

Quasicristaux sous champ magnétique

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

¹ENS Cachan, France ; ² Laboratoire de Physique du Solide, Université Paris-Sud, Orsay, France ; ³
Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, Université Pierre et Marie Curie, Paris,
France

Janvier - Mars 2016



université
PARIS-SACLAY



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 substitution	5
2.2	Le pavage octogonal	6
2.2.1	Définition	6
2.2.2	Quelques remarques - Comparaison avec le pavage de Rauzy	7
3	Étude numérique du pavage octogonal, à champ nul et sous champ	7
3.1	Construction numérique	7
3.2	Modélisation et calcul du Hamiltonien des liaisons fortes	8
3.2.1	Champ nul	8
3.2.2	En présence de champ magnétique	9
3.3	Étude spectrale	11
3.3.1	Papillon en conditions aux bords ouvertes	11
3.3.2	Papillon en condition aux bords périodiques	11
3.3.3	Densité d'états - Diagramme de Wannier	12
3.4	Masse effective	12
3.5	Susceptibilité magnétique	14
4	Discussion	15
4.1	Retour sur la masse effective	15
4.2	Densité d'état et susceptibilité magnétique	17
4.3	Niveaux de Landau	17
4.4	Structure du papillon et nombres d'Octonacci	17
4.5	Indexation des gaps - Diagramme de Wannier - Nombres de Chern	18
4.6	Localisation de la fonction d'onde	18
5	Conclusion	18

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" [], 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, i.e. que seule une structure invariante par translation pouvait remplir tout l'espace ; la théorie de la cristallographie décrivait alors complètement ces systèmes. Cet axiome a été remis en cause lors de la découverte 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. La notion de "cristal" a alors été étendue, pour désigner les solides ayant un diagramme de diffraction discret ; la symétrie d'un tel solide est alors donnée par les symétries de son diagramme de diffraction (Marjorie Senechal). Par la suite, d'autres structures quasipériodiques ont été mises en évidence, tant sur le plan expérimental que mathématique. Parmi les exemples connus de structures quasipériodiques figurent notamment le pavage de Penrose (construction mathématique à 2 dimensions, découverte quelques temps avant les quasicristaux), la séquence de Fibonacci (1D), le pavage de Rauzy et le pavage octogonal.

Outre leur géométrie très intéressante, les quasicristaux présentent expérimentalement des propriétés différentes de celles attendues des métaux qui les constituent (la conductivité thermique de AlPdMn ou AlCuFe, par exemple, est de deux ordres de grandeurs inférieure à celle de l'Al pur), ce qui indique que la structure géométrique de ces matériaux a des conséquences profondes sur leurs 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 température ambiante, mais deviennent super-élastiques proche du point de fusion ; ils présentent aussi une conductivité optique anormale. Les propriétés de transport ont fait l'objet de nombreux travaux : l'évolution d'un paquet d'onde est en effet caractérisée par $\Delta x(t) \propto t^\beta$, avec $\beta < 1$. Cet exposant est plutôt bien compris pour le cas 1D mais moins pour autres dimensions. En 2D, seuls les pavages octogonal et labyrinthe ont permis de mesurer l'exposant β .

L'étude de la localisation de la fonction d'onde a également motivé beaucoup de travaux. Un ansatz a été proposé par Sutherland, et s'accorde bien avec les simulations numériques, mais son interprétation est mal comprise et demeure un sujet de recherche ouvert.

L'objet de ce stage est d'étudier le cas du pavage octogonal, qui, contrairement à la plupart des autres quasicristaux étudiés, provient de la 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 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 effectuée dans le cas du pavage octogonal. Dans une dernière partie, nous discuterons les résultats numériques obtenus, les comparerons aux résultats connus pour d'autres pavages quasipériodiques et nous 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 donne une intuition permet de comprendre leur géométrie particulière. Le principe est de projeter une structure périodique 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 le volume engendré lorsque l'hypercube unité de dimension D parcourt un sous-espace E_{\parallel} de dimension d sur ce même espace E_{\parallel} ; 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 dimensions D .

Illustrons la méthode sur un exemple $2 \rightarrow 1$: la séquence de Fibonacci. Considérons un réseau carré en 2 dimensions, et traçons la droite passant par l'origine O , de pente $\alpha = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$, le nombre d'or. Cette droite définit l'espace E_{\parallel} sur lequel nous allons projeter une partie du réseau carré. 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 on faisant glisser le carré unité le long de E_{\parallel} .

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 $\alpha = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ pour E_{\parallel} , prenons une droite de pente rationnelle $\alpha_n = \frac{p_n}{q_n}$, où $p_n = F_{n-1}$ et $q_n = F_n$ sont deux nombres successifs de la suite de Fibonacci, définie par récurrence par :

$$\begin{cases} F_1 = 1 \\ F_2 = 2 \\ F_{n+1} = F_n + F_{n-1} \end{cases}$$

et dont le rapport tend vers $\alpha : \frac{p_n}{q_n} \rightarrow_{n \rightarrow \infty} \alpha$. Le cas $\frac{3}{5}$ est illustré fig. (). On reprends maintenant la construction décrite précédemment. Il 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. Les premières séquences périodiques pour $\frac{p_n}{q_n} = \frac{3}{5}, \frac{5}{8}, \frac{8}{13}$ sont :

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

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. Par passage à la limite $n \rightarrow \infty$, on obtient une séquence quasipériodique.

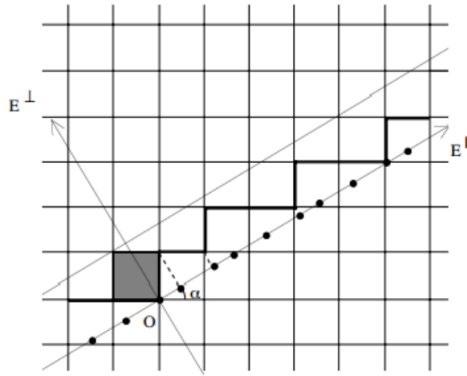


Figure 1: Construction d'un approximant rationnel de la séquence de Fibonacci ; le carré gris est glissé le long de la droite de pente $\frac{3}{5}$ et définit ainsi la zone d'acceptance ; les points sélectionnés et les arêtes les reliant sont projetés sur E_{\parallel} parallèlement à E_{\perp} .

