



**HAL**  
open science

# Propriétés électroniques des pavages quasipériodiques

Anuradha Jagannathan

► **To cite this version:**

Anuradha Jagannathan. Propriétés électroniques des pavages quasipériodiques. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Université Paris Sud - Orsay, 2004. tel-04700212

**HAL Id: tel-04700212**

**<https://hal.science/tel-04700212v1>**

Submitted on 17 Sep 2024

**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.

Copyright

Université Paris-Sud, Centre d'Orsay  
Thèse d'Habilitation à Diriger les Recherches

# Propriétés électroniques des pavages quasipériodiques

par

**Anuradha Jagannathan**

*Laboratoire de Physique des Solides,  
Université Paris-Sud,  
91405 Orsay, France*

Soutenue le 28 juin 2004 devant la commission :

Michel Duneau  
Jean-Marc Luck

Uwe Grimm  
Clément Sire

Michel Héritier  
Timothy Ziman

# Table des matières

Table des matières	iii
Table des Figures	v
Remerciements	i
Introduction	1
<b>1 L'état fondamental d'un antiferromagnétique quasipériodique</b>	<b>4</b>
1.1 Introduction	4
1.1.1 Les symétries de l'hamiltonien de spin	6
1.1.2 L'antiferromagnétique périodique	7
1.1.3 L'antiferromagnétique quasipériodique à une dimension	8
1.1.4 Les modèles quasipériodiques à deux dimensions	9
1.2 Introduction au pavage octogonal	11
1.2.1 La répartition des sites	11
1.2.2 La transformation des sites sous inflation	12
1.2.3 La connectivité entre sites et entre blocs	13
1.3 Modèle de spins quantiques	14
1.4 Groupe de renormalisation : rappel du cas périodique	14
1.5 Groupe de renormalisation : cas du pavage octogonal	16
1.5.1 Définition des blocs de spin et relation de récurrence de spin	17
1.5.2 Découplage de blocs par dilution	18
1.5.3 Relation de récurrence du nombre de blocs	19
1.5.4 Relation de récurrence de spin	20
1.5.5 Liaisons effectives sur le pavage inflaté	20
1.6 Etat fondamental de l'AFM	21
1.6.1 Energie d'une étoile de Heisenberg	21
1.6.2 Energie de l'état fondamental par RG	21
1.6.3 Paramètres d'ordre locaux	22
1.7 Discussion	23

<b>2</b>	<b>Les modèles de liaisons fortes quasipériodiques</b>	<b>27</b>
2.1	Introduction . . . . .	28
2.1.1	Quelques résultats à une dimension . . . . .	29
2.1.2	Deux dimensions . . . . .	30
2.2	Prédictions théoriques pour des systèmes complexes . . . . .	31
2.2.1	La distribution d'écart entre niveaux . . . . .	32
2.2.2	La rigidité spectrale . . . . .	35
2.2.3	Phénomènes de crossover entre différents régimes . . . . .	36
2.3	Pavages octogonaux parfaits et randomisés . . . . .	36
2.3.1	Analyse du spectre du pavage parfait . . . . .	38
2.3.2	Analyse spectrale du pavage randomisé . . . . .	42
2.3.3	Discussion . . . . .	44
2.4	Les pavages de Rauzy généralisés . . . . .	45
2.4.1	Définition des pavages . . . . .	45
2.4.2	La statistique des écarts et la rigidité spectrale . . . . .	47
2.5	Discussion . . . . .	48
<b>3</b>	<b>Projets et Perspectives</b>	<b>51</b>
3.1	Propriétés électroniques par groupe de renormalisation . . . . .	51
3.2	L'extension des calculs à trois dimensions . . . . .	51
3.3	Propriétés thermiques . . . . .	52
<b>A</b>	<b>Introduction à la méthode de coupe et projection</b>	<b>53</b>
A.1	Exemple unidimensionnel . . . . .	53
A.2	Deux dimensions. Pavage octogonal . . . . .	54
A.3	Les approximants et conditions aux bords . . . . .	55
A.3.1	Les approximants périodiques d'un quasicristal . . . . .	55
A.3.2	Structure et symétries des approximants carrés . . . . .	56
	<b>Bibliographie</b>	<b>59</b>
<b>B</b>	<b>Quelques Publications</b>	<b>63</b>

# Table des figures

1.1	Diagrammes de diffraction diffuse d'origine magnétique correspondant à trois axes différents pour le composé ZnMgHo (d'après la réf. [1]) .	5
1.2	Représentation schématique d'un antiferromagnétique quasipériodique	6
1.3	Exemples des réseaux de spins (représentés par des flèches) avec des interactions antiferromagnétiques le long des arêtes a). nonfrustré b). frustré . . . . .	7
1.4	en haut : une partie de la chaîne de Fibonacci. en bas : la chaîne résultante après inflation. . . . .	8
1.5	Une partie du pavage octogonal montrant les six environnements locaux	10
1.6	Valeurs du paramètre d'ordre local groupées en fonction de la coordonnée des sites . . . . .	11
1.7	Inflation d'une partie du pavage octogonal . . . . .	12
1.8	Amas de spins considéré pour chaque membre de la famille $\alpha$ au stade zéro (gauche) et après déflation (droite) . . . . .	14
1.9	Amas de spins pour la famille A après deux déflations . . . . .	15
1.10	Amas de spins considéré pour chaque membre de la famille $\beta$ au stade zéro (gauche) et après déflation (droite) . . . . .	16
1.11	Regroupement en blocs sur le réseau carré . . . . .	17
1.12	étoile de spins de $z$ bras (étoile de Heisenberg) . . . . .	17
1.13	Amas de spins considéré pour trois blocs différents : a) $z=5$ $z'=3$ b) $z=6$ $z'=4$ c) $z=8$ $z'=8$ . . . . .	18
1.14	Les paires de sites partagées entre deux blocs (indiquées par des lignes épaisses) . . . . .	19
1.15	Valeurs de $m_i$ obtenues par RG a) pour les ordres 1 et 2 et b) pour les ordres 3 et 4. La ligne hachurée est la forme analytique obtenue à l'ordre zero . . . . .	23
1.16	Valeurs de $m_i$ obtenues par RG après correction (rectangles) et par calcul MC (cercles) pour les sept familles de sites . . . . .	23
1.17	Réseau des sites D,E et F . . . . .	24
1.18	Facteurs de structure théoriques de la phase non-magnétique à haute température (a), et de la phase non-magnétique à basse température (c) ((b) et (d) montrent la région près de l'origine) . . . . .	26
2.1	Représentation schématique des spins des électrons corrélés sur le pavage octogonal (cercles blancs(noirs) : densité de spin positive(négative))	27
2.2	Une permutation locale (excitation phason) de tuiles . . . . .	38

2.3	Représentation schématique de la densité d'états du pavage octogonal parfait . . . . .	39
2.4	Statistique des logarithmes des écarts pour le pavage parfait. . . . .	40
2.5	La statistique des écarts dépliés : dépliage maximum, minimum et intermédiaire (d'après Piéchon [2]) . . . . .	42
2.6	Exemple d'un approximant randomisé . . . . .	43
2.7	densité d'états du pavage randomisé en fonction de l'énergie $E$ (reproduite de [2]) . . . . .	43
2.8	$\Sigma^2(E)$ du pavage randomisé en fonction de l'énergie $E$ (reproduite de [2]) . . . . .	44
2.9	Pavage de Rauzy généralisé à deux dimensions : PRG(2) . . . . .	46
2.10	Densité d'états du PRG(2) (gauche) et du pavage octogonal (droite) . . . . .	47
2.11	$P(s)$ du PRG(2) pour trois tailles différentes plottée sur axes linéaires (gauche) et log (droite) . . . . .	48
2.12	Gauche : $\Sigma^2(E)$ du PRG(2) pour une taille fixe pour trois degrés de dépliage différents (voir texte). Droite : $\Sigma^2(E)$ pour des niveaux nondépliés pour trois tailles différentes. . . . .	49
A.1	Obtention d'une partie de la chaîne de Fibonacci par la méthode de projection . . . . .	54
A.2	Vue de la fenêtre dans l'espace perpendiculaire . . . . .	54
A.3	Superposition de deux approximants montrant la relation d'inflation entre les deux . . . . .	57

# Remerciements

Je remercie tout d'abord tous les membres du jury de cette habilitation, et en particulier les rapporteurs, Mike Widom, Tim Ziman et Clément Sire.

Cela fait treize ans depuis mon arrivée au Laboratoire de Physique des Solides à Orsay, après bien de séjours postdoctoraux dans beaucoup d'endroits intéressants. C'est une chance extraordinaire de pouvoir travailler dans ce lieu, et c'est autant un plaisir aujourd'hui qu'hier d'arriver au laboratoire avec sa grande pelouse verte, ses vieux arbres et le chant des oiseaux. Même la montée, qui n'est pas unanimement appréciée, fait partie du charme du labo haut perché.

C'est un lieu de travail scientifique d'une variété et d'un dynamisme exceptionnels. J'ai certainement bénéficié de cet environnement et je remercie les collègues (trop nombreux pour les citer ici) avec qui j'ai eu des discussions à un moment ou un autre ces dernières années - des théoriciens, des expérimentateurs et des personnels administratifs ou techniques. Mes plus proches collègues sont, bien sûr, les théoriciens, des personnes avec qui l'on pouvait échanger des idées et des nouvelles, et sur lesquels je pouvais compter dans les moments difficiles. Je voudrais ici souligner combien j'ai apprécié leur gentillesse, leur disponibilité, les discussions animées et les centimes qu'ils m'ont si souvent prêtés pour le café.

Heinz Schulz, inséparable de ce lieu, a été et restera une source inépuisable d'inspiration en tous les domaines.

Je tiens à remercier Michel Heritier, qui m'a beaucoup aidé dans ma carrière d'enseignant-chercheur à Orsay. Je remercie également Bertrand Deloche, coresponsable avec Michel du DEA de Physique des Solides et d'une équipe d'enseignants à laquelle j'ai la chance d'appartenir.

A Jacques Friedel, qui a lu et commenté en détail un certain nombre de mes manuscrits, posant des questions qui m'ont beaucoup aidés à avancer, je voudrais exprimer ma reconnaissance profonde.

Michel Duneau m'a fait découvrir les quasicristaux, et je le remercie pour sa gentillesse et disponibilité. Je n'ai sans doute pas assez profité de ses exposés clairs et élégants sur n'importe quel aspect mathématique de ces créatures intéressantes, mais il reste encore des opportunités pour apprendre. J'ai apprécié beaucoup aussi la collaboration avec Frédéric Piéchon, qui a initié les études statistiques décrites dans le deuxième chapitre lors de sa thèse. Nous avons pu, notamment, bénéficier de la grande expérience de Gilles Montambaux et ses thésards dans le domaine des systèmes désordonnés.

Enfin, et surtout, il y a ma famille, à commencer par Hubert Saleur, l'énergique et volontaire qui nous a appris le sens de "never say die". Devenu père de famille

nombreuse d'un seul coup, avec la naissance du bébé en novembre dernier, il a relu ces pages et chassé un bon nombre d'erreurs, entre deux biberons et l'installation par force d'une connexion ADSL. Alexandre et Nina, les plus formidables des enfants, toujours partant pour des aventures, ont surveillé avec un intérêt bienveillant l'évolution de cette thèse. Celui, toutefois, qui a suivi la rédaction le plus près de tous est Maxime Udayan, que je félicite pour sa part dans ce joint travail, les erreurs restant mon entière responsabilité.



# Introduction

## Les quasicristaux et les pavages quasipériodiques

La découverte du premier quasicristal – un alliage d'aluminium, et de manganèse – dans une expérience de diffraction, a donné lieu à un débat intense. Ces résultats pouvaient en effet avoir une origine banale : le diagramme de diffraction pouvait être la conséquence d'un maillage de microcristaux, ou encore d'une phase désordonnée ayant un ordre icosaédrique à courte portée. Une possibilité bien plus excitante était que l'on soit en présence d'une nouvelle phase de la matière, caractérisée par la présence simultanée de deux propriétés à savoir : (i) un ordre positionnel des atomes à grande distance donnant lieu aux pics de diffraction étroits, et (ii) une symétrie fondamentalement incompatible avec une structure périodique.

La découverte de quasicristaux icosaédriques de plus en plus parfaits – c'est-à-dire ayant une grande longueur de corrélation, dépassant parfois celle des meilleurs cristaux – a mis finalement fin à ce débat. Les quasicristaux sont bien une nouvelle phase de la matière, et les questions importantes concernent plutôt les mécanismes microscopiques de leur formation, ainsi que l'élaboration théorique et expérimentale de leurs propriétés physiques. Il se trouve que l'ordre quasipériodique peut engendrer des effets complexes et très difficiles à comprendre avec les outils traditionnels de la physique des solides.

## La découverte des pavages quasipériodiques

Une des premières questions que l'on se pose concerne les positions des atomes dans les quasicristaux réels. Les structures les plus simples répondant aux critères souhaités, c'est-à-dire une symétrie de rotation parfaite alliée à un ordre positionnel à longue portée, sont les pavages quasipériodiques. Le pavage de Penrose a été proposé bien avant la découverte du premier quasicristal, par R. Penrose qui voulait construire une structure à base de deux tuiles et des règles de construction locales empêchant la formation d'un état périodique. La structure résultante possède une symétrie hiérarchique, et une symétrie sous des rotations de  $2\pi/5$ . Dans l'espace réciproque, cette structure possède un ensemble de pics de Bragg d'intensités différentes. Les premiers modèles de structure des nouveaux alliages ont pris comme point de départ la généralisation de ce pavage à trois dimensions : le pavage icosaédrique. Depuis, d'autres pavages ont été trouvés, pour décrire des composés possédant une symétrie d'ordre dix (pavage décagonal), huit (pavage octogonal), ou douze.

Tous ces pavages sont des structures ayant précisément les deux caractéristiques d'ordre positionnel allié à une symétrie interdite pour les cristaux. N'ayant pas une invariance par translation, et donc n'étant pas sujets au théorème de Bloch, les pavages, sur le plan théorique, sont loin des cristaux. De plus, puisqu'ayant un ordre positionnel ils sont également très loin des systèmes désordonnés. Avant de pouvoir s'attaquer aux propriétés physiques des composés réels il est important de résoudre les problèmes définis sur les pavages quasipériodiques. Ce sont les analogues des réseaux de Bravais pour les cristaux.

La relation entre les pavages et les positions des atomes dans un alliage quasipériodique n'est pas aussi simple que l'on pourrait souhaiter. Il est souvent possible d'avoir une bonne première approximation à la structure réelle en associant des amas d'atomes aux sites du pavage, mais cela ne suffit pas de déterminer toutes les positions atomiques. Il existe ainsi des modèles plus ou moins complexes pour la structure de chacun des composés réels. Ces modèles sont utilisés dans des calculs *ab-initio* – pour déterminer, par exemple, la densité d'états au niveau de Fermi, une quantité importante pour un grand nombre d'applications pratiques.

## Les questions abordées dans cette thèse

Dans cette thèse, nous examinons quelques propriétés électroniques, magnétiques, et thermiques des pavages quasipériodiques. Plus précisément, nous allons nous concentrer sur le cas des pavages bidimensionnels, le plus souvent en considérant l'exemple du pavage octogonal.

