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-00139571v1

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.

GDR DFT ++, Réunion générale,
Autrans, 27-30 mars 2007.

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

Guy Trambly de Laissardière [1], Jean-Pierre Julien [2], Didier Mayou [2]

[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 approximants cristallins de quasicristaux. Ces calculs inclus les termes de diffusion quantique au-delà de l'approximation de Bloch-Boltzmann. Ces termes sont en effet indispensables pour comprendre 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-Bolzmann 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'approximation du temps de relaxation, la conductivité électrique σ à fréquence nulle s'écrit comme la somme de deux termes [1,2] :

$$\sigma \;=\; e^2\, n_{\rm F}\, V_{\rm F}^2\, \tau \;+\; e^2\, n_{\rm F}\, \frac{L^2(\tau)}{\tau} \qquad (1)$$

où e, $n_{\rm F}$ et $V_{\rm F}$ sont, respectivement, la charge électrique, la densité d'états et la vitesse de Boltzmann des électrons au niveau de Fermi. Le premier terme, $\sigma_{\rm B}$, de la conductivité est le terme habituel de Bloch-Boltzmann, et le second terme, $\sigma_{\rm NB}$, 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 $E_{\rm F}$. 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 augmentation de la conductivité avec la température et les défauts cristallin, absence de pic de Drude dans la conductivité optique...).

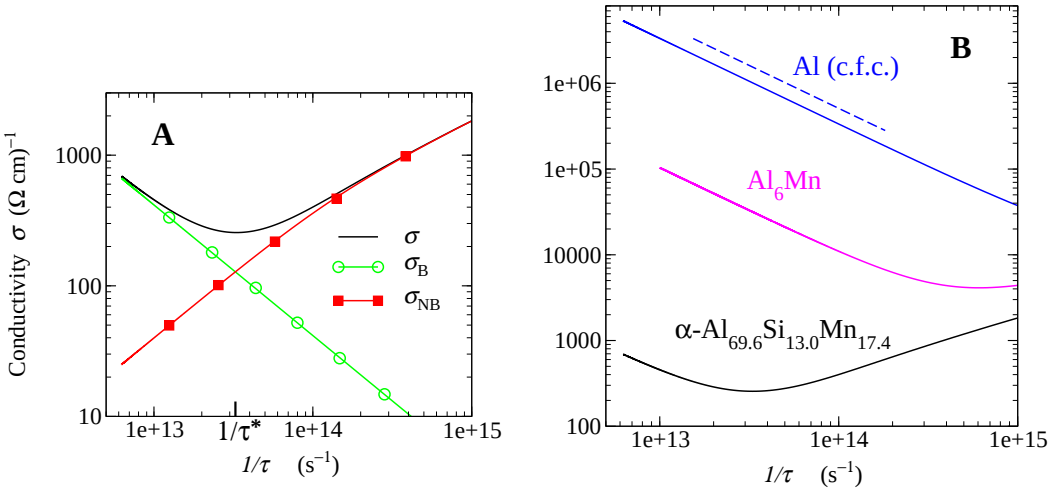

FIG. 1 – Conductivité électrique ab-initio $\sigma(E_{\mathrm{F}})$ en fonction de l'inverse du temps de diffusion $1/\tau$. **(A)** Dans une phase cubique α-$Al_{69.6}Si_{13.0}Mn_{17.4}$ approximante de la phase icosahédrique AlMnSi. **(B)** Comparaison avec des phases métalliques normales pour lesquelles 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 losque $1/\tau$ augmente c'est-à-dire lorsque lorsque la température et/ou les défaut structuraux augmentent (voir figure). En revanche, pour l'approximant α-AlSiMn, deux régimes apparaissent clairement : Pour $\tau > \tau^* = 3.03\ 10^{-14}$ s, le comportement est semblable à celui des métaux normaux ; mais pour $\tau < \tau^*$, σ croit avec la température et/ou les défauts structuraux. Les valeurs réalistes de τ ($\tau <$ 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).