De façon similaire, on peut construire une infinité de pavages quasipériodiques. Parmi les plus connus, outre la séquence de Fibonacci, on retrouve les pavages de Rauzy (de type $3 \rightarrow 2$) et de Penrose (de type $5 \rightarrow 3$) (fig. ()).

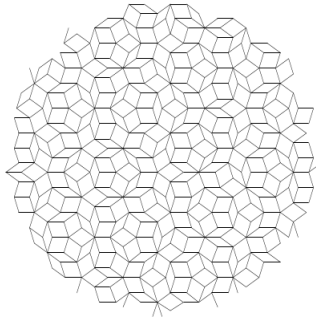


Figure 2: Fragment du pavage de Penrose, $5 \rightarrow 2$

À la différence des pavages de Rauzy et de Penrose, le pavage octogonal est de type $4 \rightarrow 2$; ceci a des conséquences profondes sur le spectre en énergie et la fonction d'onde d'un électron évoluant dans un quasicristal octogonal, comme nous le verrons par la suite.

2.1.2 Méthode par inflation et substitution

Les structures quasipériodiques peuvent aussi être construites par la méthode dite d'inflation et substitution, qui consiste à construire de façon itérative le pavage en appliquant des règles d'inflation sur des blocs élémentaires qui constituent la structure.

Pour la séquence de Fibonacci, les règles de substitution sont :

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

Le cas du pavage octogonal est illustrée fig. ().

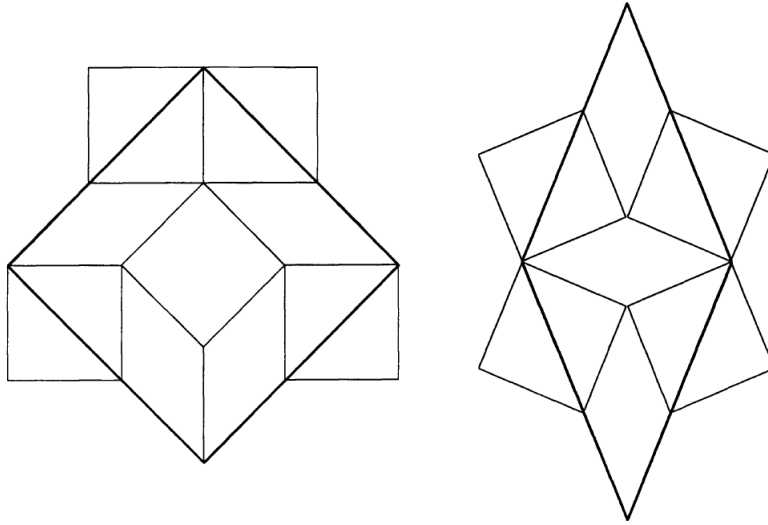


Figure 3: Règles d'inflation et substitution pour le pavage octogonal ; un carré est transformé suivant le schéma de gauche, un losange suivant le schéma de droite.

2.2 Le pavage octogonal

2.2.1 Définition

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 :

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

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 obtient le pavage en projetant le volume engendré par l'hypercube de dimensions 4 parcourant E_{\parallel} sur E_{\parallel} , parallèlement à E_{\perp} . De même que pour la séquence de Fibonacci, on peut définir des approximations périodiques pour le pavage octogonal à partir de la suite d'"Octonacci" :

$$\begin{cases} O_1 = 1 \\ O_2 = 2 \\ O_{n+1} = 2O_n + O_{n-1} \end{cases}$$

Ces nombres interviennent dans les coefficients des puissances successives de M . Les premiers termes de cette séquence sont : $\{1, 2, 5, 12, 29, 70, 169, \dots\}$. L'approximant d'ordre n s'obtient en prenant pour E_{\parallel} le sous-espace : $E_{\parallel}^n = M^n(E_0)$, où E_0 est un plan rationnel de référence (voir détails dans Dunneau Mosseri).

On obtient finalement un pavage constitué de carrés et de losanges. Les grands carrés et les losanges ont la même aire; Il est possible de déformer les longueurs des arêtes pour le tracé, de façon à obtenir un pavage avec soit :

- des arêtes de même longueur, donnant un rapport d'aires irrationnel pour les tuiles : $\frac{\text{grande aire}}{\text{petite aire}} = \sqrt{2}$;

- des arêtes de longueurs différentes, telles que $\frac{\text{grande arête}}{\text{petite arête}} = \sqrt{2}$ donnant des aires de rapport rationnel : $\frac{\text{grande aire}}{\text{petite aire}} = 2$.

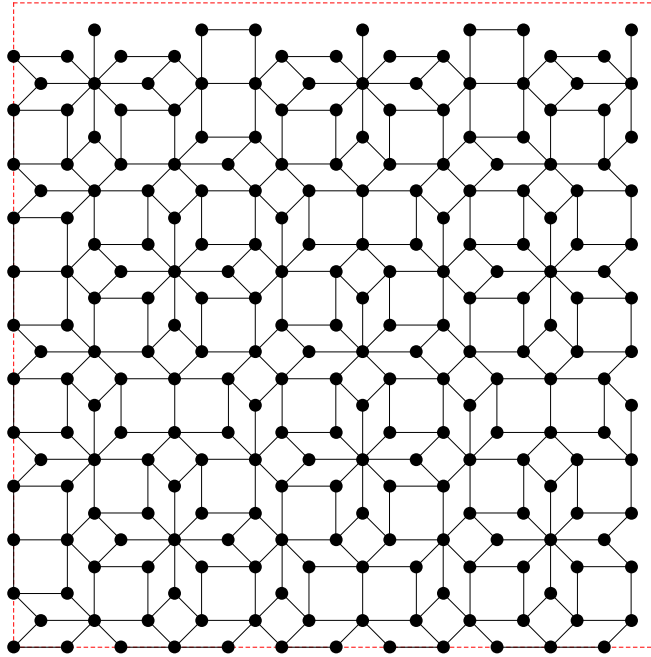


Figure 4: Approximant d'ordre 3 pour le pavage octogonal ; ici, les arêtes ont été légèrement déformées de façon à obtenir des plaquettes d'aires commensurable (i.e. de rapport rationnel).