Une des raisons de notre choix de pavage est liée à sa dimensionalité, puisque l'on sait que les propriétés physiques dépendent fortement de la dimension de l'espace, du moins à basse dimension – l'effet des fluctuations devenant de plus en plus important lorsque l'on baisse la dimension de trois à deux et ensuite une. A une dimension, les propriétés des chaînes quasipériodiques sont maintenant (relativement) bien comprises tant sur le plan analytique que numérique, tandis qu'à deux dimensions, où l'on s'attend à des effets qualitativement nouveaux, on ne dispose pas de beaucoup de résultats analytiques, et les études numériques soulèvent beaucoup de questions qui seront sans doute abordées dans des études à venir. Pour des raisons évidentes de l'augmentation en complexité et en temps de calcul, des calculs traitant des pavages tri-dimensionnels sont encore moins nombreux. Il est permis de penser que si une méthode analytique est trouvée pour les pavages bi-dimensionnels, on pourrait la généraliser ensuite à une dimension supérieure, ce qui n'est pas le cas de la plupart des techniques propres à une dimension. Ensuite, c'est le pavage octogonal qui a été au centre de la plupart de nos études non pas parce qu'il est plus pertinent pour les composés réels – il existe des composés ayant un plan de symétrie d'ordre huit mais ce ne sont pas parmi les "top ten" des quasicristaux qui ont été étudiés – mais parce que c'est le plus simple des quasicristaux à deux dimensions, et parce qu'il est très proche, d'un point de vue algébrique, du célèbre pavage icosaédrique déjà cité comme étant à la base des modèles de structure quasipériodiques des alliages les plus cotés.

Dans le premier chapitre nous introduirons une approche par groupe de renormalisation – une méthode bien adaptée à ces systèmes à cause de leur symétrie par rapport aux inflations/déflations. Nous décrirons ainsi l'état fondamental des spins quantiques sur le pavage pour un modèle d'Heisenberg antiferromagnétique. Ce calcul a été motivé par des expériences faites sur l'alliage quasicristallin ZnMgHo, et il conforte les résultats des études numériques de Monte Carlo quantique mettant en évidence une structure magnétique assez complexe dans l'espace, avec des symétries que l'on voit reflétées dans son facteur de structure dans l'espace réciproque.

Le deuxième chapitre est consacré aux études numériques des hamiltoniens quasipériodiques. Certaines propriétés spectrales caractéristiques de plusieurs pavages bidimensionnels obtenues par diagonalisation numérique seront décrites et comparées aux celles d'autres hamiltoniens des systèmes dits "complexes" dans ce chapitre. Ces études permettent d'avoir une idée de la dynamique des électrons dans un milieu quasipériodique, et les similarités et des différences avec la dynamique dans des milieux cristallins comportant divers degrés de désordre allant de faible (régime diffusif) au très fort (régime fortement localisé).

Le dernier chapitre sur les projets et perspectives propose quelques extensions possibles des modèles étudiés ainsi que quelques autres sujets de recherche future.

### **Quelques autres questions pourtant intéressantes à résoudre**

Il est évident que l'on est encore loin de pouvoir décrire de façon complète les effets de la quasipériodicité. Notons que le passage d'un de ces pavages à un alliage réel demeure un problème considérable. Malgré le grand nombre de modèles de structure et des expériences permettant d'observer des échantillons "directement" par microscopie électronique, STEM ou microscopie à force atomique (AFM), les positions des atomes dans un quasicristal restent difficiles à préciser avec certitude. Plus intéressant – même si le principe de l'existence d'une nouvelle phase de la matière est admis, une question primordiale demeure concernant le mécanisme de formation et la stabilité de ces quasicristaux. La réponse dépendra probablement en grande partie des détails de la composition chimique des composés et de leur structure. Quoiqu'il en soit, il est certain que si nous ne comprenons pas les conséquences de la quasipériodicité dans les pavages, il y aura peu de chances d'arriver à comprendre les composés "réels".

# Chapitre 1

## L'état fondamental d'un antiferromagnétique quasipériodique

### 1.1 Introduction

Le problème qui est posé dans ce chapitre est celui de la détermination de l'état fondamental des spins quantiques dans un milieu quasipériodique. On suppose que le système est décrit par l'hamiltonien de Heisenberg

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

où  $J_{i,j} = J$  sont des couplages entre proches voisins. On connaît la réponse lorsque les interactions sont ferromagnétiques ( $J < 0$ ) : le fondamental est l'état où tous les spins sont alignés selon un axe, brisant ainsi la symétrie rotationnelle de  $\mathcal{H}$ . La réponse n'est pas aussi simple lorsque les interactions sont antiferromagnétiques. On sait que, même dans le cas du réseau carré, l'état fondamental est assez compliqué à décrire, et jusqu'à récemment la symétrie de cet état a été le sujet d'une multitude d'études analytiques et numériques. Cette complexité provient du fait que, contrairement au cas ferromagnétique, l'état fondamental d'un antiferromagnétique classique ne correspond plus à un état propre de l'hamiltonien des spins quantiques. On peut calculer l'énergie de l'état fondamental en théorie des perturbations, en prenant en compte des excitations de type ondes de spin pour les réseaux périodiques. Dans le quasicristaux, les équivalents des ondes de spin d'un système périodique ne sont plus décrits par un vecteur d'onde  $\vec{k}$  puisqu'il n'y a plus l'invariance par translation. Il se trouve, par contre, qu'une description - relativement - simple dans l'espace réel est toutefois possible, en utilisant la symétrie hiérarchique du quasicristal.

Le modèle d'antiferromagnétique de Heisenberg est pertinent pour certains quasicristaux réels. Les composés  $\text{MgZnR}$  (où  $\text{R}$  est une terre rare) ont une structure quasipériodique, appartenant à la famille icosaédrique. Les atomes  $\text{R}$  possèdent un moment magnétique localisé, et ont des interactions à courte portée. Il faut contraster ces systèmes à moment magnétique *localisé* avec les autres systèmes quasipériodiques

où les moments magnétiques sont dûs aux électrons  $d$ . Ces derniers, tels le AlMnSi sont décrits par des modèles d'électrons itinérants, et possèdent des états magnétiques inhomogènes complexes, comme le montrent des études par résonance magnétique nucléaire (voir F. Hippert et al dans [3]). Le modèle de spins discuté dans ce chapitre ne concerne pas ces composés-là. Les expériences de diffusion de neutrons sur le ZnMgHo [4, 1] ont mis en évidence des corrélations magnétiques dans le MgZnHo en dessous d'une température d'environ 5K [1]. La figure 1.1 montre les intensités de diffusion magnétiques résultantes après une soustraction  $I(T = 1.3K) - I(T = 20K)$ . Sans rentrer dans les détails, on voit qu'il y a une diffusion diffuse autour des pics de Bragg principaux (indiqués par des croix et points). L'aspect essentiel est que les pics de diffusion d'origine magnétique sont indexables, comme les pics nonmagnétiques, par des vecteurs de six composants (voir Gratias et al dans [3] pour une discussion de la diffraction dans les systèmes quasipériodiques). Les positions des pics de Bragg de la phase à haute température et celles les taches qui apparaissent à basse température sont, de plus, reliées par des translations dans l'espace réciproque six dimensionnel. Nous reviendrons à la question du facteur de structure de l'état magnétique à la fin de ce chapitre.

FIG. 1.1 – Diagrammes de diffraction diffuse d'origine magnétique correspondant à trois axes différents pour le composé ZnMgHo (d'après la réf. [1])

### 1.1.1 Les symétries de l'hamiltonien de spin

FIG. 1.2 – Représentation schématique d'un antiferromagnétique quasipériodique

La Fig.1.2 montre schématiquement la distribution des paramètres d'ordre locaux (représentés par des cercles de rayons plus ou moins grands selon la valeur locale de l'ordre antiferromagnétique) sur le pavage octogonal. On y voit que cette distribution est inhomogène, chaque site ayant une valeur particulière du paramètre d'ordre antiferromagnétique. Avant de discuter cette distribution de valeurs et le calcul de celle-ci, faisons un petit rappel de ce qui est déjà connu pour les antiferromagnétiques quantiques.

Commençons par ce qui est connu pour les états des spins qui ont une interaction de type Heisenberg, c'est-à-dire avec des termes de la forme  $J_{ij}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  dans l'hamiltonien. Les constantes effectives de couplage  $\{J_{ij}\}$  peuvent avoir une variété d'origines microscopiques. Le plus souvent, cette interaction est négligeable au-delà de premiers voisins. Lorsque l'intégrale d'échange  $J_{ij}$  est positive, l'énergie de la paire de spins est minimisée pour un alignement antiparallèle, et on parle d'un couplage antiferromagnétique. La question qui nous intéresse ici concerne la structure de l'état fondamental pour un tel système. Le plus simple des systèmes périodiques, la chaîne de spins couplés entre premiers voisins par une interaction constante,  $J_{ij} = J$  pour tous les  $(i, j)$ , a une solution analytique exacte donnée par Bethe en 1931. A deux dimensions, le problème de spins sur le réseau carré est resté une énigme même cinquante ans après, et on ne dispose toujours que de solutions approchées. On sait toutefois donner pour les systèmes périodiques une description qualitative de l'état fondamental, et on sait calculer des quantités telles que la fonction de corrélation à deux spins pour ce système par des méthodes approchées. Avant de décrire l'état fondamental de ces antiferromagnétiques mentionnons quelques propriétés de symétrie de l'hamiltonien et des états propres de ces spins.

Une des symétries de  $\mathcal{H}$  est celle d'invariance sous une rotation globale de tous les spins. Cette symétrie est la conséquence de la forme des interactions qui est scalaire dans l'espace des spins, et ne dépend pas des propriétés de la structure sous-jacente.

Pour les systèmes invariants par translation, l'hamiltonien est invariant sous l'action des translations du réseau. Il peut y avoir, de plus, une décomposition du système en deux (ou plus) sous réseaux. Dans le cas d'une structure "bipartite", on peut définir deux sous-réseaux tels que pour chaque spin du système appartenant à un certain sous réseau, tous les premiers voisins appartiennent à l'autre sous-réseau. C'est le cas pour le réseau carré (Fig.1.3a). Dans ce cas, l'hamiltonien est invariant sous l'effet des rotations indépendantes de chaque sous-réseau après une transformation appropriée globale des constantes de couplage  $J$ . Cette symétrie permet l'existence des états non-frustrés, et assure, au-delà d'une dimension, qu'il y a un état ordonné à une température suffisamment basse. La Fig.1.3b) illustre un cas frustré – le réseau triangulaire, où il n'est pas possible de "satisfaire" toutes les liaisons d'un triangle

élémentaire simultanément. Dans un tel cas, on peut s’attendre à un effet de réduction du paramètre d’ordre et l’éventuelle absence d’une phase ordonnée. Une condition nécessaire pour qu’une géométrie soit non-frustrante est que toute polygone fermé ait un périmètre pair (en unités de liaisons élémentaires). C’est le cas des modèles de quasicristaux définis sur les arêtes de rhombs et de carrés, puisqu’ils sont deux polygones de périmètre pair. A deux dimensions, deux exemples en sont le pavage de Penrose [5, 6] et le pavage octogonal.

FIG. 1.3 – Exemples des réseaux de spins (représentés par des flèches) avec des interactions antiferromagnétiques le long des arêtes a). nonfrustré b). frustré

### 1.1.2 L’antiferromagnétique périodique

Le système de spins décrit par un hamiltonien périodique, dans le cas des interactions antiferromagnétiques nonfrustrés, possède un état fondamental où le signe des corrélations entre spins est positif pour les spins appartenant au même sous réseau, et négatif dans le cas contraire. De plus, les corrélations décroissent avec la distance entre les spins avec une loi algébrique. Une solution exacte a été trouvée par Bethe pour le cas de la chaîne, mais les calculs approchés sont utiles tant à une qu’à plusieurs dimensions : groupe de renormalisation, développement en ondes de spins, ou encore transformation en un modèle de fermions et traitement par la théorie des champs. Les résultats de ces méthodes sont en assez bon accord avec ceux des études numériques, telles que diagonalisation exacte de petits systèmes, ou la simulation par Monte Carlo Quantique. On constate ainsi que les corrélations entre premiers voisins décroissent avec la dimension du système : à une dimension, on a  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \rangle \approx -0.44$ , et à deux dimensions on a  $\langle \vec{S}_{m,n} \cdot \vec{S}_{m\pm 1,n} \rangle = \langle \vec{S}_{m,n} \cdot \vec{S}_{m,n\pm 1} \rangle \approx -0.33$ . A titre de comparaison, à “zero” dimension, deux spins couplés ont  $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle = -0.75$ . La décroissance de valeurs est la conséquence, pour employer une image intuitive, du fait que plus un spin a de voisins, moins grande sera l’amplitude de formation de singulets avec un voisin donné.

### 1.1.3 L’antiferromagnétique quasipériodique à une dimension

Passant maintenant au cas du quasicristal, on peut considérer l’hamiltonien quasipériodique à une, deux, et plus de dimensions. A une dimension, il est nécessaire d’introduire au moins deux paramètres dans l’hamiltonien, pour distinguer entre les environnements locaux différents, ce qui n’est pas le cas à plus haute dimension. Un système quasipériodique qui a été beaucoup étudié est la chaîne de Fibonacci. Dans une telle chaîne, on peut introduire deux couplages  $J_1$  et  $J_2$  entre un spin et son voisin. Ces couplages sont choisis suivant la suite de Fibonacci, et sont donc parfaitement déterminés quoique n’ayant aucune périodicité. Une partie d’une telle chaîne

est dessinée dans la figure ci-dessous (les traits ont deux épaisseurs, selon la valeur du couplage)

FIG. 1.4 – en haut : une partie de la chaîne de Fibonacci. en bas : la chaîne résultante après inflation.

L'hamiltonien ne possède plus la symétrie par translation, mais il a les symétries de la chaîne quasipériodique. D'abord, il y a une quasi-symétrie translationnelle. Ceci veut dire que n'importe quelle partie finie de la chaîne peut être retrouvée une infinité de fois le long de la chaîne (propriété de répétitivité). Ensuite on peut tenter d'exploiter la propriété d'invariance de la séquence de Fibonacci sous inflation/déflation - des règles de substitution permettant de transformer une partie finie de la suite de Fibonacci en une autre plus petite/longue. On peut, par exemple, trouver des substitutions locales où des petites séquences de couplages sont remplacées par un "super-couplage". Une fois cette substitution effectuée sur tout le long de la chaîne, l'on obtiendrait une séquence de Fibonacci des nouveaux super-couplages. La figure 1.4) montre une partie de la chaîne originale en haut (où les deux éléments de la séquence de Fibonacci sont représentés par des traits d'épaisseur différentes), et la chaîne résultante après inflation en bas. Ce processus peut être répété infiniment de fois, et l'on cherche des solutions au point fixe éventuel de l'hamiltonien.

Des chaînes possédant des symétries sous diverses règles de substitution ont été étudiées pour le cas de hamiltonien de spins quantiques [7, 8, 9, 10]. D'autres modèles unidimensionnels proviennent des modifications de l'hamiltonien fondamental par l'introduction d'anisotropies etc. Ces modèles peuvent être transformés en modèles de fermions sans spin, dont les propriétés ont été élucidées dans de nombreux travaux pionniers [11, 12, 13]. L'article de Luck [14] donne un aperçu des méthodes utilisés pour divers systèmes unidimensionnels et les résultats obtenus. Plus récemment, une autre direction fructueuse a été le traitement utilisant la bosonisation (parmi d'autres, voir [15, 16, 17]). Dans ces travaux, on a pu obtenir des propriétés spectrales telles que la distribution des gaps, et des exposants de scaling des bandes d'énergies. Pour les spins quantiques dans un champ magnétique extérieur, on peut obtenir le comportement de l'aimantation du système en fonction du champ. La question des corrélations dans l'espace réel n'a pas été abordée. Cependant, on s'attend à avoir une distribution nontriviale des valeurs du paramètre d'ordre locaux. Ceux-ci peuvent être définis par  $m_i^2 = (|\langle \vec{S}_{i-1} \cdot \vec{S}_i \rangle| + |\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \rangle|)/2$  où les fonctions de corrélation sont évaluées dans l'état fondamental. Contrairement au cas périodique, cette fois, le paramètre d'ordre n'est plus forcément uniforme dans l'espace. L'étude de la la distribution de  $m_i$  n'a pas encore été fait pour ce cas pourtant simple.



