de jauge ; on peut par exemple vérifier que le spectre est invariant lorsque l'on choisit différentes valeurs de γ dans (1).

La restriction sur les valeurs de flux permises est suffisamment souple pour tracer un papillon avec une bonne résolution. Pour l'approximant d'ordre 4, on peut en effet tracer 1682 valeurs de flux ; or, la limite de résolution sur les ordinateurs à disposition est atteinte aux alentours de 1000 points sur la fenêtre de tracé utilisée. Le papillon pour l'approximant d'ordre 3 est donné fig. 9 ; la fig.10 est le zoom autour de $f = 0$ pour l'approximant d'ordre 4.

Notons la double brisure de symétrie du papillon en conditions aux bords périodiques par rapport aux papillons en conditions aux bords ouvertes : les symétries $E \rightarrow -E$ et $f \rightarrow 1 - f$

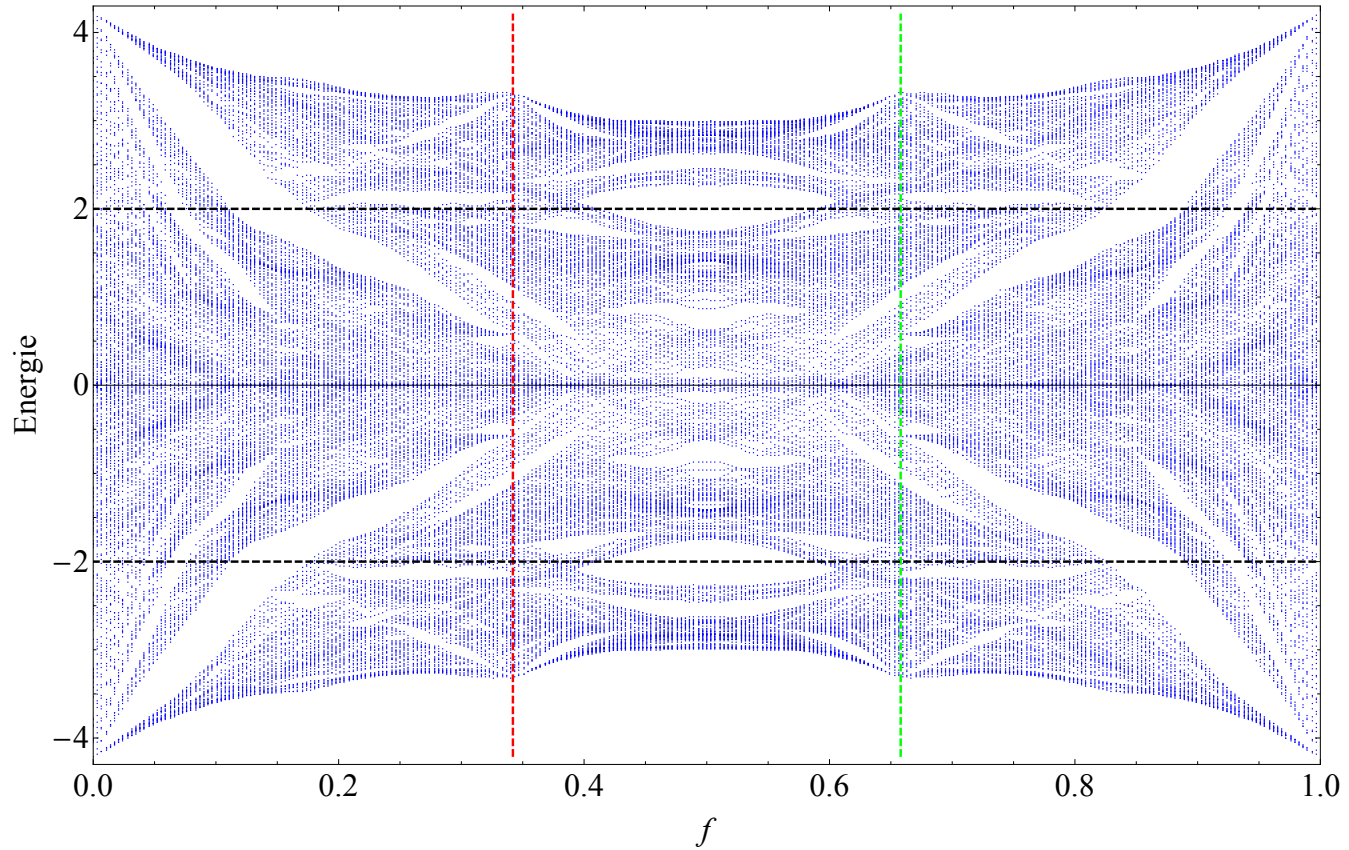


Figure 9: Papillon pour l'approximant d'ordre 3 (239 sites) en conditions aux bords périodiques. En abscisse : le flux f en unités de ϕ_0 ; en ordonnées : le spectre en énergies, en unités de la constante de couplage $t = 1$.

ne sont plus conservées. Remarquons notamment la présence de gaps similaires à des niveaux de Landau, proches du champ nul ; ces niveaux feront l'objet d'une étude plus poussée dans la partie suivante.