Nous choisissons pour la suite le cas de rapport d'aires rationnel, afin d'obtenir une périodicité du flux magnétique à travers les plaquettes.

2.2.2 Quelques remarques - Comparaison avec le pavage de Rauzy

Avant d'aller plus loin, relevons quelques caractéristiques du pavage octogonal et les différences avec le pavage de Rauzy.

Tout d'abord, justifions la dénomination "pavage octogonal" : si l'on regarde la projection du pavage sur l'espace perpendiculaire E_{\perp} et non sur E_{\parallel} , fig. (), on obtient un réseau octogonal ; 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.()) présente également une structure octogonale, d'où le nom.

Ensuite, remarquons que, dans le cas du pavage de Rauzy, les sites ont tous une coordinnence valant 3 ou 4, alors que pour le pavage octogonal, on obtient des sites de coordinnence 3, 4, 5, 6 et 8, ce qui devrait notamment avoir un impact important sur la structure et les propriétés de localisation de la fonction d'onde d'un électron soumis au potentiel du quasicristal.

Pour finir, remarquons que, comme pour tous les quasicristaux, on observe une répétition spatiale d'environnements locaux ; par exemple, les étoiles à 8 branches se retrouvent à des espacements presque constants dans tout le pavage. Cette propriété est appelée théorème de Conway.

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

3.1 Construction numérique

Pour l'étude numérique, étant donné qu'on ne peut pas implémenter un pavage de taille infinie, on utilise les approximants périodiques du pavage octogonal. La première semaine de mon stage a été consacrée à coder, avec Mathematica, la construction de ces approximants ; le but était principalement de m'assurer que j'avais compris la construction géométrique ; mon code étant trop

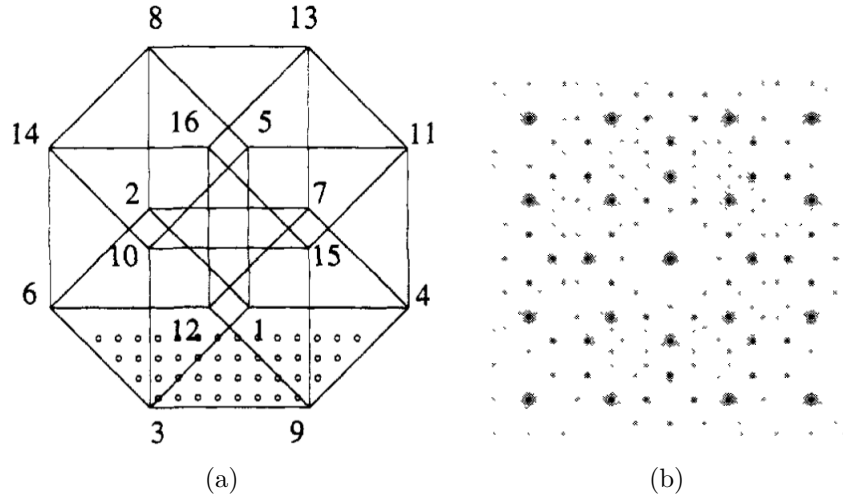


Figure 5: (a) Projection de la zone d'acceptance pour le pavage octogonal sur le plan perpendiculaire E_{\perp} . (b) Diagramme de diffraction du pavage octogonal. Ces deux images mettent en évidence la symétrie d'ordre 8 sous-jacente à la structure du pavage octogonal.

coûteux en temps de calcul, j'ai utilisé par la suite le code mis en place par R. Mosseri. 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 le pavage projeté dans les plans E_{\parallel} et E_{\perp} .

Nous avons, grâce à ce code, la possibilité d'exécuter des calculs en un temps raisonnable pour des approximants jusqu'à l'ordre 8 (1 607 521 sites).

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. La maille est par construction normalisée à 1 ; pour l'analyse numérique, nous la renormaliserons à $2N_k$, ce qui revient à fixer la longueur de la plus petite arête du réseau à 1. La fig. () montre la maille élémentaire d'ordre 3.

3.2 Modélisation et calcul du Hamiltonien 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 et 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.

On choisit de plus le système d'unités tel que : la constante de Planck $\hbar = 1$, et la charge élémentaire $e = 2\pi$.

3.2.1 Champ nul

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

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

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 $H_{i,j} = \begin{cases} -1 & \text{si } i, j \text{ reliés par une arête} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$ 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 revient à ajouter des liens dans la matrice de connectivité afin de relier les mailles élémentaires entre elles IMAGE

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 :

$$M_{OBC, B=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_{PBC, B=0} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

3.2.2 En présence de champ magnétique

Pour tenir compte d'un champ magnétique \mathbf{B} , il faut ajouter une phase (dite de Peierls) au terme de couplage $t_{i,j} \rightarrow te^{-i\theta_{i \rightarrow j}} = te^{-i\frac{e}{\hbar} \int_i^j \mathbf{dl} \cdot \mathbf{A}}$, où \mathbf{A} est le potentiel vecteur dont dérive le champ. 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 $\begin{cases} \mathbf{u}_{\perp} = \cos \alpha \mathbf{u}_x + \sin \alpha \mathbf{u}_y \\ \mathbf{u}_{\parallel} = -\sin \alpha \mathbf{u}_x + \cos \alpha \mathbf{u}_y \end{cases}$ et où α désigne l'angle entre les vecteurs $\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y$ de base du repère orthonormé de référence et la base $\{\mathbf{u}_{\perp}, \mathbf{u}_{\parallel}\}$. Un calcul standard donne alors pour la phase de Peierls :

$$\theta_{i \rightarrow j} = \int_i^j \mathbf{dl} \cdot \mathbf{A} = B \left(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i \right) \cdot \mathbf{u}_{\parallel} \left(\frac{\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_i}{2} \cdot \mathbf{u}_{\perp} \right)$$

et pour le flux magnétique à travers une plaquette d'aire S : $\phi = \frac{eB}{2\pi\hbar} S$. On introduit le paramètre adimensionné $f = \frac{\phi}{\phi_0}$, avec $\phi_0 = \frac{h}{e}$ un quanta de flux, h la constante de Planck et e la charge élémentaire. Dans le système d'unités choisi, $\hbar = 1$ et $e = 2\pi$, ce qui donne finalement $\phi_0 = 1$, $f = BS$ et pour le terme de Peierls :

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

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 $f = B$ ou $f = 2B$, c'est-à-dire que le système présente une structure périodique en flux. On peut ainsi étudier l'effet de la quasipériodicité du pavage seule, sans les effets d'une éventuelle quasipériodicité du champ que l'on aurait dans le cas de rapport d'aires de plaquettes irrationnelles.