### 1.1.4 Les modèles quasipériodiques à deux dimensions

Le plus simple des modèles quasipériodiques à deux dimensions est le pavage octogonal [18], illustré dans la figure 1.5). Ce pavage, aussi appelé le pavage de Ammann-Beenker, est composé à partir de deux tuiles élémentaires, le carré et le losange de 45 degrés, et possède une symétrie d'ordre huit. Cette symétrie ainsi que d'autres symétries du pavage sont expliquées en un peu plus de détail dans la section suivante. La figure montre les six environnements locaux qui apparaissent dans ce pavage, appelés A,B,...,F et ayant des fréquences relatives telles que la valeur moyenne de  $z$  sur tout le pavage se trouve être exactement 4.

FIG. 1.5 – Une partie du pavage octogonal montrant les six environnements locaux

On peut définir sur ce pavage un modèle de couplage antiferromagnétique entre sites voisins non-frustrés. A la différence du réseau carré, les fonctions de corrélations à deux spins dans le pavage quasipériodique ne sont pas invariantes par translation, mais au contraire dépendent des positions des spins dans le pavage. Un tel modèle a été étudié dans [19] utilisant des méthodes numériques de Monte Carlo Quantique (QMC) qui permettent de calculer les fonctions de corrélations dans l'état fondamental. La valeur moyenne des corrélations autour d'un site donné,

$$\epsilon_i = J \sum_{\delta} \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+\delta} \rangle, \quad (1.1)$$

permet de définir un paramètre d'ordre "local" pour chaque site,

$$m_{s,i} = \sqrt{|\epsilon_i/z|} \quad (1.2)$$

(où le sous-indice  $s$  pour indiquer "staggered", c'est-à-dire une aimantation alternant en signe, sera supprimé dans la suite). Les valeurs numériques obtenues pour  $m_i$  sont regroupées autour de sept valeurs, selon la valeur de  $z$  des sites, comme le montre la figure 6) (où l'on montre aussi l'image dans l'espace réelle). A l'intérieur de chaque famille, les valeurs de  $m_i$  sont distribuées avec une plus petite amplitude de variation.

FIG. 1.6 – Valeurs du paramètre d'ordre local groupées en fonction de la coordinence des sites

Comme pour la chaîne de Fibonacci, il existe une transformation d'inflation pour le pavage octogonal. La figure 1.7) montre la transformation d'un pavage de tuiles de petite taille en un pavage fait des mêmes tuiles agrandis d'un facteur de  $\lambda =$

$1 + \sqrt{2}$ . Comme à une dimension, on peut tenter d'utiliser la propriété d'invariance du pavage sous inflation pour établir des relations de récurrence. C'est effectivement l'approche de Godreche et Luck pour un modèle de spins d'Ising [20] sur le pavage de Penrose. Pour le pavage octogonal, un calcul de renormalisation a été introduit par Sire et Bellissard [21], dans le contexte d'un modèle des liaisons fortes. On peut ainsi calculer certaines propriétés spectrales des modèles électroniques dans la limite où les sites sont faiblement couplés [22]. Cette approche ne convient donc pas pour le système qui nous intéresse, où les couplages prennent la valeur maximale (le cas "hopping pur" dans le contexte des liaisons fortes). La nouvelle approche décrit ci-dessous permet, lui, de décrire cette situation, mais au prix de "diluer" le pavage. Par dilution on entend qu'une fraction finie des liaisons sera placée égale à zéro. Avec cette approximation, nous pouvons calculer tous les paramètres d'ordre locaux, montrer qu'ils appartiennent aux sept familles différentes. Enfin, nous essayerons de donner une méthode d'extrapolation des résultats au cas du pavage octogonal complet (sans dilution).

FIG. 1.7 – Inflation d'une partie du pavage octogonal

## 1.2 Introduction au pavage octogonal

Le pavage octogonal présente une symétrie d'ordre huit, comme on peut facilement le constater en regardant son diagramme de diffraction (dernière figure de ce chapitre). Cette symétrie, interdite dans les systèmes périodiques, est à comprendre dans le sens suivant : toute région d'une taille donnée, peut être retrouvée ailleurs dans le pavage dans chacune des huit orientations, avec une fréquence de répétition finie. C'est dans le même sens que l'on a la propriété dite de "répétitivité" des environnements, qui remplace la propriété d'invariance par translation stricte des cristaux (voir Belin et al dans [3]). Ce pavage peut être généré par la méthode de coupe et projection, une technique qui a été décrite dans [23, 24, 25] pour les systèmes icosaédriques. Nous donnons ci-dessous quelques propriétés géométriques clés du pavage octogonal.

### 1.2.1 La répartition des sites

Nous avons déjà vu qu'en ce qui concerne les premiers voisins, il existe six différents types de sites, correspondant aux valeurs de coordinence  $z = 8, 7, 6, 5, 4$  et  $3$ , appelés A,B,C,D,E et F (figure 4). Les fréquences des sites, toutes orientations comprises, peuvent être calculées exactement (voir l'appendice pour un résumé des propriétés, et pour plus de détails [26] ainsi que l'article de revue par Duneau [27]) et sont

$$\begin{aligned} f_A &= \lambda^{-4}; f_B = \lambda^{-5}; f_C = 2\lambda^{-4}; \\ f_{D_1} = f_{D_2} &= \lambda^{-3}; f_E = 2\lambda^{-2}; f_F = \lambda^{-1} \end{aligned} \quad (1.3)$$

où l'on a distingué deux types de site D (voir plus loin).

### 1.2.2 La transformation des sites sous inflation

Comme nous avons vu, le pavage possède une symétrie discrète : celle d'invariance sous des opérations d'inflation (déflation). L'opération d'inflation consiste à garder certains sommets du pavage initial (les autres étant éliminés) de façon à obtenir un nouveau pavage ayant les mêmes propriétés que celui d'origine. Dans la figure 1.4) les points du pavage initial qui deviennent les sommets du pavage final sont indiqués en gras. Il est évident sur la figure 1.7 que le facteur de changement d'échelle,  $\lambda = 1 + \sqrt{2}$ . On peut montrer que les sites éliminés sont ceux de faible coordinence (voir l'appendice). Plus précisément, ce sont les sites F,E et une moitié des sites D appelés  $D_2$  qui disparaissent sous inflation. Les sites qui restent et deviennent les sommets du nouveau pavage inflaté sont celle de la famille  $\alpha$  – les A,B,C et l'autre moitié des D appelés  $D_1$ . La distinction entre les sites  $D_1$  et  $D_2$  se voit au niveau des deuxièmes voisins, pour citer une différence entre eux (l'appendice présente une autre façon de voir la différence essentielle entre ces deux types de sites D).

Après inflation, les sites qui restent auront changé leur valeur de  $z$ . Les nouvelles valeurs  $z'$  sont données dans le tableau ci-dessous :

Site initial		Site final
A	→	A,B,C ou $D_1$
B	→	$D_2$
C	→	E
$D_1$	→	F

Table 1. Transformation des sites après inflation

### 1.2.3 La connectivité entre sites et entre blocs

Pour les sites  $\alpha$ , l'environnement local est simple à préciser, puisqu'il s'agit toujours des mêmes. Nous les résumons dans le tableau ci-dessous :

site central	nombre et type de sites voisins
A	(8)F
B	(5)F,(2)E
C	(2)F, (4)E
$D_1$	$D_2$ ,(4)E

Table 2. Type de sites (et leur nombre) autour d'un site donné

Pour les autres sites du pavage, les environnements sont multiples, et il nous sera nécessaire de simplifier en tronquant le nombre d'environnements pris en compte.

Un tableau similaire peut être construit pour les blocs de sites. On distingue plusieurs géométries différentes en ce qui concerne les sites A. Quand un site A reste un A après inflation, on peut vérifier que le bloc central est toujours entouré de huit blocs  $D_1$ . Lorsque le site A devient un site B après inflation, son environnement est composé de cinq blocs  $D_1$  et deux blocs C. On peut vérifier ceci en regardant les amas dessinés dans les figures 1.8),1.9) et 1.10). A gauche sont dessinées les étoiles à  $z$  bras qui sont les environnements jusqu'aux premiers voisins et correspondent au stade zéro de la transformation de renormalisation. A droite, on voit les mêmes amas après une déflation. Les sites de type  $\alpha$  sont indiqués par des gros points, et tous les autres sites appartenant à l'amas sont indiqués par des points plus petits.

FIG. 1.8 – Amas de spins considéré pour chaque membre de la famille  $\alpha$  au stade zéro (gauche) et après déflation (droite)

Au deuxième stade de renormalisation, on déflate les amas de spins et l'on obtient des plus grands amas, comme le montre la figure 1.9 pour le cas d'un site A.

FIG. 1.9 – Amas de spins pour la famille A après deux déflations

FIG. 1.10 – Amas de spins considéré pour chaque membre de la famille  $\beta$  au stade zéro (gauche) et après déflation (droite)

### 1.3 Modèle de spins quantiques

Les spins de  $S = \frac{1}{2}$  sont placés aux sommets du pavage octogonal. L'hamiltonien de ce système est

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.4)$$

où la paire de spins  $\vec{S}_i, \vec{S}_j$  est reliée par une arête du pavage et  $J > 0$ .

### 1.4 Groupe de renormalisation : rappel du cas périodique

Nous allons effectuer une transformation du système de spins défini par l'éq. 1.4 en utilisant la symétrie sous inflation. La méthode employée est une généralisation d'une méthode utilisée par Sierra et Martin-Delgado [28, 29] pour traiter le réseau carré. Nous allons donc brièvement rappeler les étapes successives de leur calcul. L'hamiltonien est celui de l'Eq.1.4 avec des liaisons  $J$  qui couple les spins premiers voisins. Au stade zéro, nous allons supposer que les spins ont une valeur  $S = \frac{1}{2}$  (la méthode se généralise assez facilement aux autres valeurs de  $S$ ). On peut regrouper les spins en blocs de 5 spins de façon à obtenir un nouveau réseau de taille  $\sqrt{5} \times \sqrt{5}$ , comme le montre la figure 1.11, où nous avons indiqué les blocs en forme d'étoiles.

FIG. 1.11 – Regroupement en blocs sur le réseau carré

La valeur du spin d'un bloc dans son état fondamental est  $S' = 3S$ , pour les spins  $\frac{1}{2}$  ici  $S' = 3/2$ . L'énergie de l'état fondamental du bloc est  $e_0 = -3J/2$  pour ce cas. Un calcul utilisant les coefficients de Clebsch-Gordan pour ce problème montre que le facteur de renormalisation de spin  $\xi_s$  d'un des 4 spins extérieurs est

$$S = \xi_s S' \quad (1.5)$$

où  $\xi_s$  vaut  $\frac{3}{10}$  [28], soit assez proche de sa valeur classique de  $\frac{1}{3}$ . Il est simple de vérifier que le couplage effectif  $H'$  entre blocs est antiferromagnétique, et est égal à  $J' = 3\xi_s^2 J$ . Si l'on néglige les interactions plus faibles, entre deuxièmes voisins engendrées par cette transformation, le système final est décrit par un hamiltonien de la même forme que celui d'origine. Cette invariance de la forme de  $H$  permet de définir un groupe de renormalisation, et de déterminer le flot des couplages ainsi que le point fixe de la transformation. Formellement, on peut exprimer ces observations par les équations suivantes :

$$\begin{aligned} T_0^\dagger H(N, S, J) T_0 &= N' e_0(J, S) + H'(N', S', J') \\ e_0(J, S) &= JS(4S + 1) \end{aligned} \quad (1.6)$$

où  $T_0^\dagger$  et  $T_0$  sont les opérateurs de projection de la base de spins  $S$  sur la nouvelle base de spins  $3S$ . On peut maintenant répéter la transformation, et on constate que les couplages tendent vers zéro, tandis que les spins effectifs tendent vers l'infini, c'est-à-dire vers la limite classique. Ces flôts indiquent que le spectre sera "gapless" (donc qu'il y aura un ordre à longue portée) et que le modèle est dans la classe d'universalité du modèle de Heisenberg classique.

Il est clair que l'énergie par site est la somme infinie de termes suivante :

$$E_0^{carre}/N = -\frac{1}{5} \sum_{n=0}^{\infty} J^{(n)} S^{(n)} (4S^{(n)} + 1) \quad (1.7)$$

où  $S^{(n+1)} = 3S^{(n)}$  et  $J^{(n+1)} = 3\xi^2(S^{(n)})J^{(n)}$ .

Cette analyse peut être étendue à notre cas, comme nous allons montrer.

## 1.5 Groupe de renormalisation : cas du pavage octogonal

Dans cette méthode de renormalisation dans l'espace réel, nous regrouperons les degrés de liberté (les spins d'origine) en blocs, et distinguerons dans l'hamiltonien des termes concernant chaque bloc séparément (les termes "diagonaux"), et ceux impliquant deux blocs voisins. Nous montrerons qu'après certaines modifications, ces derniers peuvent être mis sous une forme ressemblant l'hamiltonien initial, avec des interactions effectives entre les blocs qui sont un peu plus compliquées que celles au départ. Les interactions effectives dépendent de la géométrie locale, et la relation entre les couplages avant et après l'inflation est linéaire, permettant d'obtenir un groupe de renormalisation multiplicatif. L'énergie de l'état fondamental se calculera par la généralisation de l'Eq.1.7 au cas quasipériodique. Nous verrons que l'on peut aussi étudier des paramètres d'ordre locaux et leur flot sous les transformations d'inflation successives. Le point fixe sera trouvé et comparé aux résultats des calculs numériques de Wessel et al [19].

### 1.5.1 Définition des blocs de spin et relation de récurrence de spin

Le choix des blocs est imposé par les propriétés des sites sous inflation. Nous choisissons les sites  $\alpha$  comme les centres des nouveaux degrés de liberté  $\vec{S}'$ . Un tel site pris tout seul a une forme d'étoile de  $z$  bras, comme dans la figure 1.12). Le spin effectif d'un tel ensemble dans l'état fondamental est  $S' = (z - 1)S$  (le spin au centre ayant un couplage antiferromagnétique avec les autres). L'énergie de l'état fondamental d'une telle étoile est

$$\epsilon^{(0)} = -J \frac{(z + 2)}{4z} \quad (1.8)$$

FIG. 1.12 – étoile de spins de  $z$  bras (étoile de Heisenberg)

Puisque nous avons quatre types de blocs, après une inflation, les spins effectifs dépendent du site et peuvent avoir quatre valeurs différentes, une pour chaque membre de la classe  $\alpha$ . Ceci donne des facteurs de renormalisation  $\xi$  qui dépendent de la valeur de  $z$  initiale. Pour simplifier l'analyse, nous prendrons une valeur classique de celle-ci,  $\xi = (z - 1)^{-1}$ , sachant que la différence entre valeurs classique et quantique sera petite.

FIG. 1.13 – Amas de spins considéré pour trois blocs différents : a)  $z=5$   $z'=3$  b)  $z=6$   $z'=4$  c)  $z=8$   $z'=8$

### 1.5.2 Découplage de blocs par dilution

Les figures 1.13a), b) et c) montrent des exemples de blocs, avec leurs voisins. Le site central est indiqué par un point gras, ainsi que ses voisins après inflation.

Les interactions entre sites sont indiquées par des lignes continues, tandis que les interactions effectives entre blocs sont indiquées par des lignes hachurées grises. On s'aperçoit qu'il peut y avoir des recouvrements entre blocs voisins – dans la figure 1.13b) il y a ainsi deux blocs  $D_1$  qui partagent une paire de spins. La figure 1.13c) montrent un bloc de type A entouré de huit blocs  $D_1$  qui se recouvrent deux par deux. Ces chevauchements de blocs ont lieu sur tous les sites  $C$  et  $D_1$ , comme l'indique la figure 1.14) qui montre toutes les paires de spins qui sont partagées entre deux blocs contigus. Notre approche sera donc de pratiquer une dilution du pavage, c'est-à-dire sur les quatre liaisons qui relient deux blocs, d'en annuler deux.