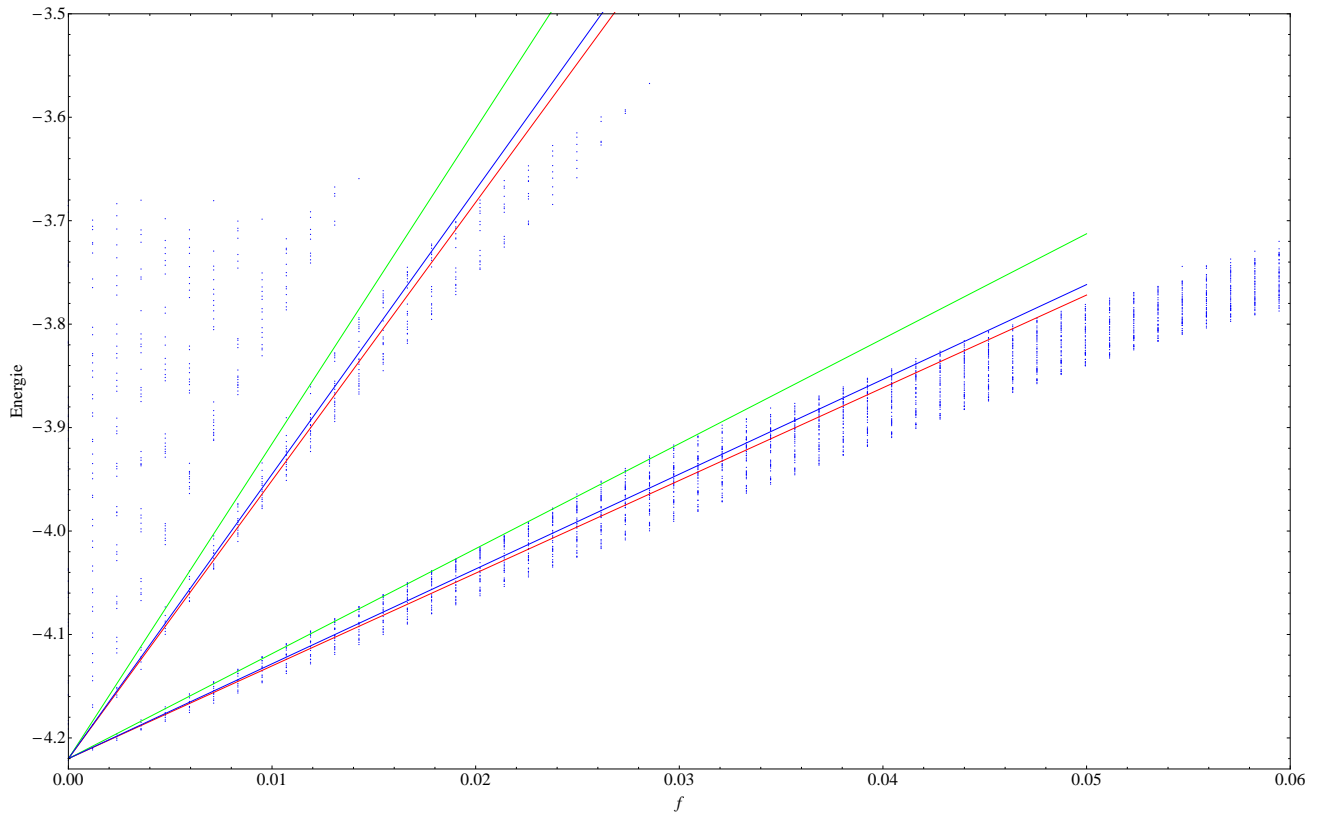


Figure 10: Niveaux de Landau pour le papillon d'ordre 4, conditions aux bords périodiques ; en rouge et bleu, les pentes de niveaux de Landau théoriques obtenues avec le tenseur de masse effective pour les approximations d'ordre 6 et 4 respectivement ; en vert, le fit direct des niveaux de Landau (cf. 3.4.1 pour le détail du fit). En abscisse : le flux f en unités de ϕ_0 ; en ordonnées : le spectre en énergies, en unités de la constante de couplage $t = 1$.

3.3.3 Densité d'états à champ nul

Une quantité naturelle à étudier est la densité d'états à champ nul. À température nulle, elle s'écrit

$$\rho_{T=0}(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

où δ est la distribution de Dirac et $\{E_n\}_n$ le spectre du Hamiltonien. Il est en général difficile d'obtenir une expression analytique exacte de ρ à $T = 0$, surtout en l'absence de relation de dispersion (ce qui est le cas ici, contrairement par exemple au cas du réseau carré). On se place donc à température finie, et l'on peut ainsi tracer la densité d'état thermodynamique en fonction du potentiel chimique :

$$\rho_T(\mu) = - \sum_n n'_F(E_n - \mu)$$

avec $n_F(E) = \frac{1}{1+e^{\beta E}}$ la fonction de distribution de Fermi-Dirac à potentiel chimique nul. Les fig. 11 et fig. 12 montrent les graphes de $\rho_T(\mu)$ pour différentes valeurs de la température. On observe bien un lissage de la courbe pour les hautes températures, alors qu'à de basses températures, la courbe est plus piquée du fait de la convergence de $-n'_F(E) = \frac{1}{4T} \frac{1}{(\cosh \frac{E}{2T})^2}$ vers une distribution de Dirac $\lim_{T \rightarrow 0} -n'_F(E) = \delta(E)$.