En conditions aux bords périodiques, il est de plus nécessaire d'assurer un raccordement périodique du potentiel vecteur \mathbf{A} : il doit être identique sur deux arêtes identifiées par périodicité. Cela limite le nombre de valeurs de flux autorisées. De fait, nous avons montré que, avec la jauge de Landau choisie, seuls les flux de valeur $0, \frac{1}{2}$ et 1 sont autorisés... Il faut donc trouver une autre condition de jauge, ce qui n'a pas été facile à obtenir. L'idée est d'introduire un opérateur de translation $T_{\mathbf{a}}$, où \mathbf{a} désigne un vecteur de maille suivant lequel une maille élémentaire est répétée dans l'espace pour obtenir une structure périodique, et de modifier la jauge pour obtenir un nouveau Hamiltonien H' qui commute avec $T_{\mathbf{a}}$. Partons du Hamiltonien H_0 , correspondant à la matrice de connectivité en conditions aux bords périodiques et dont les coefficients non nuls sont de la forme $(H_0)_{i,j} = -e^{-2i\pi\theta_{i \rightarrow j}}$. On définit l'opérateur de translation suivant \mathbf{a} , où \mathbf{a} désigne un vecteur de maille (i.e. tel que le pavage soit invariant par translation suivant \mathbf{a}) :

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

Vérifions que $[H_0, T_{\mathbf{a}}] \neq 0$:

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

Cherchons donc une transformation de jauge $\chi(\mathbf{r})$, qui laisse le système invariant par translation suivant \mathbf{a} , i.e. telle que :

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

Calculons :

$$e^{2i\pi\chi(\mathbf{r})} T_{\mathbf{a}} H_0 T_{-\mathbf{a}} e^{-2i\pi\chi(\mathbf{r})} = \sum_{\langle i, j \rangle} e^{2i\pi [\chi(\mathbf{r}_i) - \chi(\mathbf{r}_j) + \int_{\mathbf{i}}^{\mathbf{j}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{l} - \mathbf{a}) \langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle]} |i\rangle \langle j|$$

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 ce 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.

Pour plus de détail sur l'utilisation de la composition d'une translation géométrique et d'un changement de jauge magnétique, voir Landau (REF)

Cette prescription a permis de bien définir la matrice de connectivité en conditions aux bords périodiques. Mes encadrants l'ont implémenté pour le pavage de Rauzy pour vérifier la cohérence avec les papillons déjà tracés dans ce cas, et je l'ai codé pour le pavage octogonal.

Les matrices de connectivité étant désormais bien définies, nous pouvons étudier les propriétés spectrales (le spectre du Hamiltonien) et magnétiques du système.

Remarque : une façon de tester que cette transformation de jauge fonctionne est de calculer la trace de la puissance quatrième de la matrice de connectivité : celle-ci doit être de la forme, pour la matrice associée à l'approximant d'ordre k :

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

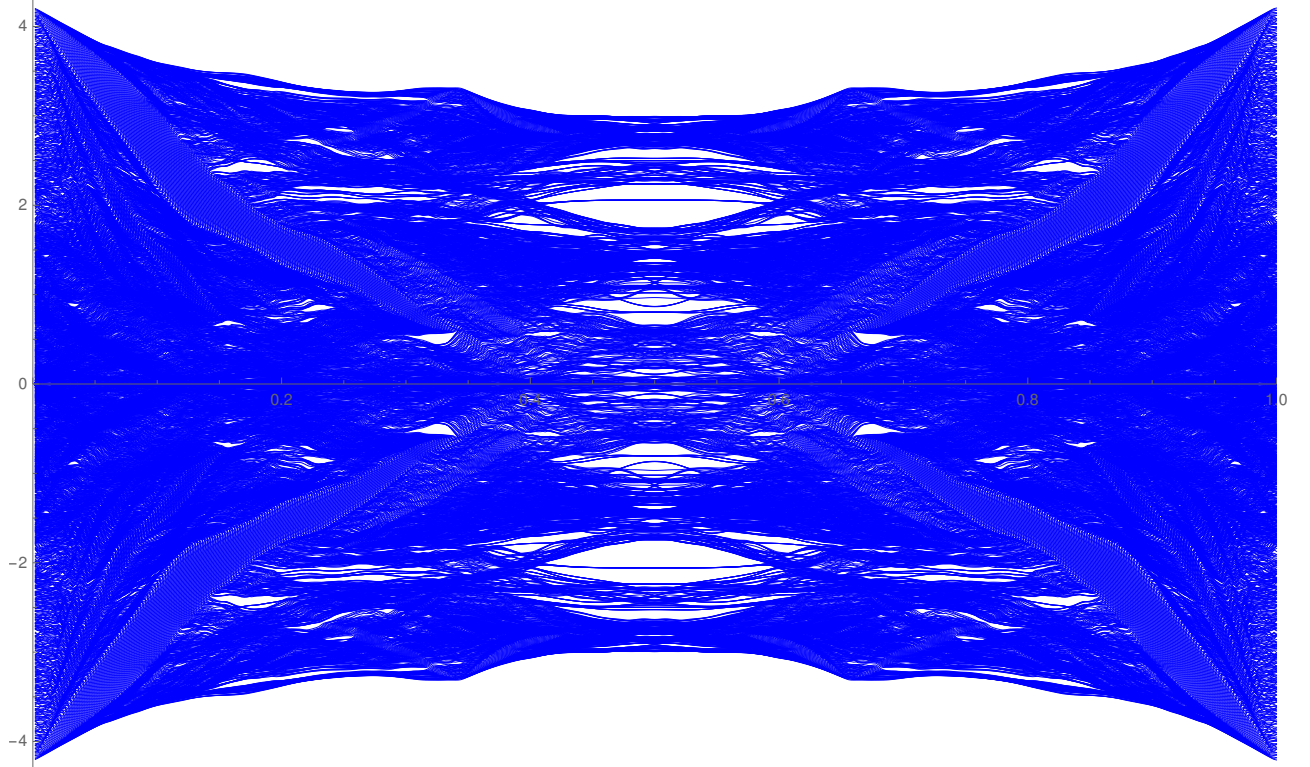


Figure 6: Papillon pour l'approximant d'ordre 4 (1393 sites) en conditions aux bords ouvertes.

