



HAL
open science

Calcul ab-initio de la diffusion quantique dans les approximants de quasicristaux

Guy Trambly de Laissardière, Jean-Pierre Julien, Didier Mayou

► **To cite this version:**

Guy Trambly de Laissardière, Jean-Pierre Julien, Didier Mayou. Calcul ab-initio de la diffusion quantique dans les approximants de quasicristaux. GDR DFT ++, Réunion générale, 27-30 mars 2007, Mar 2007, Autrans, France. hal-00139571

HAL Id: hal-00139571

<https://hal.science/hal-00139571>

Submitted on 2 Apr 2007

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

CALCUL AB-INITIO DE LA DIFFUSION QUANTIQUE DANS LES APPROXIMANTS DE QUASICRISTAUX

Guy TRAMBLY de LAISSARDIÈRE¹, Jean-Pierre JULIEN², Didier MAYOU²

¹ *Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation, CNRS et Université de
Cergy-Pontoise.*

² *Institut Néel, CNRS et Université Joseph Fourier, Grenoble.*

Résumé : Nous présentons des calculs ab-initio de la conductivité électrique dans des approxi-
mants cristallins de quasicristaux. Ces calculs incluent les termes de diffusion quantique au-delà
de l'approximation de Bloch-Boltzmann. Ces termes sont en effet indispensables pour com-
prendre le transport électronique de ses alliages dans lesquels les porteurs de charges ont une
très faible vitesse. Cette approche ab-initio des propriétés de transport devrait pouvoir être
généralisée à d'autres systèmes ayant des porteurs de charge très lents.

L'étude du transport électronique dans l'approximation semi-classique de Bloch-Boltzmann
est possible lorsque le déplacement des porteurs de charges est balistique entre deux collisions
sur des défauts (défauts structuraux ou phonons). Ce régime n'est donc plus valable quand
la distance entre deux collisions est inférieure à l'extension spatiale l des états électroniques.
Ainsi le modèle de Bloch-Boltzmann n'est pas applicable pour les systèmes dont les porteurs
de charge ont une vitesse V très faible : $V < l/\tau$, où τ est le temps de diffusion (relaxation).
Dans ce cas, le transport est dominé par des effets de diffusion quantique. Dans l'approxima-
tion du temps de relaxation, la conductivité électrique σ à fréquence nulle s'écrit comme la
somme de deux termes [1,2] :

$$\sigma = e^2 n_F V_F^2 \tau + e^2 n_F \frac{L^2(\tau)}{\tau} \quad (1)$$

où e , n_F et V_F sont, respectivement, la charge électrique, la densité d'états et la vitesse de
Boltzmann des électrons au niveau de Fermi. Le premier terme, σ_B , de la conductivité est
le terme habituel de Bloch-Boltzmann, et le second terme, σ_{NB} , est responsable des effets de
diffusion quantique.

Nous avons développé une méthode permettant un calcul ab-initio des deux termes de
la conductivité (1). Concrètement, nous partons des états propres électroniques calculés en
TB-LMTO pour déterminer la fonction d'auto-corrélation de la vitesse des électrons donc
l'énergie est proche de E_F . La conductivité est ensuite déterminée dans l'approximation de
temps de relaxation [3].

Cette méthode est utilisée pour l'étude d'approximants cristallins des phases quasi-périodiques
AlCuFe et AlMnSi. Ces phases inter-métalliques complexes, ont des propriétés de transports
très différentes de métaux habituels (très faible conductivité à base température, forte aug-
mentation de la conductivité avec la température et les défauts cristallin, absence de pic de
Drude dans la conductivité optique...).

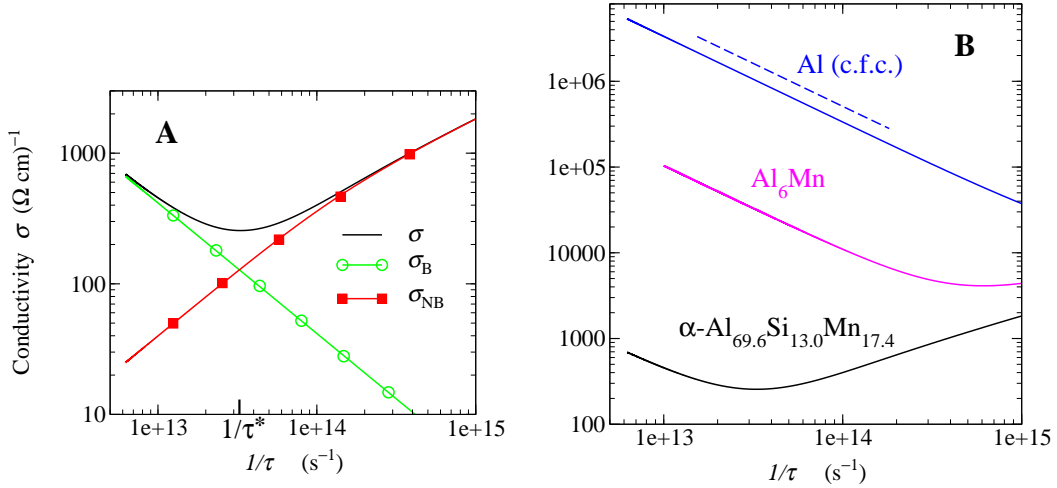


FIG. 1 – Conductivité électrique ab-initio $\sigma(E_F)$ en fonction de l’inverse du temps de diffusion $1/\tau$. **(A)** Dans une phase cubique $\alpha\text{-Al}_{69.6}\text{Si}_{13.0}\text{Mn}_{17.4}$ approximante de la phase icosahédrique AlMnSi. **(B)** Comparaison avec des phases métalliques normales pour lesquelles le terme de Boltzmann domine : c.f.c. Al et orthorhombique Al_6Mn . La droite en pointillés montre les valeurs expérimentales pour Al en estimant τ par le modèle de Drude. [1]

Dans le cas d’alliages métalliques normaux (Al, Al_6Mn), la conductivité calculée $\sigma \simeq \sigma_B$ décroît lorsque $1/\tau$ augmente c’est-à-dire lorsque la température et/ou les défauts structuraux augmentent (voir figure). En revanche, pour l’approximant $\alpha\text{-AlSiMn}$, deux régimes apparaissent clairement : Pour $\tau > \tau^* = 3.03 \cdot 10^{-14}$ s, le comportement est semblable à celui des métaux normaux ; mais pour $\tau < \tau^*$, σ croît avec la température et/ou les défauts structuraux. Les valeurs réalistes de τ ($\tau < \text{quelques } 10^{-14}$ s) correspondent à ce second comportement, en accord quantitatif avec les résultats expérimentaux. Nous avons aussi montré que ce résultat est la conséquence directe d’un phénomène de “backscattering” [4] confinant les électrons sur des distances typiques de 15–20 Å.

Cette approche du transport quantique devrait pouvoir être généralisée aux matériaux dans lesquels les porteurs de charges ont une vitesse V suffisamment faible pour que le libre parcours moyen $V\tau$ soit inférieur à l’extension spatiale des états électroniques.

1. G. Trambly de Laissardière, J. P. Julien et D. Mayou, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 026601 (2006).
2. D. Mayou et G. Trambly de Laissardière, in : Physics of Quasicrystals, series “Handbook of Metal Physics”, Editors T. Fujiwara, Y. Ishii (Elsevier Science), *to appear*; arXiv : cond-mat/0701639
3. D. Mayou, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1290 (2000).
4. G. Trambly de Laissardière, J. P. Julien et D. Mayou, *Phil. Mag.* **86**, 663-669 (2006).