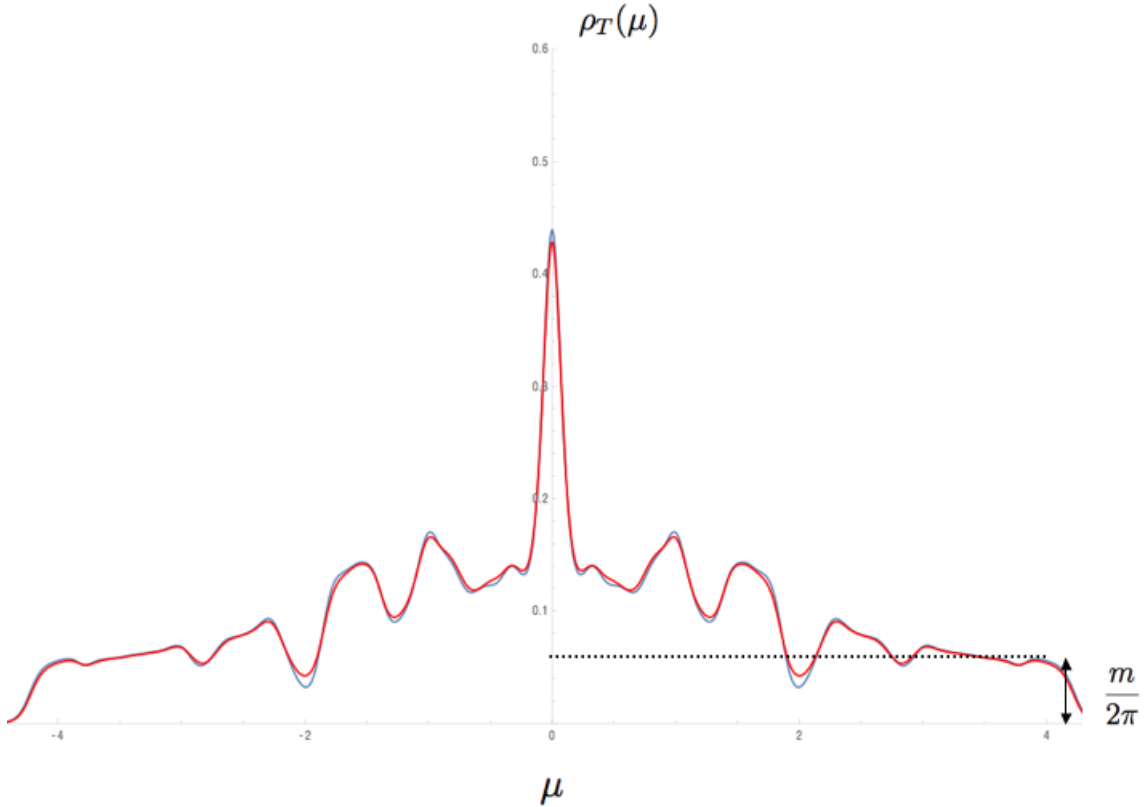


Figure 11: Densité d'états $\rho_T(\mu)$ en unités de $\frac{1}{t}$, en fonction de μ (en unités de t) à $T = 0.05$ (en unités de t) ; bleu : conditions aux bords périodiques ; rouge : conditions aux bords ouvertes.

3.3.4 Diagramme de Wannier

Pour compléter l'étude spectrale sous champ magnétique, on trace le diagramme de Wannier, c'est-à-dire la densité d'états intégrée normalisée en fonction du flux moyen par plaquette, à température

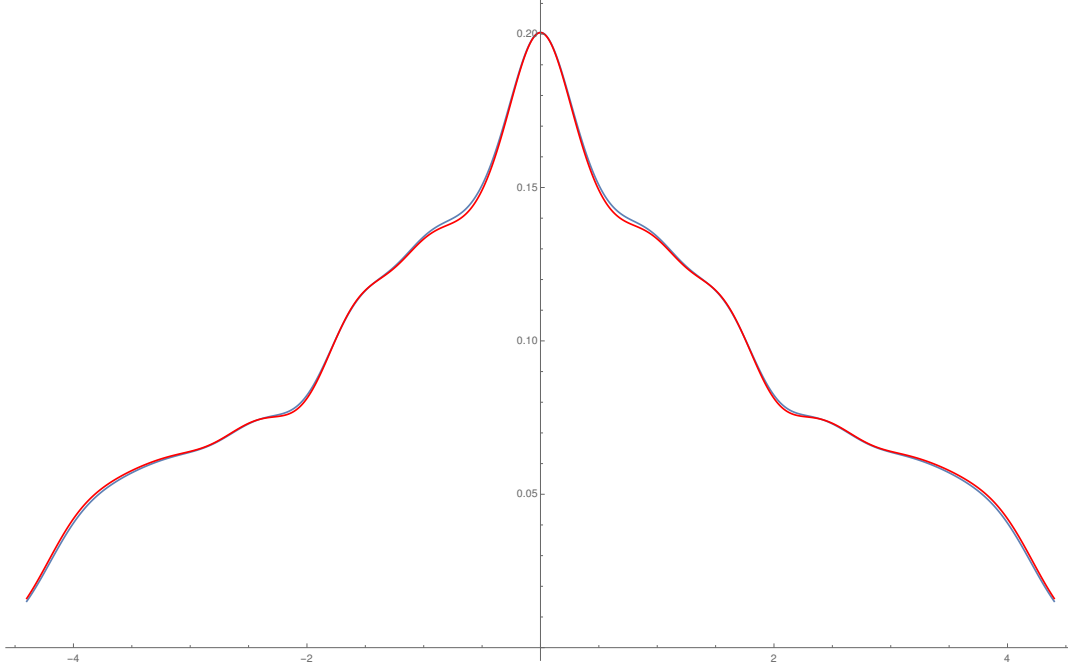


Figure 12: Densité d'états $\rho_T(\mu)$ en unités de $\frac{1}{t}$, en fonction de μ (en unités de t) à $T = 0.2$ (en unités de t); bleu : conditions aux bords ouvertes ; rouge : conditions aux bords périodiques.

nulle, associé au papillon en PBC (voir fig. 13). Le flux moyen par plaquette est donné par la formule :

$$\bar{f} = \frac{P_k + 2G_k}{N_k}$$

où P_k est le nombre de plaquettes d'aire 1, G_k le nombre de plaquettes d'aire 2 et N_k le nombre total de plaquettes (ou de sites). La densité d'états intégrée normalisée, $N'(\bar{f}, g)$, est la fraction d'états sous un gap g :

$$N'(\bar{f}, g) = \frac{N_{\bar{f}}(g)}{N_{tot}}$$

où $N_{\bar{f}}(g)$ est le nombre d'états sous le gap g du spectre du Hamiltonien en présence d'un flux moyen \bar{f} , et N_{tot} le nombre total d'états en énergie du système (i.e. le nombre de valeurs propres de la matrice représentant le Hamiltonien, qui est bien fini dans notre modèle numérique). Pour ce diagramme, on fixe arbitrairement une largeur caractéristique δ , donnant l'écart minimal nécessaire pour définir un gap entre deux niveaux d'énergie : il y a donc un "gap" entre deux niveaux d'énergie successifs E_n et E_{n+1} si $|E_n - E_{n+1}| > \delta$. On choisit usuellement

$$\delta \approx 10 \frac{\Delta E}{N_{tot}}$$

où ΔE est la largeur totale du spectre.

Ce diagramme permet de calculer les nombres de Hall du pavage, qui sont à relier aux propriétés de conductivité de Hall du quasicristal ; nous reviendrons sur cela dans le dernier chapitre. On a tracé sur la fig. 13 les droites correspondant aux nombre de Hall 1, 2, 3.

3.4 Masse effective

La structure de gaps proche du flux nul rappelle la structure des niveaux de Landau ; par analogie, cela suggère l'existence d'une masse effective pertinente associée au système. Nous avons cherché à calculer numériquement cette masse effective par plusieurs méthodes.