où P_k , G_k désignent respectivement le nombre de petites plaquettes et de grandes plaquettes dans le pavage et C une constante ; en effet, $Tr(M^4)$ donne tous les chemins de longueur 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). Cette propriété est bien vérifiée ici.

3.3 Étude spectrale

3.3.1 Papillon en conditions aux bords ouvertes

En conditions aux bords ouverts, il n'y a pas de contraintes sur les valeurs de flux autorisées, et l'on peut tracer le papillon par diagonalisation de la matrice de connectivité pour un grand nombre de valeurs de flux. La fig. () montre le papillon pour l'approximant d'ordre 4 (1393 sites). On vérifie bien que la symétrie $f \rightarrow 1 - f$ est conservée, comme prévu par 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 figure () pour des raisons de résolution graphique, mais elle est bien visible si l'on zoom proche du champ nul : voir fig. ().

3.3.2 Papillon en condition aux bords périodiques

La condition sur \mathbf{A} que nous avons obtenue pour le cas périodique nous impose de prendre des valeurs de B de la forme : $B = \frac{p}{A_k}$, avec $p \in \mathbb{Z}$, A_k et A_k la surface de la maille élémentaire pour l'approximant d'ordre k , que l'on exprime à partir des nombres d'Octonacci : $A_k = 2O_k^2$. Cette condition est suffisante pour obtenir un papillon très bien résolu (la limite de résolution étant fixée par l'affichage à l'écran de l'ordinateur, et correspond à 1000 valeurs de flux ; pour l'approximant d'ordre 4, on peut tracer 1682 valeurs de flux, ce qui est amplement suffisant). Le résultat pour

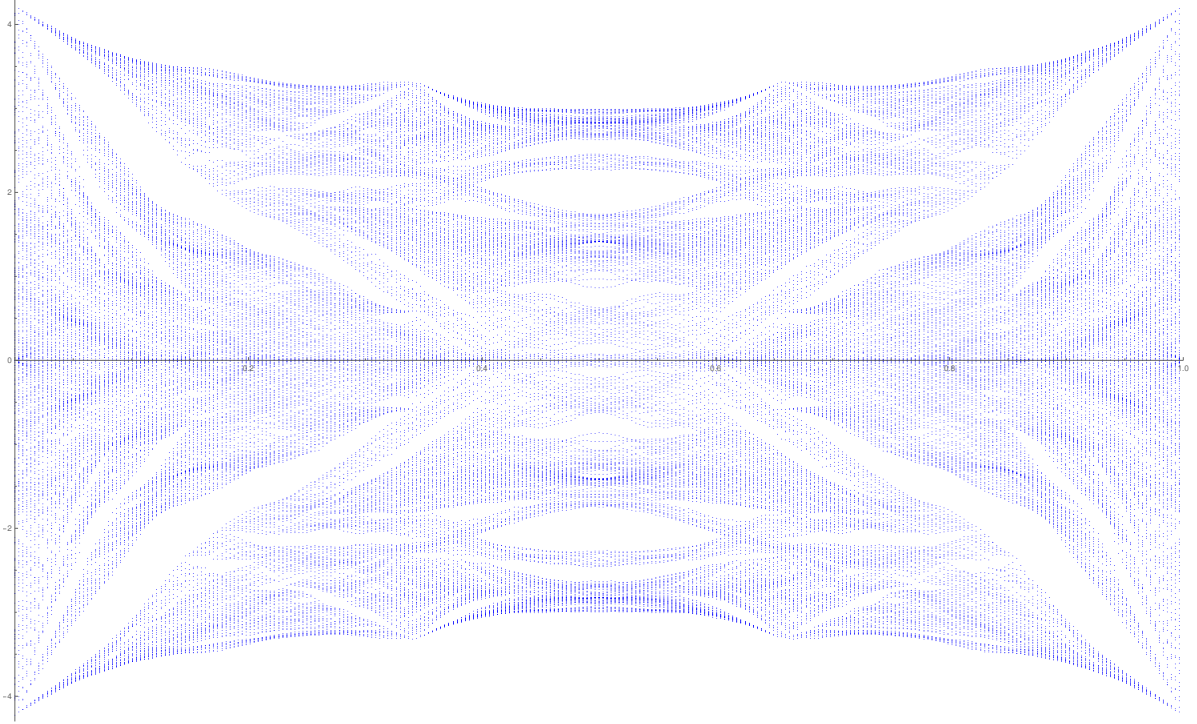


Figure 7: Papillon pour l'approximant d'ordre 3 (239 sites) en conditions aux bords périodiques.

l'approximant d'ordre 4 est donné fig. (). On observe désormais les vrais gaps en énergie du Hamiltonien.

Le papillon en conditions aux bords périodique révèle une structure extrêmement riche, et donne de nombreuses informations sur les propriétés physiques du quasicristal et la dynamique quantique d'un électron soumis au potentiel du pavage octogonal. 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.

3.3.3 Densité d'états - Diagramme de Wannier

Une quantité naturelle à étudier est la densité d'état. À température nulle, elle s'écrit : $\rho_{T=0}(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$, où δ est la distribution de Dirac et $\{E_n\}$ le spectre du Hamiltonien ; il est donc impossible de la tracer à partir d'une expression analytique exacte à $T = 0$. 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. La fig. () montre 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 ρ_T vers une distribution de Dirac.