Dans la figure 1.13c) on élimine ainsi deux liaisons par paire de blocs, ou seize liaisons au total. Ce procédé est effectué partout sur le pavage, et il est facile de calculer le pourcentage de liaisons qui sont annulées :  $\sqrt{2}/\lambda^3$ , ou environ 10%.

Le résultat de cette dilution est une réduction de la valeur effective de la coordination des sites  $D_1$  de  $z = 5$  à la nouvelle valeur de  $\tilde{z} = 3$ , et celle des sites  $C$  de  $z = 6$  à  $\tilde{z} = 5$ .

FIG. 1.14 – Les paires de sites partagées entre deux blocs (indiquées par des lignes épaisses)

### 1.5.3 Relation de récurrence du nombre de blocs

On peut représenter le nombre de blocs de chaque type par un vecteur  $\vec{n} = \{n_A, n_B, n_C, n_D\}$ . Le nombre de blocs de chaque type après déflation est  $N.\vec{n}$  où la "matrice de prolifération" de blocs est

$$N = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 4 & 4 \\ 8 & 5 & 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

La valeur propre la plus grande est  $\tilde{\lambda} = 7$ , et c'est cette valeur qui sert à déterminer l'énergie par bloc pour le calcul des paramètres d'ordre locaux.

### 1.5.4 Relation de récurrence de spin

Avec la définition de blocs de spins obtenus par dilution de liaisons, on peut écrire les nouvelles valeurs de spins effectifs après une inflation  $S^{(1)}$ ,

$$\{S_A^{(1)}, \dots, S_F^{(1)}\} = \{7s_0, 7s_0, 7s_0, 7s_0, 6s_0, 4s_0, 2s_0\} \quad (1.10)$$



Après  $n$  inflations on a  $\vec{S}^{(n)} = (S_A^{(n)}, \dots, S_F^{(n)}) = C\vec{S}^{(n-1)}$  où la matrice  $C$  s'écrit

$$C = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 2 & 5 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.11)$$

La plus grande valeur propre (en valeur absolue) de cette matrice détermine les valeurs asymptotiques des spins effectifs : pour  $n$  grand, les spins augmentent par un facteur 3, et donc  $\vec{S} \rightarrow \infty$ , c'est-à-dire la valeur classique. Comme pour le réseau carré, donc, nous trouvons que ce modèle est dans la même classe d'universalité que le modèle Heisenberg classique. Il y a un état ordonné à  $T = 0$ , mais plus que des corrélations antiferromagnétiques de courte portée pour  $T > 0$ . Les valeurs relatives des spins dans la limite asymptotique sont données par le vecteur propre correspondant aux plus grande valeur propre,

$$\{S_A^{(\infty)}, \dots, S_F^{(\infty)}\} = \{1, 1, 1, 1, 1, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}\} \quad (1.12)$$

### 1.5.5 Liaisons effectives sur le pavage inflaté

Dans le même esprit de simplification du nombre de familles de sites à sept seulement, on peut simplifier en ne distinguant que cinq types de liaisons différents sur le pavage. On considère par exemple, les liaisons  $l_{EF}$  qui relient un site E à un site F.  $l_{D_2F}$  et  $l_{D_1D_2}$  ont des significations évidentes, et enfin, nous allons considérer des liaisons entre un site central de type  $\alpha$  et un site F voisin qui seront appelées  $l_{\alpha F}$ , ainsi que les liaisons entre un site central  $\alpha$  et un site E,  $l_{\alpha E}$ . Ces cinq liaisons sont regroupées dans un vecteur de liaisons  $\vec{l}$ , et il y a une relation de récurrence pour ce vecteur qui est un des ingrédients de notre groupe de renormalisation,  $\vec{j}^{(1)} = M^{(0)}\vec{j}^{(0)}$ . La condition initiale est  $\vec{j}^{(0)} = (1, 1, 1, 1, 1)$  et la matrice M dépend des facteurs de renormalisation des spins  $\xi$  (voir [30] pour plus de précisions)

Une fois les nouveaux couplages trouvés, il faut calculer pour chacun des sept environnements la valeur moyenne des nouveaux couplages ( $\vec{j}_i^{(n)}$ ) et la valeur moyenne du facteur de renormalisation de spin,  $\xi_i^{(n)}$ . Avec ces valeurs moyennes, on peut répéter les mêmes opérations sur le nouveau pavage inflaté, c'est-à-dire définir les blocs de spin, et calculer les nouveaux termes de couplage effectifs.

## 1.6 Etat fondamental de l'AFM

### 1.6.1 Energie d'une étoile de Heisenberg

Pour le calcul d'énergies, nous aurons besoin de connaître l'énergie d'une étoile de spins quantiques, et ce sur des échelles successivement plus grandes. Pour les plus

petit amas de l'ordre zéro, nous avons déjà l'énergie de l'état fondamental de l'étoile de Heisenberg où tous les spins  $S$  et tous les couplages  $J$  sont identiques.

Après une inflation, les spins prennent des valeurs différentes selon les coordonnées, et il faut une généralisation de cette formule. Celle-ci, appelée  $\epsilon^{(1)}$  (évaluée sous l'hypothèse que le spin central interagit avec les spins qui l'entourent avec un même  $v$  couplage) est donnée dans la référence [30].

### 1.6.2 Energie de l'état fondamental par RG

On peut maintenant calculer l'énergie du pavage entier en sommant sur tous les sites de coordinnence donnée, sur tous les ordres de renormalisation. On obtient une expression simple de l'énergie par site de l'état fondamental :

$$\begin{aligned} e &= \sum_{i \in \alpha} (\epsilon_i^{(0)} + \frac{1}{\lambda^2} \epsilon_i^{(1)} + \frac{1}{\lambda^4} \epsilon_i^{(2)} + \dots) \\ &\approx -0.51 \end{aligned} \tag{1.13}$$

où nous avons appelé  $\epsilon_i^{(n)}$  l'énergie d'un amas de spins de la famille  $i$  à l'ordre  $n$  de renormalisation. On a tenu compte du fait que les fréquences des sites de type  $i$ ,  $f_i$ , diminuent par une facteur  $\lambda^{-2}$  après chaque inflation.

#### Rappel des résultats numériques

L'énergie de l'état fondamental dépend de la somme sur toutes les contributions des énergies locales, et peut être déduite des paramètres d'ordre locaux  $m_i$  ainsi que des fréquences d'occurrence des sites  $f_i$ , on obtient ainsi  $e^{num} = \sum_i z m_i^2 f_i \approx -0.66$ .

#### Un moyen approché de remettre les liaisons disparues

D'une part, il semble clair que l'énergie par site calculée pour le pavage dilué sera plus petite en valeur absolue que celle du pavage original, à cause des liaisons négligées. D'autre part, l'énergie par liaison devrait être un petit peu plus élevée pour le pavage dilué à cause de la réduction de la frustration du site central (qui est obligé de se partager entre moins de voisins que sur le pavage original). Donc l'effet de diluer le pavage n'est pas facile à estimer quantitativement. Nous avons essayé une correction "ad hoc", qui consiste à remettre *la moitié* des liaisons disparues, pour obtenir une estimation de l'énergie manquante. Ceci revient à placer la valeur de  $z$  des sites C égale à  $\tilde{z} = 5.5$  et pour les sites  $D_1$  à  $\tilde{z} = 4$ . Cet procédé a été utilisé pour corriger les paramètres d'ordre locaux, avec des résultats satisfaisants. Lorsqu'on calcule  $e$  avec la correction, on trouve  $e \approx -0.55$ , toujours (en ce qui concerne la valeur absolue) en dessous de la valeur numérique,  $-0.66$ . Cette différence a été constatée aussi pour le calcul sur le réseau carré de Sierra et Delgado [28].

### 1.6.3 Paramètres d'ordre locaux

#### Définition de l'énergie d'un amas

Nous allons relier le paramètre d'ordre d'une famille  $i$  (où  $i$  peut être A,B,...,ou F) à l'énergie  $E_i$  associée aux amas centrés aux sites de type  $i$ . A l'ordre zéro, un amas comporte un site central, entouré de ses  $z$  voisins. Au premier et plus grands ordres, chaque site de l'amas est remplacé par son déflaté (l'ensemble des sites qui se transforme en le site  $i$  après une inflation). Ainsi, l'amas de la famille A n'est que le site à l'ordre zéro, et l'étoile de huit bras (site central A et huit voisins F autour) au premier ordre. A l'ordre deux, l'amas comporte le bloc A au centre ainsi que les huit blocs  $D_1$  autour qui sont les déflatés des huit sites F. On prend en compte ainsi des énergies des corrélations sur des distances de plus en plus grandes.

Pour des amas d'ordre 0, les équations 1.2 et 1.9 donnent une formule analytique pour les paramètres d'ordre  $m^{(1)}$  [19]

$$m_i = \sqrt{\frac{z+2}{4z}} \quad (1.14)$$

Pour les ordres supérieurs, on doit évaluer les énergies totales des amas de tailles progressivement plus grandes. Une quantité intensive est obtenue en divisant ces énergies par le facteur de prolifération des blocs calculé auparavant, 7 par déflation. On obtient ensuite les  $m_i$  correspondants à l'étape  $n$  de renormalisation en utilisant la définition de l'équation 1.2 qui donne ici

$$m_i^{(n)} = \sqrt{\frac{E^{(n)}}{7^n z}} \quad (1.15)$$

Les résultats des quatre premiers ordres sont indiqués dans les figures 1.15a) et b), pour le pavage dilué. Il y a une rapide convergence des valeurs, les troisième et quatrième ordres se superposent sur l'échelle de la figure. Nous avons donc pris les valeurs de  $m_i^{(4)}$  comme suffisamment proche des valeurs asymptotiques, et effectué la correction du paragraphe précédant pour obtenir les paramètres d'ordre locaux pour le pavage original.

FIG. 1.15 – Valeurs de  $m_i$  obtenues par RG a) pour les ordres 1 et 2 et b) pour les ordres 3 et 4. La ligne hachurée est la forme analytique obtenue à l'ordre zéro

#### Correction pour compenser les liaisons disparues

Pour le pavage octogonal original, on peut appliquer la correction pour prendre en compte les liaisons manquantes mentionnées dans la section précédente. Les résultats

FIG. 1.16 – Valeurs de  $m_i$  obtenues par RG après correction (rectangles) et par calcul MC (cercles) pour les sept familles de sites

de notre calcul pour les paramètres d'ordre locaux sont tracés en fonction de  $z$  dans la figure 1.16) (rectangles gris) avec les résultats numériques (cercles gris).

## 1.7 Discussion

### Energie de l'état fondamental du pavage

Nous avons vu que l'énergie fondamentale du pavage octogonal semble être proche à celle du réseau carré. Ceci est une des conséquences du fait que les deux structures ont des sous-réseaux équivalents de coordinence moyenne de 4. Des études plus détaillées devront être faites pour déterminer les énergies des deux types de système. Il serait intéressant aussi d'étudier d'autres réseaux tel celui de la Fig.1.17), qui possède les trois propriétés énoncées ci-dessus. Il s'agit d'un réseau carré ayant sept sites par maille élémentaire. Les deux sous réseaux comporte le même nombre de sites, et les coordinences moyennes sont 4 pour les deux. On voit que ces sites sont les D,E et F du pavage octogonal. Il serait intéressant de comparer les résultats obtenus pour les paramètres d'ordre et  $E_0$  pour ce cas.

FIG. 1.17 – Réseau des sites D,E et F

### Prédictions pour des composés réels

Passant maintenant à la question de l'observabilité d'un état magnétique inhomogène, on se demande ce que l'on verrait dans une expérience de diffraction de neutrons. Nous avons déjà vu des résultats expérimentaux au début de ce chapitre pour l'antiferromagnétique quasipériodique AlMgHo. Il y a certes des différences entre le modèle simple de ce chapitre et le composé réel. D'abord, il s'agit d'un alliage de trois composants, tri-dimensionnel avec seulement 10% d'atomes magnétiques. Les interactions entre moments sont un peu plus compliquées que celles supposées entre premiers voisins de notre modèle. Nous pensons que ces différences sont moins importantes que le fait qu'il ait une connectivité quasipériodique pour les atomes magnétiques. Les autres atomes seraient, de ce point de vue, des simples spectateurs, n'ayant pas d'influence (autre que dans la détermination des valeurs de l'échange antiferromagnétique). On peut aussi sans doute négliger les interactions de plus longue portée, en ne gardant dans un premier temps que les plus fortes interactions entre proches voisins. La dimensionalité joue un rôle en permettant des phases ordonnées

à température finie, mais ici nous nous intéressons à la question de l'état ordonné à  $T = 0$ . Il y a lieu de croire que l'état à trois dimensions partagera des points en commun avec notre système. Puisqu'il n'y a pas de phase parfaitement ordonné à température finie, et qu'il s'agit des corrélations magnétiques de portée finie, on s'attend pour  $T > 0$  des taches diffuse de diffraction au lieu des pics de Bragg. A  $T = 0$  on aura une structure magnétique semblable à celle décrite dans ce chapitre. Nous sommes en mesure de calculer les positions de pics de Bragg attendues pour cette structure antiferromagnétique quasipériodique parfaitement ordonnée, et comparer le résultat avec les résultats expérimentaux pour les positions des taches de diffraction diffuses.

Il faut mentionner une interprétation alternative des expériences proposée par Vedmedenko et al [31]. Dans leur modèle, qui est aussi basé sur le pavage octogonal, on considère un hamiltonien de spins classiques, avec des interactions qui sont frustrées. La structure magnétique qui est ainsi stabilisée est quasipériodique, ayant une ordre spatiale inhomogène et une orientation de spins qui n'est plus uniaxiale mais tri-dimensionnelle. Le facteur de structure est en conséquence assez différent de celui calculé ci-dessous pour notre modèle, en ce concerne les positions des pics de Bragg. Une autre différence majeure est l'existence d'une diffusion diffuse importante dans leur système.

### Le facteur de structure

A partir de la distribution connue des  $m_i$  dans l'espace physique, il est facile de calculer numériquement le facteur de structure dans l'espace réciproque. Les figures 1.18) montrent les résultats d'une transformation de Fourier de l'état nonmagnétique (a) et l'état magnétique (c). Les figures de gauche montrent les pics du facteur de structure sur une échelle plus grande que les figures de droite qui sont un "zoom" sur l'origine dans l'espace réciproque. Nous avons mentionné que les points du pavage peuvent être obtenus en projetant d'un espace de dimension 4 (voir annexe). De la même façon, le facteur de structure peut être déduit à partir d'un espace réciproque à quatre dimensions. Cette méthode permet d'introduire l'indexation des pics de Bragg en termes de quatre entiers. Les points du cas nonmagnétique (a) et (b) peuvent être donc indexés par quatre nombres entiers. On superimposant les figures du haut avec les figures du bas on constate que les pics ne coïncident pas. En effet le diagramme c) est une sorte de translaté du diagramme a) dans le sens suivant : les indices des pics de la figure a) sont des quadruplets de nombres entiers tandis que les pics de la figure b) sont aux positions reliées aux anciennes positions par des translations d'une demi-maille dans chacune des quatre directions. Cette situation est reminiscente de celle trouvée dans les expériences de diffraction dans le composé MgZnHo. La figure 1) montrait les diagrammes de diffraction obtenus après la soustraction des pics non-magnétiques. Sato et al [1] ont pu indexer les taches principales par des vecteurs à six composantes. Les taches magnétiques ont pu être identifiées comme étant des translates des taches de l'état nonmagnétique dans l'espace réciproque six-dimensionnel.