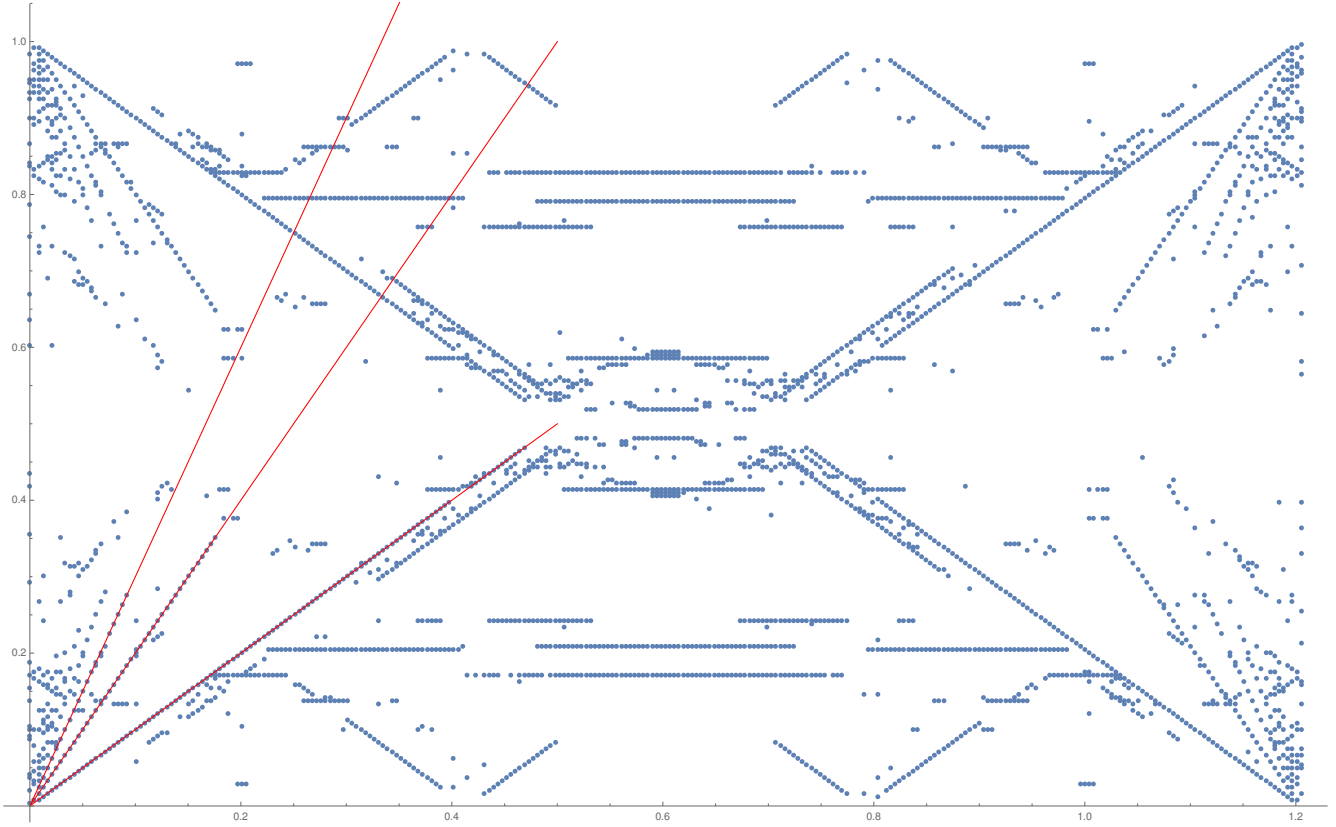


Figure 13: Digramme de Wannier pour l'approximant d'ordre 3, en conditions aux bords périodiques ; en rouge : niveaux de Landau. En abscisses : flux moyen par plaquette $\bar{f} = \frac{P_k + 2G_k}{N_k}$; en ordonnées : fraction du nombre d'états sous les gaps successifs du spectre $N'_f(\bar{f}, g) = \frac{N'_f(g)}{N_{tot}}$.

3.4.1 Analogie avec les niveaux de Landau

Une première méthode intuitive repose sur la structure des niveaux de Landau. Rappelons que le Hamiltonien régissant l'évolution d'un électron libre, de masse m , charge $-e$, évoluant dans un espace à $2D$ et soumis à un champ magnétique constant et uniforme perpendiculaire à ce plan est:

$$H = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}))^2$$

où $\hat{\mathbf{p}}$ est l'opérateur quantité de mouvement, $\hat{\mathbf{r}}$ l'opérateur position et \mathbf{A} le potentiel vecteur dont dérive le champ magnétique ; le spectre en énergie associé est de la forme :

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

avec $\omega_c = \frac{eB}{m}$. Par analogie, on définit à partir de la mesure de la pente des niveaux de Landau du papillon du pavage octogonal une masse effective pour notre système.

Pour estimer la pente des niveaux de Landau, on travaille avec les papillons en conditions aux bords périodiques, qui ne sont pas pollués par les niveaux d'énergie associés aux états de bords. On effectue un fit (avec Mathematica) par une fonction linéaire, en fonction du flux f , des états situés au bord supérieur des niveaux de Landau (droites vertes sur les fig. 8 et fig. 10), et non des états situés au bord inférieur (droite rouge sur la fig. 8). Ce choix est motivé par le fait que la correction au second ordre en f de l'approximation linéaire des niveaux de Landau est négative [13].

Les valeurs numériques de la masse effective inverse $\frac{1}{m_L}$ obtenues avec les papillons des approximants d'ordre 4 (1393 sites) et d'ordre 5 (8119 sites), en conditions aux bords périodiques, sont données dans le tableau 2.

Approximant	4 (1393 sites)	5 (8119 sites)
$\frac{1}{m_L}$	3.2	3.2

Table 2: Masses effectives inverses $\frac{1}{m_L}$ obtenues par mesure de la pente des niveaux de Landau, pour les approximants d'ordres 4 et 5, en conditions aux bords périodiques.

3.4.2 Tenseur de masse effective

Une autre méthode utilise le tenseur de masse effective inverse (voir [14], chap. 12), défini à l'aide du Hamiltonien de Bloch :

$$H_0(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} H_0 e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}$$

où H_0 est le Hamiltonien, à champ nul, du système en conditions aux bords périodiques. On diagonalise $H_0(\mathbf{k})$ pour obtenir le spectre de mini-bande $\{E_n(\mathbf{k})\}_n$; une mini-bande est une bande du spectre en énergie de $H_0(\mathbf{k})$ résultant de la structure périodique du réseau : en conditions aux bords périodiques, en effet, le pavage est obtenu en répétant périodiquement un approximant du pavage octogonal. L'approximant lui-même n'a aucune périodicité ; la seule périodicité provient donc uniquement de la translation périodique de cet approximant dans le plan. Cette structure périodique est à l'origine de gaps, divisant le spectre en énergie en mini-bandes.