Pour compléter l'étude de la densité d'états intégrée, on trace le diagramme de Wannier (densité d'états intégrée en fonction du flux, à température nulle) associé au papillon en PBC (voir fig. (). Pour ce diagramme, on fixe arbitrairement une largeur caractéristique, donnant l'écart minimal nécessaire pour définir un gap entre deux niveaux d'énergie. Ce diagramme permet de calculer les nombres de Chern du pavage, qui sont à relier aux propriétés de conductivité du quasicristal ; nous reviendrons sur cela dans le dernier chapitre.

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 calculé

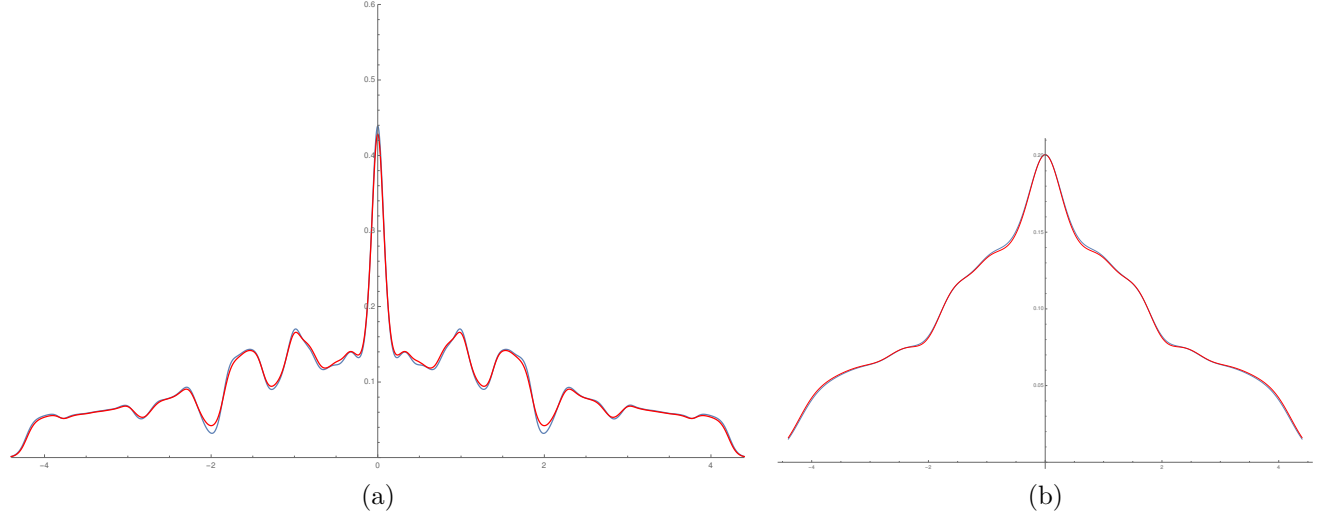


Figure 8: (a) Densité d'états à $T = 0.05$; bleu : conditions aux bords périodiques ; rouge : conditions aux bords ouvertes. (b) Densité d'états à $T = 0.2$; bleu : conditions aux bords ouvertes ; rouge : conditions aux bords périodiques.

numériquement cette masse effective par plusieurs méthodes, qui donnent des résultats cohérents.

Une première méthode intuitive repose sur la structure des niveaux de Landau. Rappelons qu'un électron libre évoluant dans un espace à $2D$ et soumis à un champ magnétique constant et uniforme perpendiculaire à ce plan, présente un spectre en énergie de la forme

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

avec $\omega_c = \frac{eB}{m}$, où m est la masse de l'électron. 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.

Numériquement, on trouve les valeurs suivantes pour la masse effective inverse $\frac{1}{m}$ pour les papillons des approximants 5 et 6 (la précision graphique étant insuffisante pour les approximants précédents) : REFAIRE AVEC PBC

Approximant	5	6
	2.43658	2.43878

Une autre méthode repose sur l'étude des matrices de Bloch $H(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. En diagonalisant ce Hamiltonien, on obtient une relation de dispersion pour $E_n(k)$. L'idée est maintenant de linéariser cette relation de dispersion autour du centre de la première zone de Brillouin de la première minibande ; on obtient alors : $E_1(\mathbf{k}) \approx E_1(\mathbf{0}) + \frac{1}{2}\alpha_{i,j}k_i k_j$, où les $\alpha_{i,j}$ définissent le tenseur de masse effective :

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

La masse effective est alors définie grâce au déterminant de α :

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

En effet, pour une relation de dispersion quadratique $E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\alpha_{i,j}k_i k_j$, la densité d'états est donnée par : $N(E) = \frac{E}{2\pi\sqrt{\det\alpha}} = \frac{mE}{2\pi}$ ($E \geq 0$). Les calculs numériques sont effectués pour les approximants 3, 4, 5, 6, 7 ; les résultats sont résumés dans le tableau (). Les valeurs de la masse effective sont données à 10^{-4} près.