Nous voyons ici l'analogie des systèmes périodiques, où la transition AFM fait apparaître de nouveaux pics qui sont les *translatés* des anciens pics. Dans le cas du

FIG. 1.18 – Facteurs de structure théoriques de la phase non-magnétique à haute température (a), et de la phase non-magnétique à basse température (c) ((b) et (d) montrent la région près de l’origine)

réseau carré par exemple (ou du réseau cubique en dimension  $d$  arbitraire) l’état antiferromagnétique résulte en une maille élémentaire de longueur double. Le diagramme de diffraction de la phase antiferromagnétique pourrait donc comporter deux fois plus de pics dans l’espace réciproque. Toutefois, le nouveau facteur de structure n’est plus simplement 1 comme pour le réseau original, et s’annule pour un pic sur deux. Le résultat en est que les anciens pics disparaissent et les nouveaux pics sont situés exactement à mi-distance entre les anciens. Pour le quasicristal, les pics sont également les translatés, mais dans l’espace à quatre dimensions. Un tel phénomène a été déjà prédit dans les structures quasipériodiques [32], et explicitement démontré pour un modèle unidimensionnel. Dans ce chapitre nous avons vu sa généralisation bidimensionnelle.

Nous avons présenté un modèle de spins quantiques sur le pavage octogonal et résolu sous certaines approximations des équations de RG pour les paramètres d’ordre locaux. On trouve que ceux-ci sont en assez bon accord avec les résultats numériques de MCQ. L’état fondamental est donc assez bien décrit par notre modèle qui utilise la symétrie d’inflation de la structure quasipériodique. La technique utilisée est relativement simple et exploite la symétrie hiérarchique d’un pavage quasipériodique à deux dimensions. Elle devrait se prêter sans trop de difficulté à d’autres types de modèles discrets construits à partir du pavage octogonal. Il serait intéressant de regarder sa généralisation aux autres pavages connus à deux et à trois dimensions.

# Chapitre 2

## Les modèles de liaisons fortes quasipériodiques

FIG. 2.1 – Représentation schématique des spins des électrons corrélés sur le pavage octogonal (cercles blancs(noirs) : densité de spin positive(négative))

Dans ce chapitre nous considérons le problème d'une particule dans un milieu quasipériodique bidimensionnel. Plus précisément, nous nous intéresserons ici aux propriétés spectrales d'une telle particule décrite à l'aide d'un modèle des liaisons fortes. Les hamiltoniens correspondants aux systèmes finis sont diagonalisés par un calcul numérique. On obtient ainsi les spectres des systèmes de taille assez grande, ce qui permet ensuite de faire des études statistiques. Le système le plus grand étudié comporte quarante mille sites et environ vingt mille niveaux par secteur de symétrie. S'il existe des méthodes relativement simples et rapides pour déterminer les valeurs propres, il est plus coûteux en temps et en mémoire de calcul informatique de calculer les fonctions propres de la particule. Nous verrons qu'il est néanmoins possible d'obtenir des informations sur les fonctions d'onde et l'évolution temporelle d'un paquet d'ondes à partir d'une analyse statistique du spectre. Comme il sera expliqué dans ce chapitre, on dispose de quelques outils statistiques développés pour la description des systèmes complexes. Les modèles que nous allons discuter ici seront souvent des hamiltoniens de sauts purs où la particule a une amplitude de saut constante  $t$  de sauter sur n'importe quel site voisin, et la géométrie quasipériodique entre uniquement à travers la connectivité des sites.

(La figure 2.1 illustre la complexité mais aussi la haute symétrie associée aux pavages quasipériodiques. Il s'agit de l'état magnétique induit par une répulsion coulombienne entre particules (ce modèle ne sera pas discuté ici), où l'on voit apparaître un ordre antiferromagnétique self-similaire à demi-remplissage [33]).

## 2.1 Introduction

Dans l’approximation des liaisons fortes, un électron appartenant à un atome donné peut sauter du site d’origine à un autre site proche, avec une amplitude de saut  $t$  qui est supposée être petite devant l’énergie de liaison avec l’atome parent. Les orbitales atomiques  $\{|i\rangle\}$  forment une base complète pour les calculs des fonctions d’onde du système, et l’hamiltonien en l’absence des interactions entre particules s’écrit

$$H = \sum t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum V_i c_i^\dagger c_i \quad (2.1)$$

où  $c_i^\dagger$  et  $c_j$  sont les opérateurs habituels de création et de destruction d’un fermion sur le site  $i$ . Les paramètres  $\{V_i\}$  prennent en compte des éventuelles variations du potentiel effectif local. La famille de modèles simplifiés décrite par l’Eq.2.1 permet de comprendre qualitativement le comportement des électrons dans une grande variété de situations. On peut considérer des sauts entre premiers voisins seulement, en supposant que les amplitudes  $t_{ij} = t$ , pour étudier les effets de la connectivité des sites dans l’espace, ou bien étudier les effets de changement de dimension. Si les paramètres de l’hamiltonien sont distribués de manière périodique, quasipériodique ou aléatoire, on peut étudier des comportements “génériques” dans des milieux correspondants. Quand les sauts successifs sont faits de façon cohérente, comme c’est le cas dans un cristal, la particule sera délocalisée, ayant une fonction d’onde qui reflète la périodicité de la structure. Dans le cas contraire d’incohérence des mouvements de l’électron, comme c’est le cas dans une structure amorphe, la fonction d’onde est localisée et la particule reste dans le voisinage d’un site favorable. Plus la dimension de l’espace est basse, plus l’effet du désordre est fort.

Nous allons brièvement rappeler quelques résultats obtenus dans des modèles unidimensionnels dans la sous-section suivante avant de passer aux cas qui nous intéressent. Quelques définitions de quantités importantes pour les analyses statistiques des modèles seront données avec des exemples venant du domaine des systèmes désordonnés, avant de passer aux modèles quasipériodiques.

### 2.1.1 Quelques résultats à une dimension

#### Cas périodique

Un modèle de “saut pur” pour la chaîne périodique est obtenu en prenant  $t_{ij} = t$  entre deux sites proches voisins et avec  $V_i = cste$ . Dans ce cas, le théorème de Bloch s’applique, et les états sont indexés par un vecteur d’onde  $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$  où  $a$  est la distance entre sites. Le support du spectre est continu, il s’étale sur une largeur de bande de  $4t$ . Les états sont étendus, l’amplitude des fonctions d’onde ne diminue pas avec la distance à l’origine. Les particules ont une dynamique de particules libres, c’est-à-dire, elles ont une vitesse moyenne constante, et leur mouvement est appelé “ballistique”.



## L'effet du désordre

Lors que, dans le modèle précédent, on rajoute du désordre, en prenant une distribution de valeurs de  $V_i$ , ou des  $t_{ij}$ , toutes les fonctions d'onde sont exponentiellement localisées, et le support de la mesure spectrale devient de type "ponctuel" [34]. Un paquet d'ondes représentant une particule auraient une vitesse de groupe nulle.

## Cas quasipériodique

Le quasicristal n'est ni périodique ni désordonné, et son spectre est qualitativement différent des deux spectres décrits ci-dessus. Le quasicristal le plus étudié et celui pour lequel on dispose de plus de résultats analytiques est la chaîne de Fibonacci. La quasipériodicité peut être "diagonale" ou "hors-diagonale" (où c'est soit les potentiels  $V_i$ , soit les paramètres de saut  $t_{ij}$  qui sont organisés selon la séquence de Fibonacci). Grâce à ces études on sait que le spectre est intermédiaire en caractère entre le cas continu du système périodique et le cas ponctuel des systèmes désordonnés (voir la discussion de Sire dans [35]). On appelle ce comportement "singulier continu", l'exemple en étant l'ensemble de Cantor. Un de ses caractéristiques est un support de la mesure spectrale qui tend vers zéro en fonction de la longueur du système, non pas exponentiellement comme c'est le cas pour la chaîne désordonnée, mais avec un exposant caractéristique du modèle. Ce n'est qu'un des exposants caractérisant le spectre, il existe toute une famille qui décrit le scaling "multifractal" de la mesure. Associées à ce spectre sont des fonctions d'onde "critiques". Cette appellation fait référence au fait que dans l'espace réel leurs enveloppes décroissent en loi de puissance. Plus précisément, chaque moment décroît avec un exposant différent, et il faut une description multifractale pour caractériser des telles fonctions d'onde.

La dynamique quantique d'un paquet d'ondes dans un tel système est moins rapide que dans la limite ballistique où la distance moyenne parcourue est proportionnelle au temps écoulé. Le comportement dynamique a également une description multifractale [36]. C'est une diffusion dite anormale puisqu'elle généralise la diffusion classique dans un milieu désordonné où la distance moyenne parcourue dépend du temps en  $\tau^{1/2}$ .

Nous avons déjà cité des travaux qui considèrent plus généralement des fermions avec interactions, appliquant la technique de bosonisation, et utilisant des équations de groupe de renormalisation [15, 10]. Ces calculs sont satisfaisants dans la limite perturbative, de faible potentiel quasipériodique. Selon le remplissage du système, on trouve une transition métal-isolant même en l'absence d'interactions. Les résultats analytiques sont confirmés par des calculs numériques, qui utilisent la méthode de matrices de transfert alliée aux relations de récursion de Fibonacci. Dans l'autre limite, celle de forte modulation quasipériodique des paramètres, on dispose aussi des résultats pour la distribution des gaps, la mesure spectrale, et des exposants du spectre multifractal (voir par exemple [37]).

Avant de passer à deux dimensions, mentionnons un modèle qui a été beaucoup étudié dans divers contextes et a un rapport étroit avec les hamiltoniens quasipériodiques qui nous intéressent : le modèle de Harper

$$H = \sum t_{ij} c_i^\dagger c_j + \lambda \sum \cos(\omega x_i) c_i^\dagger c_i \quad (2.2)$$

où  $\omega$  est un paramètre irrationnel créant une modulation incommensurable dans l'espace, et où  $\lambda$  est le paramètre qui contrôle le passage du système d'un régime d'états électroniques étendus ( $\lambda < 2$ ) à un régime d'états électroniques localisés ( $\lambda > 2$ ). Au point critique  $\lambda = 2$  ce modèle ressemble celui de la chaîne de Fibonacci en ce qui concerne le spectre (un ensemble de Cantor) et les états de type critiques [38].

### 2.1.2 Deux dimensions

A deux dimensions, un paradigme du cas cristallin est le modèle sur un réseau carré obtenu en plaçant  $t_{ij} = t$  pour des sites  $i$  et  $j$  premiers voisins et  $V_i = V$  dans l'Eq.(2.1). Le paramètre  $V$  ne joue aucun rôle intéressant, déterminant seulement la position du centre de la bande d'énergie, et on peut placer  $V = 0$ . Les énergies sont données par  $E(k) = 2t \cos(k_x a) + 2t \cos(k_y a)$  où  $k$  est le vecteur d'onde de Bloch  $k_{x,y} \in [-\pi/a, \pi/a]$  ( $a$  étant le paramètre du réseau). Les états propres sont des généralisations des ondes planes, ayant une vitesse de groupe donnée par  $v_\mu = dE(k)/dk_\mu$ .

Il est plus difficile qu'à une dimension de localiser les états en rajoutant du désordre dans les paramètres  $t_{ij}$  et  $V_i$ , dans la mesure où les longueurs de localisation restent grandes jusqu'à ce que le désordre devienne assez fort. Les états électroniques sont tous néanmoins localisés dès lors que l'on désordonne le cristal.

Passant aux systèmes quasipériodiques à deux dimensions, des études ont été faites pour la famille de hamiltoniens suivants

$$H = t \sum_{(i,j)} c_i^\dagger c_j + (1-t) \sum V_i c_i^\dagger c_i \quad (2.3)$$

où  $j$  et  $i$  sont proches voisins, et où  $V_i$  est la coordonnée du site  $i$ . En fonction du paramètre  $t$ , on peut passer de la limite d'atomes découplés ( $t = 0$ ) à la limite du modèle à sauts purs ( $t = 1$ ), en passant par le Laplacien discret ( $t = \frac{1}{2}$ ). On constate qu'il est plus difficile d'ouvrir des gaps que dans le cas unidimensionnel, et que le spectre est continu dans une gamme de valeurs de  $t$  [39]. Ce n'est que pour  $t$  suffisamment petit, que l'on voit l'apparition de bandes séparées par des gaps – les atomes étant progressivement découplés lorsque  $t$  diminue, jusqu'à ce que l'on retrouve les six valeurs propres  $E = z_i$  dans la limite  $t \rightarrow 0$ .

Des études numériques récentes de Grimm et collaborateurs [40, 41] de modèles de ce type sur une variété de pavages uni- et bi-dimensionnels montrent que les spectres ont un caractère singulier continu et les fonctions d'onde sont de type critique. Quant aux analyses théoriques, les règles d'inflation qui ont été si utiles dans la résolution des spectres à une dimension sont plus compliquées à exploiter à deux dimensions. Il y a eu quelques calculs approchés par groupe de renormalisation pour le pavage

octogonal [21, 22]. L’approche donne des résultats satisfaisants pour le cas de terme potentiel fort. Elle s’avère être moins performante pour le cas de l’hamiltonien des sauts purs, comme on peut le voir en comparant avec les travaux numériques sur le pavage octogonal [39].

Nous nous intéresserons dans ce chapitre uniquement au cas des sauts purs ( $t = 1$ ). Ici, la quasipériodicité de la structure intervient uniquement à travers les connectivités des sites. (Notons que les termes diagonaux  $V_i$  accentuent la modulation quasipériodique, et on peut dire en simplifiant qu’ils tendent à réduire la dimension effective de l’espace [35, 42]). Pour mieux comprendre les propriétés spectrales, nous avons fait une analyse statistique des niveaux d’énergie, suivant une approche courante dans le domaine des métaux désordonnés. La section suivante présente quelques-uns des outils statistiques principaux avec un aperçu des interprétations physiques que l’on peut en tirer.

## 2.2 Prédiction théorique pour des systèmes complexes

Il est souvent inutile d’avoir des informations précises sur la position de chaque niveau d’énergie d’un système complexe, par contre, il est plus intéressant d’en connaître des propriétés moyennes. Des études sur une large variété de systèmes complexes montrent qu’ils possèdent un certain nombre de propriétés spectrales universelles, permettant de les classer dans des catégories intégrables, non-intégrables et presque-intégrables.

Un cadre théorique pour les systèmes complexes de toutes sortes est fourni par la théorie des matrices aléatoires. Cette théorie prédit des formes simples pour des quantités telles que la statistique des écarts  $s$  entre niveaux,  $P(s)$ , et pour la “rigidité spectrale”  $\Sigma^2(E)$ . Ce sont deux propriétés spectrales que nous allons définir dans la section suivante, avant de les calculer pour divers pavages bidimensionnels. Ces calculs permettront de situer les pavages selon leurs propriétés statistiques dans le paysage des modèles déjà connus. Les définitions de quelques propriétés spectrales clés, avec un rappel des résultats principaux ainsi qu’une discussion détaillée pour des systèmes désordonnés sont présentés dans le chapitre 10 de [43].

### Théorie des matrices aléatoires

La théorie des matrices aléatoires (TMA) a été conçue comme un modèle simple permettant de reproduire certaines propriétés du spectre des systèmes pour lesquels on ne disposait pas de détails microscopiques précis. A l’origine, il s’agissait des gros noyaux, avec leurs dizaines de constituants interagissant par des forces encore malconnues, qui a été la motivation pour le développement de cette théorie. Wigner et indépendamment Dyson [44, 45, 46] ont voulu étudier la distribution des valeurs

propres d'une grande matrice dont les éléments sont distribués selon une loi simple comme la gaussienne, (voir le texte de Mehta [47] pour plus de détails). D'autres exemples de systèmes complexes décrits par la TMA sont maintenant connus. Le système dynamique complexe prototype est un billard dont les conditions aux bords rendent le mouvement d'une particule chaotique, comme le billard de Sinai (où la particule se déplace dans un carré ayant un diffuseur circulaire au milieu, et avec des conditions limites périodiques). Plus près de notre modèle quasipériodique, un électron dans un milieu faiblement désordonné constitue un système ergodique pour des temps suffisamment longs.