L'idée est maintenant de développer la relation de dispersion autour du centre de la première zone de Brillouin de la première minibande ; on obtient alors :

$$E_1(\mathbf{k}) = E_1(\mathbf{0}) + \frac{1}{2}\alpha_{i,j}k_i k_j + \mathcal{O}(\mathbf{k}^2)$$

où les $\alpha_{i,j}$ définissent le tenseur de masse effective :

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{x,x} & \alpha_{x,y} \\ \alpha_{x,y} & \alpha_{y,y} \end{pmatrix}$$

Pour une relation de dispersion quadratique $E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\alpha_{i,j}k_i k_j$, la densité d'états intégrée est donnée par : $N(E) = \frac{E}{2\pi\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}}} = \frac{mE}{2\pi}$ ($E \geq 0$). De la même façon, on détermine la masse effective à partir du déterminant de $\boldsymbol{\alpha}$:

$$\frac{1}{m} = \sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}}$$

Les calculs numériques sont effectués pour les approximants 3, 4, 5, 6, 7 et 8 ; on utilise le Hamiltonien en conditions aux bords périodiques pour définir les matrices de Bloch. Les résultats sont résumés dans le tableau 3. Les valeurs de la masse effective sont données à 10^{-4} près.

Une interpolation suggère que, pour des systèmes de taille de plus en plus grande, la masse effective inverse tend vers une valeur comprise entre 2.76 et 2.79 ; la fig. 14 montre le graphe de la masse effective inverse en fonction de $\frac{1}{\sqrt{O_k}}$.

On observe une erreur relative de l'ordre de 9% entre les deux approches (niveaux de Landau et tenseur de masse effective), ce qui est non négligeable.

Ordre (nombre de sites)	3 (239)	4 (1 393)	5 (8 119)	6 (47 321)	7 (275 807)	8 (1 607 521)
$\frac{1}{m_B}$	2.9465	2.9173	2.8861	2.8530	2.8225	2.7891

Table 3: Masses effectives inverses $\frac{1}{m_B}$ obtenues avec le tenseur de masse effective de la première mini-bande, pour les approximants d'ordres 3 à 8

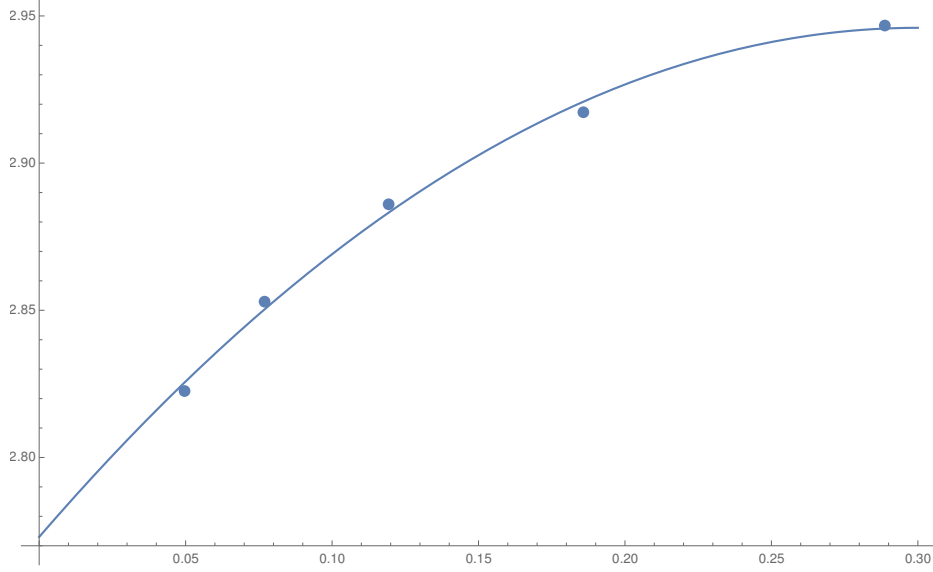


Figure 14: Masse effective inverse en fonction de $\frac{1}{\sqrt{O_k}}$; la courbe est obtenue en ajustant par une fonction polynomiale.

3.5 Susceptibilité magnétique orbitale

Une quantité physique pertinente pour étudier l'effet de la température et du champ magnétique sur un gaz de fermions soumis au potentiel quasipériodique du quasicristal est la susceptibilité magnétique orbitale. Pour calculer cette quantité thermodynamique, on se place dans l'ensemble grand canonique. Dans la suite, on notera la température T , et $\beta = \frac{1}{k_B T}$ avec k_B la constante de Boltzmann. On choisit pour alléger les notations $k_B = 1$. On rappelle le Hamiltonien du système sous champ magnétique :

$$H_B = - \sum_{\langle i,j \rangle} e^{-i\theta_{i \rightarrow j}} |i\rangle \langle j|$$

avec

$$\theta_{i \rightarrow j} = 2\pi \int_i^j \mathbf{dl} \cdot \mathbf{A} = 2\pi \frac{f}{S} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{u}_{\parallel} \times \frac{1}{2} (\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{u}_{\perp}$$

Le spectre de H dépend du champ B ; on le note $\{E_n\} = sp(H_B)$. Le grand potentiel pour un gaz de Fermi polarisé de spin s'écrit :

$$\Omega(T, \mu, B) = -\frac{1}{\beta} \sum_n \ln \left(1 + e^{-\beta(E_n(B) - \mu)} \right) \quad (4)$$

En dérivant deux fois Ω par rapport à B , on obtient la susceptibilité magnétique :

$$\begin{aligned} \chi &= -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial^2 \Omega}{\partial B^2} \right|_{B \rightarrow 0} \\ &= -\frac{1}{V} \sum_n \left. \frac{\partial^2 E_n(B)}{\partial B^2} \right|_{B=0} n_F(E_n - \mu) + \left[\left. \frac{\partial E_n(B)}{\partial B} \right|_{B=0} \right]^2 n'_F(E_n(B) - \mu) \end{aligned}$$

avec V le volume de l'échantillon (l'aire du fragment de quasicristal considéré).