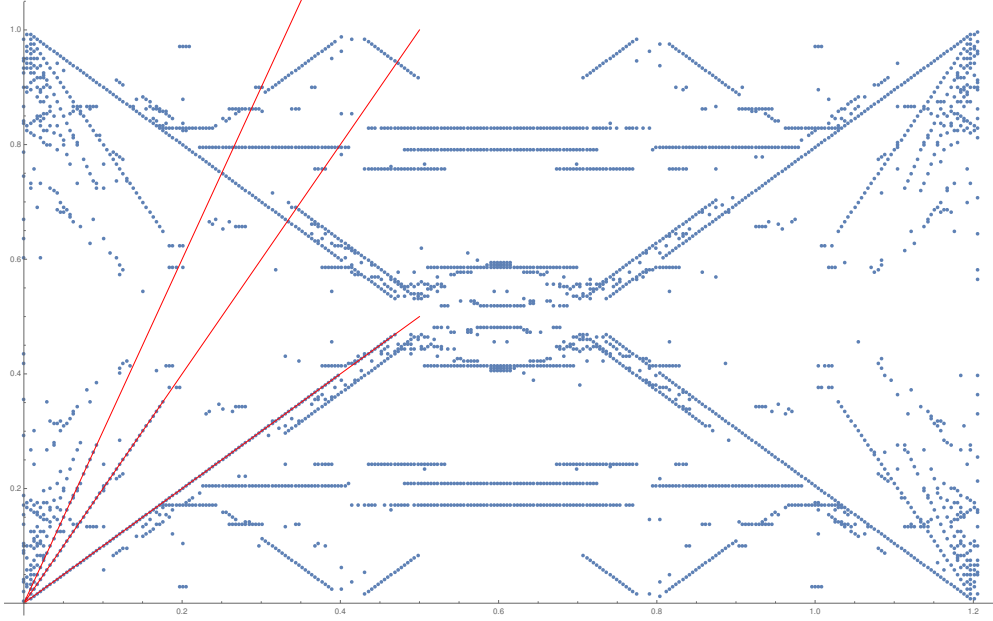


Figure 9: Digramme de Wannier pour l'approximant d'ordre 3, en conditions aux bords périodiques ; en rouge : niveaux de Landau.

ordre 1	3	4	5
α_{xx}	*	2.91737	2.886000
α_{yy}	*	2.91737	2.886201
α_{xy}	*	0.000379781	-0.000188
$\frac{1}{m}$	2.9465	2.9173	2.8861

On observe une bonne concordance entre les résultats obtenus par ces deux méthodes, avec une erreur relative de l'ordre de 15%.

3.5 Susceptibilité magnétique

Une quantité physique pertinente pour étudier l'effet de la température et du champs magnétique sur un gaz de fermions soumis au potentiel quasipériodique du quasicristal est la susceptibilité magnétique. 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 :

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

avec

$$\theta_{i \rightarrow j} = \int_i^j \mathbf{dl} \cdot \mathbf{A} = B(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{u}_{\parallel} \left(\frac{\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_i}{2} \cdot \mathbf{u}_{\perp} \right)$$

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 :

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

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

$$\chi = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial B^2} \Big|_{B \rightarrow 0} = -\frac{1}{V} \sum_n \frac{\partial^2 E_n(B)}{\partial B^2} \Big|_{B=0} n_F(E_n - \mu) + \left(\frac{\partial E_n(B)}{\partial B} \right)^2 n'_F(E_n(B) - \mu)$$

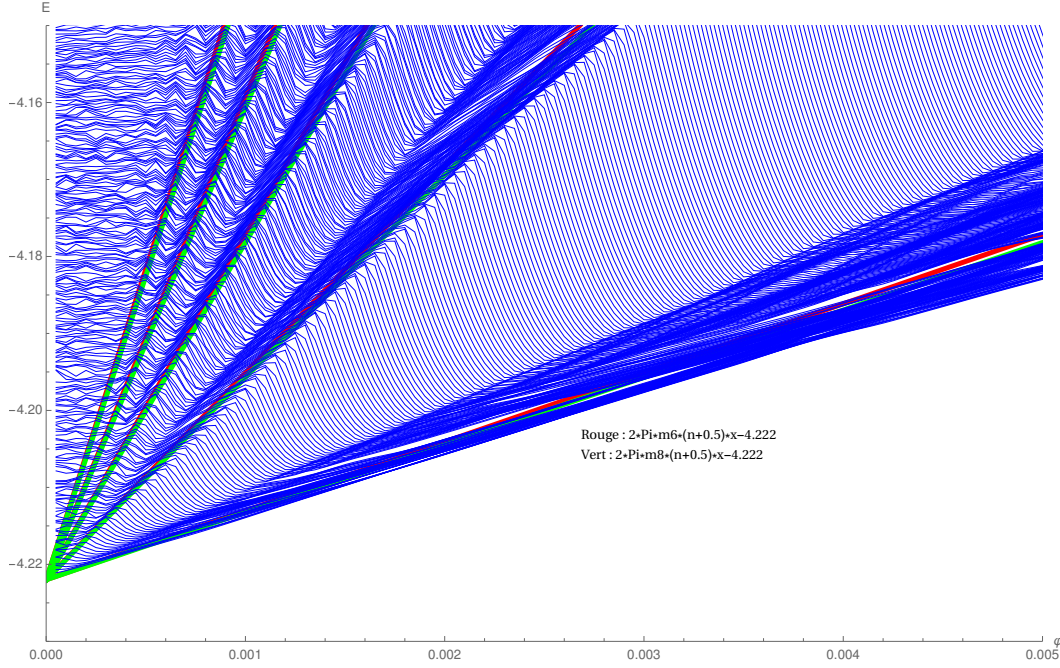


Figure 10: Niveaux de Landau pour le papillon d'ordre 6, conditions aux bords ouvertes ; en rouge et vert, les pentes de niveaux de Landau obtenues avec les masses effectives calculées avec les matrices de Bloch d'ordre 6 et 8 respectivement.

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 : $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m A_k} \ll \hbar \frac{eB}{m}$, 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 $:k_B T \gg \hbar \frac{eB}{m} = \frac{2\pi}{m} f$ (cf Akkermans Montambaux), 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 les approximants 4 et 5 sont tracés fig. (). 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.(). Les différentes courbes de la fig. () illustrent les effets de la température et de la taille du système.