Quelques-unes des prédictions de la TMA sont brièvement discutées ci-dessous.

### 2.2.1 La distribution d'écart entre niveaux

Supposons que l'on connaisse les niveaux d'énergie, soit à partir des mesures (sur des noyaux lourds par exemple) soit à partir d'un calcul numérique. Les écarts entre niveaux sont  $s_i = E_{i+1} - E_i$  (où les niveaux sont supposés être numérotés en ordre d'énergie croissante). La distribution des écarts de niveaux premiers voisins est donnée par

$$P(s) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(s - s_i) \quad (2.4)$$

$P(s)$  mesure les corrélations entre proches voisins du spectre, et on peut s'attendre à un comportement simple universel de cette quantité. Il faut qu'on ait préalablement corrigé les effets de variation dans les écarts provenant d'une densité d'états non constante. On considère ainsi la statistique des écarts pour un système où la densité de niveaux est effectivement constante, avec la valeur moyenne  $\bar{s} = 1$ . On élimine ainsi les variations dans les écarts qui sont dues uniquement à une valeur locale de la densité d'états élevée ou basse par rapport à la moyenne globale. Quand la densité d'états n'est pas très fluctuante, on peut souvent se contenter de diviser les écarts par leur valeur moyenne globale  $\Delta = W/N$  où  $W$  est la largeur de la bande et  $N$  le nombre d'intervalles. Quand la densité d'états varie beaucoup, il devient nécessaire d'effectuer un "dépliage" du spectre.

#### Dépliage du spectre

L'opération de dépliage (voir Bohigas et Giannoni dans [48]) consiste à définir les nouveaux écarts des "niveaux"  $N_{cl}(E_i)$  obtenus à partir d'une courbe  $N_{cl}$ . Cette dernière est la densité d'états intégrée du système *sans* les fluctuations quantiques. Elle s'obtient dans la pratique en lissant la courbe de  $N(E)$  trouvée par calcul numérique, de façon à éliminer les rugosités locales. Les écarts entre les niveaux dépliés ont la propriété souhaitée, la valeur moyenne locale est partout égale à 1.

L'opération de dépliage n'est pas toujours triviale à faire. Souvent, on peut en effet distinguer les fluctuations quantiques puisqu'elles ont lieu sur une échelle d'énergie caractéristique, plus petite que l'échelle des variations de  $\rho_{cl} = dN_{cl}/dE$ . Cette séparation d'échelle n'est plus valable dans le cas du quasicristal, où les fluctuations existent sur toutes les échelles d'énergie. Dans ce cas, la notion de dépliage n'est pas aussi évidente, et nous avons donc calculé les distributions des écarts obtenus pour plusieurs choix de dépliage différents.

### La statistique de Wigner-Dyson

La TMA permet de calculer des fonctions de corrélation des niveaux d'énergie des ensembles de matrices suivants : l'ensemble orthogonal (GOE, pour Gaussian Orthogonal Ensemble), unitaire (GUE, Gaussian Unitary Ensemble) et symplectique (GSE, Gaussian Symplectic Ensemble). En supposant que les écarts ont été dépliés de façon appropriée (la densité d'états n'est pas constante pour les matrices aléatoires et possède plutôt une forme semicirculaire), on peut obtenir des formes approchées simples de  $P(s)$  :

$$P_{WD}(s) = A_\beta s^\beta e^{-C_\beta s^2} \quad (2.5)$$

où  $\beta$  prend les valeurs 1, 2 et 4, pour chacun des trois ensembles cités. Les constantes  $A_\beta$  et  $C_\beta$  ont les valeurs  $A_1 = \pi/2$  et  $C_1 = \pi/4$  pour le cas GOE. Cette distribution est appelée celle de Wigner et Dyson, les premiers à l'avoir proposée.

Les formes analytiques de l'équation 2.5 ont pu être vérifiées dans des études numériques des systèmes dynamiques chaotiques. On peut remplacer, dans l'hypothèse ergodique, la moyenne sur l'ensemble de la TMA par une moyenne prise sur différentes parties du spectre obtenu numériquement. Les lois de Wigner-Dyson sont vérifiées également par les spectres des électrons dans les métaux faiblement désordonnés. On peut aussi voir le passage de la statistique  $P(s)$  d'une forme (l'orthogonale) en l'absence d'un champ magnétique extérieur, à une autre (l'unitaire) lors qu'un champ extérieur agit sur le système. La forme symplectique est, elle, observée lorsque l'électron est en plus diffusé par des impuretés spin-orbitales.

### La statistique de Poisson

Il y a une autre limite où la forme de  $P(s)$  est simple à établir : c'est le cas des niveaux aléatoires suivant une loi de Poisson où la distribution des écarts a une forme exponentielle :

$$P_P(s) = e^{-s} \quad (2.6)$$

C'est la distribution obtenue pour les écarts de niveaux d'un modèle intégrable, si on considère l'ensemble des niveaux sans les séparer par groupes de symétrie. Cette

forme de distribution est aussi celle du problème d'un électron qui se propage dans un milieu fortement désordonné, et dont les fonctions d'onde sont exponentiellement localisées. La différence la plus importante à remarquer entre  $P_P$  et  $P_{WD}$  est dans leurs comportements aux petites valeurs de  $s$ . En effet, les distributions de Wigner-Dyson démarrent d'une valeur nulle à  $s = 0$ . Cette propriété de "répulsion entre niveaux" est retrouvée dans les systèmes désordonnés diffusifs. Ceci s'explique par le fait que lorsque deux états sont proches en énergie leurs fonctions d'onde se croiseront souvent dans le volume disponible, ce qui résulte en un écartement des niveaux. Les petits écarts seront donc improbable dans ce cas. La répulsion entre niveaux n'est plus opérante pour un système très désordonné – lorsqu'il y a une localisation forte on voit une probabilité  $P_P(s)$  non-nulle aux petites valeurs des écarts. Ceci est dû au fait qu'il peut y avoir plusieurs états d'énergies proches situés dans des régions éloignées les unes des autres.

### La statistique au point critique

Notons enfin que les systèmes désordonnés au point critique (c'est-à-dire à la transition métal-isolant) ont été décrits par une formule interpolant entre les formes de la TMA à petit  $s$  et la forme exponentielle aux  $s$  grands [49]

$$P_c(s) = A_\beta s^\beta e^{-as^{(2-\gamma)}} \quad (2.7)$$

où  $\beta$  dépend de la symétrie GOE, GUE ou GSE de l'hamiltonien. Cette dépendance est à peu près bien suivie dans des études numériques [50, 51] même si, curieusement, l'exposant  $\gamma$  en plus d'être dépendant de la dimension semble être dépendant des conditions aux bords [52]. La forme de  $P_c(s)$  est une conséquence de la structure multifractale des états électroniques au point critique. Un cas particulier simple correspond à la statistique dite "semi-Poissonienne"

$$P_{sP}(s) = 4se^{-2s} \quad (2.8)$$

proposée pour des billards pseudo-intégrables par Bogomolny et al [53], et qui décrit également la statistique à la transition métal-isolant GOE. Le nom provient du fait que c'est la statistique des écarts d'une suite de nombres aléatoires  $y_i = (x_{i+1} + x_i)/2$  où  $x_i$  sont distribués avec la distribution de Poisson. On trouve cette statistique également dans le modèle de Harper à son point critique [38].

### 2.2.2 La rigidité spectrale

Cette quantité sert à mesurer le degré de "compressibilité" du spectre, comme son nom l'indique. La définition en termes d'une fonction de corrélation à deux énergies est

$$\Sigma^2(E) = \langle (N(E) - \langle N(E) \rangle)^2 \rangle \quad (2.9)$$

où  $N(E)$  est le nombre d'états dans une intervalle d'énergie  $E$ , et la moyenne est évaluée sur toutes la bande des énergies.

La rigidité spectrale est reliée à la fonction de corrélation à deux énergies  $K(E') = \langle N(E)N(E+E') \rangle - \langle N(E) \rangle^2$  par  $\Sigma^2(E) = 2 \int_0^E dE' (E-E')K(E')$ . Une relation entre  $K$  et des propriétés dynamiques a été montrée pour le cas particulier de diffusion dans un milieu désordonné [54]. La transformée de Fourier  $K(t)/t$  est ici proportionnelle à la probabilité de retour à l'origine après un temps  $t$ ,  $p(t) \sim t^{1-d\mu}$  où  $\mu = 0.5$  pour la diffusion habituelle et  $d$  est la dimension de l'espace. Plus généralement, dans des systèmes diffusifs, on peut avoir une régime d'énergies intermédiaires, où le paquet d'ondes diffuse dans le milieu avec un exposant effectif  $\mu$ . Ici, on s'attend donc à un comportement en loi de puissance de  $\Sigma^2(E)$  :

$$\Sigma^2(E) \sim E^{d\mu} \quad (2.10)$$

Cette correspondance entre la rigidité spectrale et la dynamique sera utilisée plus tard pour la prédiction des exposants de diffusion effectifs dans les divers pavages.

La théorie des matrices aléatoires quant à elle prédit une forme logarithmique de  $\Sigma^2(E)$

$$\Sigma_{TMA}^2(E) = \frac{1}{\beta\pi^2} \ln(2\pi E/\Delta) \quad (2.11)$$

Cette loi logarithmique est bien observée dans les systèmes faiblement désordonnés aux énergies petites/temps très grands, où l'électron a déjà atteint les bords un grand nombre de fois et se trouve dans le régime ergodique bien décrit par la TMA (voir la discussion de la section suivante).

Lorsque les niveaux sont distribués avec une loi de Poisson, des petits écarts deviennent beaucoup plus probables, et il y aura en conséquence des fluctuations plus importantes de  $N(E)$  dans ce cas.  $\Sigma^2(E)$  ici augmente linéairement en  $E$

$$\Sigma_P^2(E) = E \quad (2.12)$$

Ce comportement est observé dans les systèmes fortement désordonnés, où il y a une localisation forte des électrons.

### 2.2.3 Phénomènes de crossover entre différents régimes

On peut observer plusieurs comportements différents dans un même système, selon la gamme d'énergies considérée dans les calculs. Il est utile de distinguer entre

plusieurs échelles d'énergie ou de temps [49] dans des tels systèmes. Une des énergies caractéristiques d'un système est l'écart moyen entre niveaux,  $\Delta$ . Une autre énergie caractéristique d'un système fini de longueur  $L$ , appelée l'énergie de Thouless, correspond à l'inverse du temps que met un paquet d'ondes pour atteindre les bords,  $E_c = \hbar/t_L$ . Cette dernière est généralement grande par rapport aux écarts typiques dans les systèmes pas trop désordonnés. Pour des échelles de temps beaucoup plus grandes que  $t_L$ , autrement dit pour  $E \ll E_c$  on se trouve dans une régime ergodique où les prédictions de la TMA sont éventuellement vérifiées. La rigidité spectrale peut donc avoir des comportements différents selon l'énergie  $E$ , tandis que la statistique des écarts  $P(s)$  est une quantité intéressante surtout pour des corrélations entre niveaux séparés par  $s \sim \Delta$ .

## 2.3 Pavages octogonaux parfaits et randomisés

Nous étudions le modèle de sauts purs, avec un paramètre  $t$  constant que l'on peut poser égal à 1, donnant l'équation aux valeurs propres suivante :

$$H\psi_i^{(l)} = \sum_{\langle i,j \rangle} \psi_j^{(l)} = E_l \psi_i^{(l)} \quad (2.13)$$

où  $i = 1, \dots, N$  est l'indice du site,  $\psi_i^{(l)}$  est la projection sur ce site du  $l$ ème vecteur propre dont la valeur propre est l'énergie  $E_l$ . La somme porte sur tous les voisins du site  $i$  qui sont reliés à celui-ci par une arête. La matrice hamiltonienne est donc une matrice creuse  $N \times N$  pour un système fini de  $N$  sites. Les pavages utilisés dans les calculs numériques seront maintenant brièvement décrits.

### Pavage parfait

Le mot "parfait" signifie que le pavage est obtenu en suivant un procédé déterministe décrit dans l'annexe. Pour minimiser les effets de surface, il est préférable de choisir un morceau qui peut être répété périodiquement dans l'espace. Cela est possible en choisissant des approximants périodiques du pavage, comme ceux introduits par Oguey et al [55]. Il s'agit de morceaux carrés à l'intérieur desquels on retrouve les mêmes environnements que dans un pavage infini. Les seuls "défauts" se trouvent aux bords des approximants. En prenant des approximants assez grands, on s'approche d'un pavage parfait. Les approximants, ainsi que quelques-unes de leurs propriétés sont présentés dans l'annexe.

### Pavages aléatoires

Il est intéressant de considérer des pavages formés des mêmes tuiles de base, mais avec un assemblage aléatoire (voir l'article de revue par Henley dans [56]). La théorie



des pavages aléatoires (Random Tiling Models, ou RTM) a été développée en réponse aux questions concernant la stabilité des quasicristaux, et leur mécanisme de formation. Dans cette approche c'est la grande entropie associée à l'ensemble des pavages aléatoires pour une symétrie donnée qui favorise l'apparition d'une phase quasipériodique de ce type. Les pavages idéaux tels le pavage de Penrose et le pavage octogonal parfait sont un des membres de cette plus grande classe de structures. Les calculs de Monte Carlo [57] ont montré pour le cas d'un pavage binaire (ayant deux tuiles de base) qu'une phase quasipériodique stable apparaît à basse température. Ce résultat est raisonnable puisque les organisations locales de tuiles permettaient de garder une énergie des configurations assez basse tout en baissant l'énergie libre de la phase ordonnée à cause de l'existence des multiples configurations iso-énergétiques. Ces résultats ont été étendus dans [58], où l'entropie des RTM a pu être calculée en fonction du degré de désordre du pavage – plus précisément, en fonction de la “phason strain”, une quantité qui mesure l'écart du système par rapport au système parfait. Une solution exacte par l'ansatz de Bethe a été donnée par Widom [59] et Kalugin [60] pour les pavages à la base de triangles et carrés (Square Triangle tilings). Enfin, pour en venir au pavage octogonal, une description des différentes phases possibles pour un RTM ainsi qu'un modèle des transitions de phase à la Landau a été donnée par Li et al [61].

Sans rentrer dans les détails de l'obtention et la description théorique des pavages du RTM, nous nous intéressons ici à leurs propriétés électroniques. Pour étudier les conséquences de l'introduction du hasard dans la composition du pavage, nous avons choisi d'étudier des pavages parfaits qui ont été “randomisés”. Ce procédé de randomisation est simple : on prend un approximant parfait tel que ceux décrits dans l'annexe, et on effectue des permutations locales de tuiles, appelées des “phasons”. Ce sont des opérations, comme on le montre dans la figure 2.2, qui ne modifient que l'intérieur des régions hexagonales.

FIG. 2.2 – Une permutation locale (excitation phason) de tuiles

Il est simple d'obtenir des échantillons de pavages désordonnés en opérant ces opérations locales de tuiles en boucle, choisissant leur positions au hasard lors de chaque boucle. On obtient ainsi, par exemple, le pavage de la Fig.2.6. Leurs diagrammes de diffraction comportent des pics aux mêmes endroits que celui du pavage parfait, avec en plus une contribution diffuse. A trois dimensions, les RTM ont des pics de Bragg et relativement moins de diffusion diffuse – ce qui fait qu'ils sont des bons candidats pour plusieurs modèles de structure pour des alliages quasipériodiques. Cependant, si les facteurs de structure du pavage parfait et ceux désordonnés sont qualitativement similaires, les propriétés électroniques sont très différentes, comme nous allons le voir. En effet, les symétries exactes présentes dans le pavage parfait donneront lieu à des singularités qui n'existent pas pour le pavage aléatoire qui de ce point de vue ressemble plus aux systèmes désordonnés classiques qu'un quasicristal.