Numériquement, on obtient χ en calculant Ω au voisinage du champ nul, en respectant deux contraintes. D'une part, l'énergie de taille finie doit être inférieure à l'énergie entre deux niveaux de Landau :

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mA_k} \ll \hbar \frac{eB}{m}$$

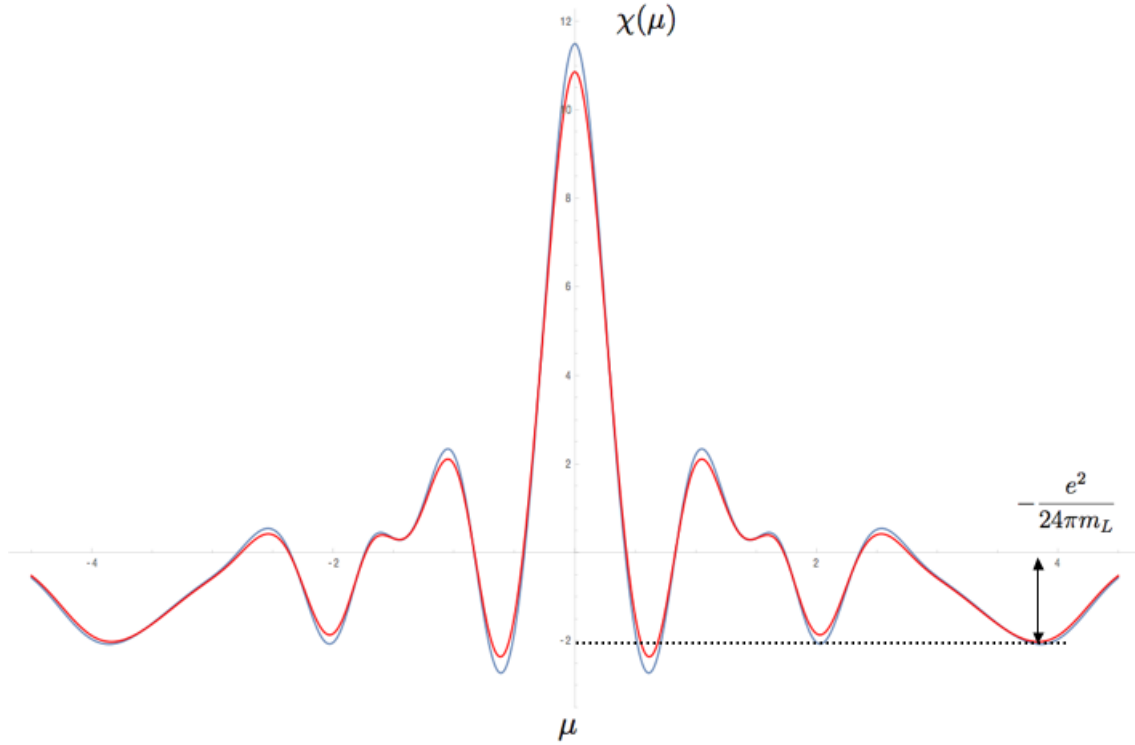


Figure 15: Susceptibilité magnétique orbitale $\chi(\mu)$ à $T = 0.2$, en unités de $\frac{t}{\phi_0^2}$, en fonction du potentiel chimique μ (unités de t), pour l'approximant d'ordre 5 ; bleu : conditions aux bords périodiques ; rouge : conditions aux bords ouverte.

avec m la masse effective d'un électron soumis au potentiel du pavage, ce qui donne, avec $\hbar = 1$, $e = 2\pi$ et $A_k \propto N_k$:

$$\frac{\pi}{6} \frac{1}{N_k} \ll f$$

D'autre part, les oscillations de χ sont amorties à température finie et disparaissent pour $T \gg \hbar \frac{eB}{m} = \frac{2\pi}{m} f$ (voir [15], chap. 14), d'où

$$T \gg \frac{2\pi}{m} f$$

avec $m \approx \frac{1}{2.8}$ ici. Une fois quelques valeurs de Ω calculées dans cette fenêtre de flux, on effectue une interpolation par un polynôme du second degré et on prend le coefficient d'ordre 2 pour obtenir χ .

Le résultat pour l'approximant 5 est tracé fig. 15. On utilise pour le calcul le Hamiltonien en condition aux bords périodiques, afin de s'affranchir des états de bords. La contribution de ces états de bords devient néanmoins négligeable pour T suffisamment grand, comme illustré fig.15.

4 Discussion

Nous discutons à présent les résultats numériques obtenus et proposons des interprétations théoriques.

4.1 Retour sur la masse effective

Nous avons, dans le chapitre précédent, évalué numériquement une masse effective m_L à partir de la pente des niveaux de Landau d'une part (tableau 2), et une masse effective m_B à partir du tenseur de masse effective de la première mini-bande d'autre part (tableau 3). Nous avons obtenu des résultats proches, ce qui semble indiquer que ce soit un paramètre pertinent du système. Il n'est pourtant pas évident, théoriquement, que ces deux masses soient égales.

En effet, m_B est obtenue à partir de l'analyse de la structure de bande de H à champ nul; c'est une quantité purement spectrale, que l'on peut relier à la densité d'états en champ nul. Nous détaillons ici la correspondance : la densité d'état, tracée fig. 11 et fig. 12, est lisse en bord de bande et on peut la confondre avec la densité d'état associée à une relation de dispersion parabolique en $2D$ (constante, égale à $\frac{m}{2\pi}$). On peut donc calculer une masse effective m_{dos} à partir de la densité d'état en bord de bande (cf. fig. 11) ; numériquement, on trouve, avec l'approximant d'ordre 5 et pour $T = 0.02$:

$$\frac{1}{m_{dos}} = 2.7$$

ce qui correspond bien à une valeur proche de m_B .

La susceptibilité magnétique, elle, est reliée à la masse effective m_L : en effet, si l'on suppose, suivant l'observation du papillon et par analogie avec le cas du réseau carré [8], que le spectre du Hamiltonien pour des valeurs de champ magnétique faibles est un spectre de Landau :

$$E_n = \hbar \frac{eB}{m_L} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

alors, en reprenant le calcul de la susceptibilité effectué en 3.5 avec cette fois le grand potentiel :

$$\Omega_L = -\frac{1}{\beta} \sum_n \ln \left(1 + e^{\beta(E_n - \mu)} \right)$$

on obtient la susceptibilité de Landau quand $T \rightarrow 0$ [15] :

$$\chi_L = -\frac{e^2}{24\pi m_L}$$

4.2 Densité d'état et susceptibilité magnétique orbitale

Les résultats que nous avons obtenus pour la densité d'état à champ nul sont cohérents avec les travaux publiés par E. S. Zijlstra dans [16], ce qui conforte la validité de notre modélisation.