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, et une masse effective m_B à partir du tenseur de

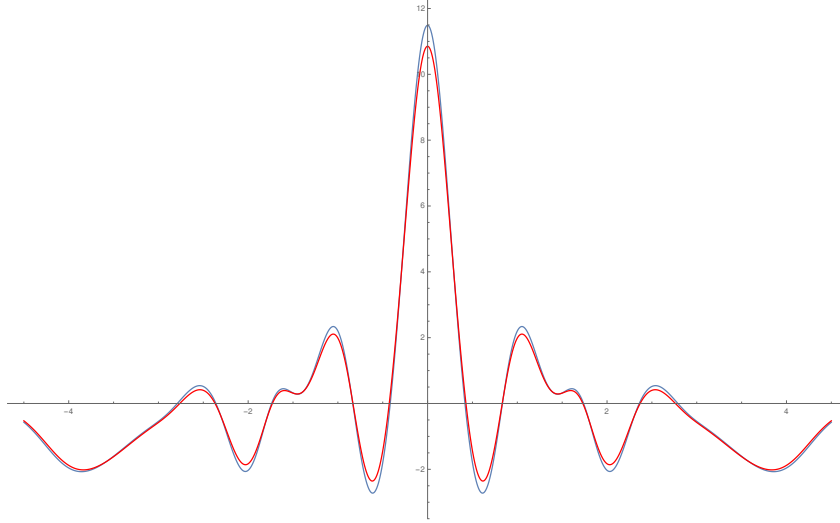


Figure 11: Susceptibilité magnétique à $T = 0.2$ en fonction du potentiel chimique μ , pour l'approximant d'ordre 5 ; bleu : conditions aux bords périodiques ; rouge : conditions aux bords ouverte.

masse effective d'autre part. 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. (), 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 à partir de la densité d'état en bord de bande ; numériquement, on trouve :

REFAIRE CALCUL AVEC APPROX 6 EN PBC

ce qui correspond bien une valeur proche de m_B . Ceci se vérifie aussi dans le cas du pavage octogonal que dans le cas du pavage de Rauzy, désordonné et non désordonné.

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 (cf Montambaux), que le spectre du Hamiltonien pour des valeurs de champ magnétique faibles est un spectre de Landau : $E_n = \hbar \frac{eB}{m_L} (n + \frac{1}{2})$, alors, en reprenant le calcul de la susceptibilité effectué en ?? avec cette fois le grand potentiel :

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

on obtient la susceptibilité de Landau quand $T \rightarrow 0$ (cf Akkermans Montambaux) :

$$\chi_L = -\frac{e^2}{12\pi m_L}$$

Numériquement, on obtient :

REFAIRE CALCUL AVEC APPROX 6 EN PBC

Il semble au contraire que la concordance numérique entre m_B et m_L soit due à la structure quasipériodique. Nous discutons ici cette hypothèse, en faisant appel à des résultats obtenus pour le pavage de Rauzy.

Une étude de masse effective a été menée en parallèle par mes encadrants pour le pavage de Rauzy. Elle révèle aussi une adéquation numérique entre la masse effective calculée avec les niveaux de Landau et celle obtenue avec les matrices de Bloch. Toutefois, en introduisant un désordre en

faisant un "flip" (voir fig. ()) sur des tuiles choisies au hasard dans le pavage de Rauzy, on obtient un papillon très différent de celui du pavage original : hormis les niveaux de Landau, plus aucune structure ne persiste. Pourtant, le "flip" ne change ni la géométrie des tuiles, ni la coordinence moyenne des sites ; seul l'ordre quasipériodique est modifié. De plus, les masses effectives m_B et m_L mesurées sont désormais très différentes, ce qui semble indiquer que ces deux paramètres ont des interprétations physiques différentes ; nous n'avons toutefois pas d'explication rigoureuse de ce phénomène pour le moment.

4.2 Densité d'état et susceptibilité magnétique

Nos résultats pour la densité d'état sont consistants avec des travaux réalisés par Zilstra, ce qui conforte la validité de notre modélisation.

Le graphe de la susceptibilité magnétique montre que $\chi(\mu)$ change souvent de signe lorsque μ varie. On observe de plus que le graphe de χ est beaucoup plus piqué pour de faibles températures. En bord de bande en revanche, la susceptibilité magnétique est plus lisse, et peu s'interpréter comme une susceptibilité de Landau (cf. paragraphe précédent).

On constate que la susceptibilité magnétique est négative en bord de bande (niveau de Fermi) : elle est diamagnétique, ce qui est en accord avec les résultats expérimentaux sur divers quasicristaux.

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. Cette structure est persistante même lorsque l'on introduit du désordre dans la structure quasipériodique (pavage de Rauzy désordonné en faisant un flip sur un certain nombre de plaquettes, comme expliqué dans le paragraphe ??).

On observe un élargissement des niveaux de Landau. Ce phénomène a déjà été observé pour des pavages périodiques (Claro Wannier, et Rauh dans ce papier), et est dû au potentiel lié au réseau.

4.4 Structure du papillon et nombres d'Octonacci

Dans cette section, nous mettons en évidence le lien entre les nombres de la suite d'Octonacci et les singularités du spectre en énergie pour certaines valeurs du flux. Cette correspondance est illustrée fig. () Nous établissons de plus un lien avec des comportements similaires observés pour le pavage de Rauzy.

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. La structure de gaps est aussi très intéressante, en sera commentée dans une section ultérieure. Ce papillon rappelle fortement le papillon de Hofstadter associé au réseau carré. Toutefois, à la différence du réseau carré, le papillon obtenu ici n'a pas a priori une structure fractale parfaite, dans la mesure où il ne présente visiblement pas de symétrie d'échelle parfaite. Toutefois, le spectre semble être de type singulier continu, avec une dimension spectrale dépendante du flux. 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 papilloin présente des comportements particuliers pour certaines valeurs du flux. Pour $f_c \approx 0.34$, l'énergie de l'état fondamental admet un minimum local, et que de nouveaux niveaux de Landau se forment autour de cette valeur du flux. Cette valeur particulière vaut précisément, pour la maille de l'approximant d'ordre k :

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

Il serait intéressant d'appliquer une étude par le groupe de renormalisation.

4.5 Indexation des gaps - Diagramme de Wannier - Nombres de Chern

4.6 Localisation de la fonction d'onde

5 Conclusion

L'étude numérique du pavage octogonal, de type $4 \rightarrow 2$ et donc de codimension 2, a révélé de nombreuses différences avec les pavages connus de codimension 1, ce qui conforte l'hypothèse de l'importance de la codimension les propriétés physiques des quasicristaux. Notamment, contrairement au cas du pavage de Rauzy, pour lequel la fonction d'onde de l'état fondamental est délocalisée, on trouve pour le pavage octogonal une structure plus complexe. Il serait intéressant de poursuivre cette étude, au travers par exemple le rapport de participation inverse. Le papillon du pavage octogonal présente aussi la particularité de ne plus avoir de niveaux de Landau proche du flux $\frac{1}{2}$.