### 2.3.1 Analyse du spectre du pavage parfait

Dans les calculs décrits ici, nous avons considéré des approximants (voir annexe) de tailles allant jusqu'à environ quarante mille sites. L'hamiltonien de l'Eq.(2.13) est une matrice creuse, puisque chaque rang (ou colonne) de  $N$  éléments ne comporte qu'un maximum de 8 éléments non-nuls (la coordonnance maximum du pavage). En conséquence, la méthode de diagonalisation Lanczos est à préférer, puisque très efficace pour ce genre de systèmes. Les conditions aux bords sont périodiques,

$$\psi^{(l)}(x + mL, y + nL) = e^{i(mk_x L + nk_y L)} \psi^{(l)}(x, y) \quad (2.14)$$

où les vecteur de Bloch  $\vec{k} = (k_x, k_y)$  correspondent à la périodicité  $L$  de la structure étendue. Les bandes d'énergie  $E^{(l)}(\vec{k})$  se recouvrent, formant un spectre continu.

Notre calcul de Lanczos donne assez rapidement toutes les valeurs propres distinctes. On note ici, qu'à cause de la symétrie miroir des approximants carrés (voir annexe), les valeurs propres non-nulles sont doublement dégénérées. La valeur propre  $E = 0$  correspond, elle, à un nombre macroscopique d'états (la fonction d'onde se trouve être centrée aux sites de coordonnance 8), et sa dégénérescence est exactement connue. Ainsi, on peut vérifier que le programme a bien rendu toutes les valeurs propres. Celles-ci sont numérotées de 1 à  $N_{max}$  où  $N_{max}$  est le nombre de niveaux distincts (un peu moins de la moitié du nombre total  $N$ ).

#### Statistique des écarts bruts

Tout d'abord, on calcule la distribution  $P(s)$  pour les écarts bruts, c'est-à-dire sans aucun réajustement, avec  $s_i = E_{i+1} - E_i$ .

Ici les écarts ont une valeur moyenne qui dépend de la taille du système, puisque  $\bar{s} = W/(N_{max} - 1)$  où  $W$  est la largeur de la bande. Les distributions  $P(s)$  seront donc progressivement poussées vers la gauche (valeurs petites de  $s$ ) quand  $N$  augmente. Elles sont aussi extrêmement larges, ce qui suggère de prendre comme variable le logarithme de  $s$ ,  $y = \ln s$ . La largeur de cette distribution d'écarts pourrait avoir été aussi déduite de la forme de la densité d'états  $\rho(E)$ , montrée dans la figure 2.3. Elle est rugueuse, avec des fluctuations de grande amplitude, et elle comporte des pics de toutes les hauteurs, dont les largeurs tendent vers zéro dans la limite d'un pavage infini. Pour tracer la courbe dans la figure, on a choisi de considérer le nombre d'états dans des intervalles d'énergie d'une certaine largeur – si l'on choisissait une autre valeur de cette largeur (“bin width”) on obtiendrait une autre courbe qui serait qualitativement similaire, mais qui ne coïnciderait nulle part avec la première courbe. C'est une des caractéristiques de la densité d'états singulière du pavage parfait, et ce n'est plus le cas pour le pavage randomisé.

La distribution du logarithme de  $s$  a été calculé dans [62], où l'on a montré que  $P(y)$  est gaussienne sur une large gamme de valeurs de  $y$ . Quand les courbes des approximants successifs sont portées sur le même graphe, on constate que les maxima de ces courbes sont décalés progressivement vers la gauche, avec un déplacement

FIG. 2.3 – Représentation schématique de la densité d'états du pavage octogonal parfait

constant entre chaque approximant et le prochain. Les écarts bruts  $s$  obéissent donc à une distribution log-normale :

$$P(s) = C_N \exp^{-(\ln(s)-a_N)^2/\sigma_N} \quad (2.15)$$

où  $C_N$  est une constante de normalisation. La valeur moyenne des  $y_i$ ,  $a_N$ , dépend de  $N$ , mais le largeur  $\sigma_N$  ne varie pas avec la taille du système. La figure 2.4 montre la superposition des trois courbes correspondant aux trois tailles (de  $N= 1343$ , 8119 et 47321 sites) après translations par la distance  $a_N$  dans chaque cas. Elle montre que la largeur de ces courbes ne dépend pas de la taille du système. Il est facile de comprendre la variation des  $a_N$  avec  $N$ , étant donné que la valeur moyenne des écarts doit être inversement proportionnelle à  $N$ , mais la nonvariation de  $\sigma$  est à première vue un peu surprenante. En effet, ce comportement de la largeur est contraire à celui que l'on attend pour un ensemble de Cantor sur l'intervalle  $W$  obtenu par la méthode de construction habituelle, où la largeur augmente logarithmiquement avec le nombre de niveaux.

FIG. 2.4 – Statistique des logarithmes des écarts pour le pavage parfait.

### Une relation entre $P(s)$ des écarts bruts et dépliés

La section suivante explique le calcul de  $P(s)$  après un dépliage des écarts, pour éliminer les variations de la densité d'états. On trouve alors la statistique de Wigner-Dyson. On peut se demander quelle est la relation entre les deux distributions obtenues avec et sans dépliage, et quelle sont les valeurs des paramètres  $a_N$  et  $\sigma_N$ . C'est le sujet abordé dans [63], où l'on voit apparaître également la nondépendance de  $N$  des  $\sigma_N$ . L'analyse suppose que la distribution des écarts renormalisés est donnée par la forme de Wigner et Dyson de l'Eq.(2.5) et obtient la forme lognormale en faisant une convolution de cette statistique avec les relations de récurrence venant de l'inflation des pavages. Pour voir quelle est la statistique des écarts dépliés, il faut d'abord se poser la question de la définition de l'écart moyen à un endroit donné du spectre. Cette question revient à se demander quelle est la valeur de la densité d'états moyenne à une énergie donnée (l'inverse de celle-ci permettrait alors de définir l'écart moyen). Cette question n'a pas de réponse unique : dans le quasicristal parfait, il y

a des fluctuations self-similaires, qui font que la valeur moyenne de  $\rho(E)$  dépend de la largeur de l'intervalle que l'on choisit pour évaluer la moyenne (comme nous avons déjà remarqué dans le paragraphe précédant).

Passons à la question en un peu plus de détail dans la section suivante.

### Statistique après dépliage du spectre

Pour corriger les effets dûs aux variations de la densité d'états, on peut renormaliser les écarts par rapport à la valeur moyenne locale de celle-ci. Dans la thèse de F. Piéchon [2], on trouve des dépliages du type  $\tilde{s}_i = s_i / \langle s_i \rangle$  où la valeur moyenne locale  $\langle s_i \rangle$  est définie soit au voisinage immédiat du site  $i$ ,  $\langle s_i \rangle = (s_{i+1} + s_{i-1})/2$ , soit dans un intervalle de largeur de plus en plus grande en fonction de  $n$ ,  $\langle s_i \rangle = (s^{(2n)})/2n = (E_{i+n} - E_{i-n})/2n$ . Pour  $n$  petit, le dépliage est fort et les fluctuations des écarts seront fortement réduites. Si au contraire on prend une valeur grand de  $n$  on va moyenniser sur un grand nombre d'états et  $\langle s_i \rangle$  tendra vers une constante indépendante de  $i$  – ce qui nous ramène au cas de la distribution sans dépliage discuté dans la section précédente.

En fonction de l'importance du dépliage pratiqué sur les écarts, on trouve que la forme de la distribution passe de la forme GOE de Wigner-Dyson, à la forme log-normale comme le montre la figure 2.5 [2].

Zhong et al [64], font le dépliage déjà décrit dans la section 2.2.1, en partant de la courbe de la densité d'états intégrée. Celle-ci est lissée, utilisant un procédé local – Spline Fit – pour éliminer les petites irrégularités en-dessous d'une certaine résolution. Comme précédemment pour le calcul dans [2], on choisit le degré de dépliage lors de l'opération de lissage à travers l'ordre des polynômes employés dans le procédure de fit. Les conclusions de Zhong et al, ainsi que celle des travaux plus récents sur le pavage octogonal par Grimm et co-auteurs sont que les écarts ainsi dépliés sont distribués selon la statistique de Wigner-Dyson.

FIG. 2.5 – La statistique des écarts dépliés : dépliage maximum, minimum et intermédiaire (d'après Piéchon [2])

En [63], nous avons renormalisé les écarts de chaque spectre par ceux du spectre de l'approximant précédent. De cette façon, nous avons montré que la convolution de la statistique de Wigner-Dyson et la symétrie d'inflation mènent à la distribution log-normale. La largeur de la distribution est calculée aussi et l'on voit que celle-ci ne dépend que du nombre irrationnel sous-jacent à la transformation ( $\lambda = 1 + \sqrt{2}$  pour le pavage octogonal). En particulier, elle ne dépend pas de la taille du système, en accord avec nos observations numériques.

## La rigidité spectrale

On voit un comportement logarithmique qui correspond à un régime ergodique aux temps très grands (régime TMA) comme nous avons expliqué dans la section 2.2.2. La rigidité spectrale pour les grandes énergies se trouve être décrite par une loi de puissance :

$$\Sigma^2(E) \propto E^\gamma \quad (2.16)$$

où  $\gamma \approx 1.6$ . On en déduit une valeur de l'exposant de la diffusion quantique  $\mu$  de 0.8. Benza et Sire ont calculé des exposants [39] pour la diffusion de paquets d'ondes centrés sur différents sites du pavage octogonal, pour des hamiltoniens du type de l'Eq.(2.3). Leur calculs montrent que l'exposant de diffusion dépend du site d'origine du paquet d'ondes, allant de la valeur 0.75 à 0.84 selon la coordonnance du site initial avec une valeur moyenne de 0.78. L'analyse statistique donne une valeur proche de leurs résultats.

### 2.3.2 Analyse spectrale du pavage randomisé

FIG. 2.6 – Exemple d'un approximant randomisé

La Fig.2.6 montre un membre de la famille de pavages randomisés obtenus en désordonnant un approximant du pavage octogonal. Pour l'obtenir on effectue plusieurs boucles de l'opération de permutation locale de tuiles (“phasons”) aux sites F. On sélectionne des sites au hasard pour cette opération, modifiant le pavage dans des endroits aléatoirement choisis lors de chaque boucle. On voit qu'il apparait de nouveaux environnements locaux. On perd certaines symétries du pavage parfait, notamment la symétrie d'inflation. Le théorème de Conway, qui assure que l'on peut retrouver des copies d'une structure de rayon  $R$  toutes les  $2R$  environ, n'est pas non plus valable pour le pavage randomisé. Par contre, le diagramme de diffraction d'un tel pavage est assez similaire, ayant des pics d'intensité aux mêmes positions que celui du pavage octogonal parfait. La différence entre “parfait” et “randomisé” devient plus petite en dimension 3, où les deux possèdent des pics de Bragg, avec une contribution diffuse en plus pour le cas randomisé.

Puisque l'on a perdu la relation hiérarchique entre le pavage et son inflaté la densité d'états du pavage randomisé n'est plus aussi singulière que celle des pavages parfaits, et comporte à la place des grandes fluctuations du pavage parfait, des petites fluctuations autour d'une valeur moyenne bien définie comme pour des systèmes périodiques désordonnés (voir figure 2.7). La statistique des écarts n'est plus log-normale, mais plutôt celle donnée par la théorie des matrices aléatoires [62], avec

FIG. 2.7 – densité d'états du pavage randomisé en fonction de l'énergie  $E$  (reproduite de [2])

une transition entre la courbe orthogonale  $P_{WD}^{\sigma=1}$  pour  $\vec{k} = (0, 0)$  (condition limite I), et la courbe unitaire  $P_{WD}^{\sigma=2}$  pour  $\vec{k} = (\pi/2, 0)$  (condition limite II). Notons qu'on ne s'attendrait pas à observer une telle transition dans le cas du pavage parfait parce que la symétrie de réflexion rétablit la symétrie par renversement du temps que l'on a brisée en choisissant la condition aux bords (II).

FIG. 2.8 –  $\Sigma^2(E)$  du pavage randomisé en fonction de l'énergie  $E$  (reproduite de [2])

La rigidité spectrale [62] suit une loi de puissance comme celle du pavage parfait. La courbe de  $\Sigma^2(E)$  est montrée sur la Fig.2.8. On voit un comportement logarithmique qui correspond à un régime ergodique aux temps très grands (régime TMA) comme nous avons expliqué dans la section 2.2.2. L'exposant est un peu plus grand que celui du pavage parfait,  $\mu \approx 0.85$ , indiquant que les particules diffusent plus vite dans la structure désordonnée. Ce résultat est supérieur à la valeur de Benza et Sire [39] qui trouvent  $\mu \approx 0.81$ . L'exposant  $\mu$  étant plus grand pour le cas désordonné, on en conclut que dans le cas du quasicristal le désordre géométrique tend plutôt à délocaliser les électrons, contrairement à ce qui se passe dans les cristaux.

### 2.3.3 Discussion

Nous avons présenté quelques propriétés spectrales du pavage octogonal parfait et désordonné. Ils montrent que le pavage octogonal (parfait ou désordonné) est bien décrit par la TMA et appartient à la classe d'universalité de GOE. Un renseignement intéressant que nous donne  $P(s)$  vient de son comportement aux  $s$  petit. On trouve une répulsion entre niveaux, signe des états électroniques étendues [39]. C'est également la conclusion que l'on peut tirer de la rigidité spectrale de ces pavages, qui montre une diffusion anormale dans ces systèmes.

Ces pavages ont des spectres beaucoup plus riches en structure que ceux des systèmes désordonnés habituels, et l'analyse spectrale n'est qu'une des études qui peuvent être faites. Nous n'avons pas discuté, par exemple, les études de la mesure spectrale, et sa description multifractale. Nous n'avons pas abordé les fonctions d'onde, ni les études de transport. Les fonctions d'onde et la dynamique des paquets d'onde ont été le sujet d'études récentes de la diffusion quantique [40, 41] sur divers pavages quasipériodiques pour lesquels on trouve une variété de comportements de

diffusion anormale. Les fonctions d'onde ont des amplitudes multifractales. La description théorique des propriétés électroniques des pavages reste clairement un problème très difficile.

Venant à la question des effets dûs au désordre, l'un des effets principaux est l'atténuation des singularités de la densité d'états. La densité d'états, multifractale dans le cas parfait, est simplement rugueuse comme pour les cristaux désordonnés. Des effets similaires ont été constatés [62] pour des modèles désordonnés par l'addition de termes de potentiel local aléatoire dans l'hamiltonien.

En conséquence de ce fait, la statistique des écarts entre niveaux n'est plus log-normale (pour les écarts bruts) comme pour le système parfait, mais décrite par les lois de la TMA (avec ou sans dépliage des niveaux si l'intervalle d'énergie n'est pas trop grand).

Il a été montré [62] que l'on peut induire un crossover entre les distributions GOE et GUE dans les pavages randomisés en appliquant un champ magnétique extérieur – un crossover qui ne peut pas être induit dans les approximants parfaits à cause de leur symétrie miroir.