Discutons maintenant les propriétés physiques que l'on peut déduire à partir de l'étude de la susceptibilité orbitale et de la densité d'état.

Tout d'abord, on constate que le graphe de la densité d'état présente des fluctuations importantes lorsque T est suffisamment faible. Autour de $E = \pm 0.7$ et $E = \pm 1.2$, on observe des minimum locaux importants de la densité d'états, traduisant la présence de pseudo-gaps. Le minimum en autour de $E = \pm 2$ semble correspondre à un vrai gap, d'après l'étude du papillon en $f = 0$ (ligne noire sur la fig. 9) ; ce gap avait également été observé par Zijlstra [16].

La susceptibilité orbitale fig. 15 présente également d'importantes fluctuations, et change souvent de signe. Son graphe est toutefois plus lisse en bord de bande.

Par ailleurs, le fait que la susceptibilité magnétique orbitale soit négative pour certaines valeurs de μ peut avoir des conséquences intéressantes sur les propriétés magnétiques du système. Nous n'avons pas pris en compte le spin de l'électron dans le calcul de la susceptibilité magnétique, et

nous n'avons donc étudié que la susceptibilité magnétique orbitale. La susceptibilité totale χ_{tot} peut s'écrire sous la forme :

$$\chi_{tot} = \chi_{orb} + \chi_{spin}$$

où χ_{orb} est la susceptibilité magnétique orbitale et χ_{spin} la susceptibilité magnétique de spin. χ_{spin} est toujours positive (donc paramagnétique). Ici, si χ_{orb} prédomine, on obtiendrait une susceptibilité totale négative, soit un comportement diamagnétique. Il s'agit en fait d'une caractéristique propre aux quasicristaux par rapport aux cristaux périodiques ou aux verres, qui, eux, sont paramagnétiques en bord de bande [4]. Ceci a également été vérifié expérimentalement [17], mais ce phénomène n'est pas encore rigoureusement expliqué sur le plan théorique ; on soupçonne cependant que cela soit également une conséquence du mécanisme de stabilisation de Hume-Rothery [18].

4.3 Niveaux de Landau

Nous avons déjà souligné et discuté le fait que les papillons de Hofstadter présentent proche du flux nul des niveaux d'énergie similaires à des niveaux de Landau.

On observe de plus un élargissement des niveaux de Landau. Ce phénomène a déjà été observé pour des pavages périodiques [19] ; il est lié à la brisure de symétrie de translation. Dans le vide (électron libre sous champ magnétique), les niveaux sont infiniment fins [13]. Dans un cristal périodique, les niveaux s'élargissent pour des flux suffisamment grands en raison de la discrétisation de la symétrie de translation [20] (cf. papillon de Hofstadter pour le réseau carré). Dans un quasicristal et, enfin, dans les structures amorphes, les niveaux s'élargissent encore.

4.4 Structure du papillon et nombres d'Octonacci

Dans cette section, nous discutons le lien entre les nombres de la suite d'Octonacci et les singularités du spectre en énergie pour certaines valeurs du flux.

Remarquons tout d'abord que le papillon en conditions aux bords périodique présente une structure extrêmement riche, avec notamment la répétition de motifs similaires (tels la structure en niveaux de Landau proche du flux nul) en des valeurs particulières du flux. Nous avons déjà mentionné que ce papillon rappelle fortement le papillon de Hofstadter associé au réseau carré. Toutefois, à la différence du réseau carré, la papillon obtenu ici n'a pas a priori une structure fractale, dans la mesure où il ne présente visiblement pas de symétrie d'échelle parfaite. Il est toutefois beaucoup plus difficile d'analyser le spectre en $2D$; dans le cas $1D$, comme la séquence de Fibonacci, le théorème de gap-labelling donne une description analytique du spectre et met en évidence la nature fractale de celui-ci, mais il n'existe pas d'extension au cas $2D$ à ce jour.

Le papillon présente des comportements particuliers pour certaines valeurs du flux. En particulier, autour du flux $f_c \approx 0.34$ et $f'_c = 1 - f_c \approx 0.66$, l'énergie de l'état fondamental admet un minimum local, et de nouveaux niveaux de Landau se forment autour de cette valeur du flux (f_c et f'_c sont marqués par les droites rouges et vertes de la fig. 9). Cette valeur particulière vaut précisément, pour la maille de l'approximant d'ordre k :

$$f_c = \frac{O_{2k+1} + O_{2k}}{2O_k^2}$$

On remarque également une structure particulière autour de $E = \pm 2$ (cf. fig. 7 et fig. 9) : il y a un gap en énergie, dont nous n'expliquons pour le moment pas l'origine. On en retrouve la trace dans le diagramme de Wannier fig. 13, ainsi que sur le graphe de la densité d'états fig. 11 : la densité d'états présente un minimum local autour de $E = \pm 2$, signature d'un gap.

4.5 Diagramme de Wannier - Nombres de Hall

Nous commentons ici les informations contenues dans le diagramme de Wannier fig. 13.

Tout d'abord, on constate que le diagramme comporte des droites de pente entières (en rouge). Celles-ci correspondent à des nombres de Hall entiers (1, 2, 3...), et donnent la conductivité de Hall en unité de quantum de conductance [21].

Outre les droites de pente entière, on observe des droites de pente nulles, ce qui est inhabituel ; les droites de pentes nulles correspondent probablement à des gaps créés par l'ordre quasipériodique et pourraient être une signature de cet ordre quasipériodique, dans la mesure où l'on n'observe pas de telles droites dans les diagrammes de Wannier des cristaux périodiques.

5 Conclusion et perspectives

Nous avons étudié numériquement et théoriquement les propriétés spectrales et magnétiques du pavage octogonal, un pavage quasipériodique de type $4 \rightarrow 2$. Nous avons choisi le modèle des liaisons fortes premiers voisins, ce qui est usuel dans l'étude des cristaux et quasicristaux.

Nous avons tout d'abord étudié la densité d'état du Hamiltonien à champ nul. Nos résultats sont cohérents avec les travaux de [16], ce qui nous a conforté dans la validité de notre modèle. La densité d'état présente les caractéristiques attendues pour un quasicristal, à savoir notamment une densité d'états bruitée, et l'existence de gaps et pseudo-gaps.

Pour l'étude sous champ, nous sommes parvenus à placer le pavage sur un tore (conditions aux bords périodiques), ce qui n'avait jamais été réalisé et qui nous a permis d'obtenir un papillon (spectre en fonction du flux magnétique) non pollué par les états de bords, qui sont inévitablement présents lorsque l'on étudie numériquement un pavage de taille finie en conditions aux bords ouvert (ce qui est généralement fait pour des raisons de facilité).

Le papillon du pavage octogonal possède une structure particulière, dont on a extrait plusieurs informations. Proche du flux nul, on observe des niveaux de Landau, ce qui était prévisible en présence d'un champ magnétique uniforme. Ces niveaux de Landau rappellent ceux du papillon de Hofstadter pour le réseau carré, à cela près qu'ils s'élargissent d'avantage avec le flux, probablement en raison de la brisure de symétrie de translation par rapport au réseau carré périodique [20]. On constate une autosimilarité du papillon en la valeur de flux

$$f_c = \frac{O_{2k+1} + O_{2k}}{2O_k^2}$$

avec notamment l'émergence de nouveaux niveaux de Landau ; il s'agit d'un constat empirique, qu'il serait intéressant d'étudier d'avantage sur le plan théorique, en s'inspirant par exemple de l'étude du papillon du réseau carré [8].

La présence de niveaux de Landau suggère l'existence d'une masse effective pertinente pour décrire une particule dont l'évolution est régie par notre Hamiltonien. Nous avons calculé une masse effective par plusieurs méthodes : en utilisant le tenseur de masse effective de la première mini-bande d'une part (tableau 3), et par mesure directe de la pente des niveaux de Landau (tableau 2). Ces deux approches donnent des résultats assez différents (écart relatif de 9%), ce qui signifie soit, que les erreurs numériques sont trop importantes (dues par exemple à une convergence lente des valeurs numériques obtenues avec des systèmes de taille finie et non de taille infinie), soit que ces deux approches donnent des masses effectives associées à des propriétés physiques différentes.

Le diagramme de Wannier associé au papillon révèle une structure étonnante, avec des droites de pente non nulles et des droites de pente nulle. Les pentes non nulles ont des valeurs entières, et correspondent aux valeurs de la conductivité de Hall. Celles de pente nulle sont plus difficiles à interpréter, notamment car il n'est pas habituel d'avoir de telles droites pour les diagrammes de Wannier de cristaux. Elles pourraient être la signature de l'ordre quasipériodique, c'est-à-dire qu'elles correspondraient à des gaps émergeant de la structure quasipériodique. Pour vérifier cette conjecture, on pourrait par exemple introduire du désordre dans le pavage et étudier la persistance ou non de ces droites.

Pour finir, nous avons étudié la susceptibilité magnétique orbitale du système sous champ, à température non nulle. Nous observons que celle-ci est diamagnétique en bord de bande.

Il serait, pour la suite, intéressant de pousser d'avantage l'étude des gaps associés à une pente nulle dans le diagramme de Wannier, en étudiant par exemple leur stabilité lorsque l'on introduit du désordre dans la structure. Il faudrait également poursuivre l'étude du papillon, pour comprendre la comportement singulier du spectre en $f_c = \frac{O_{2k+1} + O_{2k}}{2O_k^2}$.

En outre, la méthode utilisée pour étudier les propriétés sous champ du pavage octogonal en le plaçant sur un tore pourrait s'étendre à d'autres pavages quasipériodiques, ce qui permettrait d'obtenir plus d'informations sur des géométries quasipériodiques encore peu explorées et de comparer avec les résultats obtenus dans le cas du pavage octogonal.

References

- [1] D. Gratias J. W. Cahn D. Shechtman, I. Blech. Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 53, 1984.
- [2] M. Senechal. *Quasicrystals and geometry*. Cambridge University Press, 1995.
- [3] C. Kittel. *Physique de l'état solide*. Dunod, 1998.
- [4] C. Janot. *Quasicrystals, a primer*. Clarendon Press, Oxford, 1994.
- [5] J. C. Lasjaunias G. Fourcaudot F. Cyrot-Lackmann C. Berger, A. Gozlan. Electronic properties of quasicrystals. *Physica Scripta*, T35:90–4, 1991.
- [6] J. Vidal. Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 1999.
- [7] T. Ishimasa et al. M. Mori, S. Matsuo. Photoemission study of an AlCuFe icosahedral phase. *J. Phys. Cond. Matter*, 3:767–771, 1991.
- [8] D. R. Hofstadter. Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 14:2239, 1976.
- [9] G. C. Shephard R. Ammann, B. Grunbaum. Aperiodic tiles. *Discrete Comput. Geom.*, 8:1–25, 1992.
- [10] C. Oguey M. Duneau, R. Mosseri. Approximants of quasiperiodic structures generated by the inflation mapping. *J. Phys. A*, 22:4549–4564, 1989.
- [11] R. E. Peierls. Aperiodic tiles. *Z. Phys.*, 80:763, 1933.
- [12] E. M. Lifshitz L. D. Landau. *Statistical Physics, part 2, Vol. 9*. Pergamon Press, 1980.
- [13] E. M. Lifshitz L. D. Landau. *Quantum mechanics: Nonrelativistic Theory*. Pergamon Press, 1977.
- [14] N. D. Mermin N. W. Ashcroft. *Solid State Physics*. Harcourt College Publishers, 1976.
- [15] G. Montambaux E. Akkermans. *Mesoscopic Physics of Electrons and Photons*. Cambridge University Press, 2007.
- [16] E.S. Zijlstra. Electronic structure of the octagonal tiling. *J. of Non-Crystalline Solids*, 334:126–129, 2004.
- [17] S. J. Poon J. L. Wagner, K. M. Wong. Electronic properties of stable icosahedral alloys. *Phys. Rev. B*, 39:8091–5, 1989.
- [18] F. Dénoyer J. Friedel. Les quasicristaux de AlLiCu comme alliages de Hume Rothery. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 305:171, 1987.
- [19] G. H. Wannier F. H. Claro. Magnetic subband structure of electrons in hexagonal lattices. *Phys. Rev. B*, 19:6068–74, 1979.
- [20] A. Rauh. On the broadening of Landau levels in crystals. *Phys. Stat. Sol.*, 69:K9, 1975.
- [21] A. C. Gossard D. C. Tsui, H. L. Stormer. Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit. *Phys. Rev. Lett.*, 48:1559–62, 1982.