Enfin, la diffusion est plus rapide dans les pavages désordonnés que dans le pavage parfait, même si tous les deux sont des systèmes superdiffusifs (l'exposant moyen  $\mu$  étant plus grand que celui de la diffusion ordinaire). Ces résultats vont dans le sens de certaines expériences sur la conductivité électronique des quasicristaux. Des études sur le composé icosaédrique AlCuFe montrent en effet que la conductivité baisse lorsque les échantillons sont recuits pour améliorer leur qualité structurale (que l'on vérifie à l'aide de la diffraction des rayons X). Il y a cependant un résultat contradictoire trouvé par Piéchon [2] pour la distribution des courbures des niveaux, sous l'effet d'une variation paramétrique de l'hamiltonien. Cette distribution a été calculée et sa forme est connue pour les systèmes désordonnés. On s'attend à ce que la distribution soit plus large pour les systèmes moins localisés. Or, on trouve que le pavage désordonné possède une distribution de courbures plus étroite. Des travaux plus étendus sur des systèmes plus grands permettront sans doute de clarifier la situation.

## 2.4 Les pavages de Rauzy généralisés

Dans cette section nous appliquons les méthodes statistiques pour montrer que les systèmes de codimension une que sont les pavages de Rauzy généralisés appartiennent, en ce qui concerne leurs propriétés électroniques, à une catégorie distincte intermédiaire entre le pavage octogonal et un cristal.

FIG. 2.9 – Pavage de Rauzy généralisé à deux dimensions : PRG(2)

### 2.4.1 Définition des pavages

Le pavage dessiné dans la figure 2.9 est un exemple d'un pavage pour lequel la dimension de l'espace perpendiculaire est plus petite que celle de l'espace parallèle. La codimension est la dimension de l'espace "perpendiculaire", dans la méthode de projection (voir annexe) où l'on projette les points d'un réseau de dimension  $D$  sur l'espace physique de dimension  $d$ . Pour le pavage octogonal nous avons une codimension  $D-d$  égale à deux ( $D=4$ ,  $d=2$ ). Un problème principal de ce pavage est qu'il n'existe pas une base simple pour exprimer des quantités telle la matrice de connectivité des sites. Ce n'est plus un problème dans le cas des pavages de codimension 1 décrits par Sire et Mosseri [65], et Vidal et Mosseri [66] où l'on dispose d'une numérotation simple des sites. La numérotation est, de plus, telle que la matrice de connectivité (ou l'hamiltonien, en d'autres termes) devient très simple à écrire, ayant une forme de matrice de Toeplitz. Cela représente évidemment une grande simplification. Ces pavages de Rauzy généralisés peuvent être définis en toutes les dimensions  $d$ . Le pavage de Rauzy généralisé de dimension  $d$  PRG( $d$ ) est obtenu en projetant les points du réseau cubique de dimension  $d+1$  sur l'espace  $d$ -dimensionnel physique orienté à un angle irrationnel donné par la séquence de Fibonacci généralisée.

Nous avons étudié un pavage bidimensionnel de ce type, et nous allons voir qu'avoir une codimension basse rend les propriétés physiques moins singulières en comparaison avec le pavage octogonal. (On note au passage que la chaîne de Fibonacci est un membre de cette famille de pavages, mais ayant sa dimension physique égale à sa codimension, ce qui lui confère ses propriétés de quasipériodicité forte).

Le pavage de la Fig.2.9 est donc la projection sur un plan irrationnel du réseau cubique, et comporte des losanges de deux sortes. On peut déjà voir que cette structure est plus proche d'une structure cristalline que le pavage octogonal (ou le pavage de Penrose) puisqu'on peut y déceler des rangées, interrompues de façon quasipériodique par des défauts. Comme pour le pavage octogonal, on peut obtenir des systèmes de taille finie, et ce sont ces approximants que nous avons diagonalisés. Les trois tailles utilisées dans les calculs comportent 10609, 19513 et 35738 sites.

Une étude des propriétés spectrales a été présentée dans [67]. La densité d'états du PRG(2) est qualitativement différente de celle du pavage octogonal comme l'on peut le constater sur la Fig.2.10. En effet, la densité d'états du pavage octogonal comporte des fluctuations entre pics et vallées plus violentes que celle du pavage de Rauzy. Cette dernière est, de plus, assez réminiscente de la densité d'états du réseau carré.

FIG. 2.10 – Densité d'états du PRG(2) (gauche) et du pavage octogonal (droite)



## 2.4.2 La statistique des écarts et la rigidité spectrale

Les résultats pour la statistique d'écarts entre niveaux  $P(s)$  sont montrés dans la Fig.2.11. La courbe suit assez bien la forme analytique de la loi "semi-Poisson"

$$P_{sP}(s) = 4s \exp^{-2s} \quad (2.17)$$

FIG. 2.11 –  $P(s)$  du PRG(2) pour trois tailles différentes plottée sur axes linéaires (gauche) et log (droite)

On peut montrer pour le cas semi-Poisson [53] que la rigidité spectrale est modifiée de la forme Poissonienne  $\Sigma^2(E) = E$  à

$$\Sigma_{sP}^2(E) = \frac{1}{2} \left[ E + \frac{1}{4} (1 - \exp -4E) \right] \quad (2.18)$$

Les données numériques pour le pavage le plus grand (35738 points) ainsi que la forme analytique sont représentées dans la Fig.2.12(gauche). Nous y avons tracé les points obtenus sans dépliage (les triangles) ainsi que des points obtenus après un lissage de la densité d'états intégrée par spline fit pour deux dépliages (moyen et fort). L'opération de dépliage donne un plateau de la rigidité spectrale en fonction de l'énergie, à partir d'une énergie caractéristique (de l'ordre de  $\Delta$ ). Le dépliage a clairement pour effet l'élimination de fluctuations, donnant lieu ainsi à un plateau. La courbe sans dépliage, comme celle trouvée pour le pavage octogonal, possède deux régimes correspondant à des dynamiques différentes. L'accord, du moins pour les énergies petites, est assez bon. A droite, la figure montre les courbes de  $\Sigma^2$  nondéplié pour trois tailles différentes en log-log, où l'on voit la transition entre un domaine linéaire aux basses énergies, et un comportement qui semble approcher une loi quadratique aux hautes énergies. Selon la correspondance que nous avons déjà vue précédemment, dans le cas du pavage octogonal, une loi quadratique correspond à une diffusion avec un exposant  $\mu \approx 1$ . Ce dernier correspond à une dynamique ballistique des électrons. Une étude directe de la diffusion quantique sur ce pavage de Triozon et al [68], trouve un exposant effectif de  $\mu \approx 0.94$ . D'après les arguments présentés dans la section 2.2.2 les résultats pour la rigidité spectrale indiquent qu'il y a un crossover de cette diffusion ballistique aux temps courts vers le comportement "quasi-intégrable" aux temps longs. L'énergie de ce crossover ne semble pas dépendre de la taille du pavage, ce qui pourrait indiquer l'existence d'une échelle de longueur intrinsèque dans ces pavages.

Les résultats de cette section montrent que le pavage de Rauzy n'est ni un système intégrable comme le réseau carré ni un système chaotique comme le pavage octogonal. Il semble proche des systèmes dits presqu'intégrables [53] pour lesquels on trouve

FIG. 2.12 – Gauche :  $\Sigma^2(E)$  du PRG(2) pour une taille fixe pour trois degrés de dépliage différents (voir texte). Droite :  $\Sigma^2(E)$  pour des niveaux nondépliés pour trois tailles différentes.

la statistique de semi-Poisson. On peut considérer que ces pavages de codimension réduite sont intermédiaires entre une structure périodique et une structure fortement quasipériodique.

## 2.5 Discussion

Dans ce chapitre, nous avons résumé les données numériques décrivant la statistique des niveaux pour des milieux quasipériodiques. Les pavages considérés correspondent aux structures dotées d’une quasipériodicité plus ou moins forte. La plus forte quasipériodicité est celle du pavage octogonal. En désordonnant ce pavage, on diminue les fluctuations associées à sa quasipériodicité, jusqu’à ce que l’on retrouve un comportement chaotique “standard”. Enfin, en diminuant la dimension de l’espace perpendiculaire, on diminue la modulation quasipériodique, se dirigeant cette fois vers le cas intégrable d’une structure cristalline.

Tout d’abord, pour le pavage octogonal, un quasicristal “classique”, nous avons vu que les grandes fluctuations dans le spectre donnent lieu à une forme log-normale pour la statistique des écarts bruts entre niveaux. Pour ce système nous avons aussi vu qu’après une renormalisation préalable des écarts, la statistique des écarts est bien celle trouvée par Wigner et Dyson. Ceci montre que le pavage quasipériodique fait partie de la famille de systèmes nonintégrables, et partage des caractéristiques en commun avec les systèmes désordonnés. Cependant, contrairement aux systèmes désordonnés, l’opération de cette renormalisation ou dépliage du spectre reste non triviale, et cette différence a des conséquences physiques telles que la dynamique multifractale et les propriétés de transport singulières. La description détaillée des propriétés physiques de ces structures parfaites reste à trouver.

Ensuite, nous avons examiné le cas d’un pavage moins singulier puisqu’ayant une codimension plus petite que sa dimension – le pavage de Rauzy généralisé. Ce dernier système est proche des systèmes intégrables, du point de vue de sa statistique  $P(s)$ , la rigidité spectrale, et ressemble aux billards dits “presqu’intégrables”. Il y a en effet une diffusion très rapide, presque ballistique, dans ces pavages, comme l’ont confirmé des études de la dynamique des paquets d’onde.

Un mot sur des systèmes de grande codimension récemment discutés dans la littérature [69]. D’après ce que nous avons vu ici, on peut s’attendre à un grand degré de désordre quasipériodique au fur et à mesure que l’on augmente la codimension D-d. La distribution des écarts entre niveaux ainsi que la rigidité spectrale devraient tendre vers une limite Poissonienne, avec un exposant moyen de diffusion diminuant

en fonction de  $D-d$ , jusqu'à ce que les particules soient localisées.

Les pavages ont des spectres beaucoup plus riches en structure que ceux des systèmes désordonnés habituels. L'analyse spectrale n'est qu'une technique parmi les types d'études qui peuvent être faites. Nous n'avons pas discuté ici les études de la mesure spectrale, et sa description multifractale. Nous n'avons pas abordé les fonctions d'onde, ni les études de transport. Des études récentes de la diffusion quantique [40, 41] sur divers pavages quasipériodiques trouvent des fonctions d'onde d'amplitude multifractale, et une variété de comportements de diffusion anormale. La description théorique des propriétés électroniques des pavages reste clairement un problème très difficile.

# Chapitre 3

## Projets et Perspectives

### 3.1 Propriétés électroniques par groupe de renormalisation

Le calcul du premier chapitre repose sur des propriétés géométriques du pavage qui entrent également dans le problème des liaisons fortes. Il est facile avec cette méthode, par exemple, d'obtenir la largeur de la bande du pavage octogonal – un calcul rapide trouve une énergie de l'état fondamental,  $-E_{max} = -4.228$ , comparée au résultat numérique de  $-4.218$  (méthode de récursion). On doit pouvoir assez facilement faire le calcul de la forme de la fonction d'onde correspondante.

### 3.2 L'extension des calculs à trois dimensions

Une des directions de recherche les plus intéressantes dans l'étude des pavages est celle des propriétés électroniques et magnétiques à trois dimensions. Nous avons expliqué dans cette thèse les grandes différences qualitatives entre la physique des systèmes uni-dimensionnels et ceux à deux dimensions. Un exemple, pour les modèles de spins localisés concerne l'existence d'un état ordonné à température nulle : impossible à une mais possible à deux dimensions. Un autre exemple concerne l'existence d'un état métallique : difficile pour  $D = 1$  où les états sont pour la plupart localisés, mais possible à  $D = 2$  (comme vu dans le cas des pavages aléatoires pour des hamiltoniens suffisamment proches du cas "pur"). En augmentant la dimension de l'espace de 2 à 3, on peut s'attendre à voir apparaître des propriétés nouvelles. C'est ce que l'on a déjà observé dans la physique des cristaux, où souvent, 2 est la dimension critique inférieure pour une variété de phénomènes. Au-delà de deux dimensions, on peut étudier par exemple, des points critiques et des transitions de phase magnétiques

ou électroniques.

Le pavage tri-dimensionnel le plus simple à étudier est le pavage icosaédrique, proche de la structure de la plupart des composés réels connus. Il serait intéressant de faire une analyse statistique des niveaux d'énergie, dans un premier temps. Une telle analyse permettrait de situer ces pavages dans le paysage complexe des systèmes non-intégrables. A partir des propriétés spectrales, nous pourrions également avoir des renseignements sur la conductance, une quantité qui a été beaucoup étudiée dans ces systèmes. Des modèles magnétiques seront intéressants à étudier également.

### 3.3 Propriétés thermiques

Nous avons mentionné la possibilité d'étendre nos calculs de renormalisation aux autres modèles discrets sur les pavages. L'étude des vibrations sur les pavages quasipériodiques est un sujet intéressant à aborder dans le proche avenir. Des travaux numériques des modes vibrationnels pour les structures quasipériodiques telles que le pavage octogonal [70] montrent que la densité d'états des modes acoustiques est linéaire aux basses fréquences et aux plus hautes fréquences est un spectre singulier comme le spectre électronique, avec des gaps et pseudogaps.

Les conséquences de ces singularités sur les propriétés de transport thermiques constituent une question intéressante à étudier. La chaleur spécifique et la conductivité thermique sont deux quantités physiques que l'on peut étudier expérimentalement dans des échantillons de très bonne qualité structurale (voir par exemple [71, 72] pour des études sur le ZnMgY et AlPdMn, deux composés icosaédriques). La dépendance en température de la vitesse du son à basse température peut également donner des informations sur les excitations à basse énergie dans ces systèmes [73, 74].

Pour discuter ces problèmes, il y a des approches phénoménologiques pour décrire les excitations de type phonon ou phason. C'est le cas par exemple du modèle de sauts hiérarchiques de Janot [75]. Il serait utile toutefois de disposer d'un traitement analytique des modèles sur des pavages quasipériodiques analogue au groupe de renormalisation utilisé pour les spins du chapitre 1. Un projet pour des calculs futurs consisterait donc à développer un modèle simple permettant de décrire les comportements thermiques observés.

# Annexe A

## Introduction à la méthode de coupe et projection

La méthode de coupe et projection permet de décrire de façon élégante les propriétés de la structure quasipériodique. Cette méthode a été exposé en détail (voir la revue par Duneau [27]) pour les pavages les plus étudiés à une, deux et trois dimensions. Nous présenterons ici un bref aperçu de cette technique et de la terminologie employée.

### A.1 Exemple unidimensionnel

Le cas unidimensionnel, celui par exemple de la chaîne de Fibonacci est le plus simple à présenter, la généralisation aux plus grandes dimensions ne posant pas de difficultés conceptuelles. Le pavage quasipériodique est ici composé de deux "pavés" – un long (L) et un court (C). La séquence de pavés est donnée par la suite de Fibonacci, une suite parfaitement déterministe, mais non-périodique. Cette suite correspond à une projection selon une direction irrationnelle des arêtes d'un réseau carré. L'angle de l'espace "physique" par rapport aux axes du réseau bidimensionnel est donné par la relation  $\tan \alpha = \tau$  où  $\tau$  est le nombre d'or ( $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2$ ). Les arêtes qui sont projetés sont celles contenues dans un volume cylindrique, défini par la condition que la projection dans l'espace "perpendiculaire"  $E_{\perp}$ , tombe dans la fenêtre d'acceptance,  $W$  (voir figure). La projection de chaque arête est soit longue (A) ou courte (B) – dans l'exemple donné dans la figure nous aurons ainsi une séquence ...BAABAABABAA...

FIG. A.1 – Obtention d’une partie de la chaîne de Fibonacci par la méthode de projection

## A.2 Deux dimensions. Pavage octogonal

L’extension à deux dimensions est obtenue dans le cas du pavage octogonal en projetant les points du réseau  $Z_4$  sur le plan physique  $E_{\parallel}$ , dont l’orientation est telle que les quatre vecteurs du réseau engendrent des carrés et des rhombs de 45deg. A une dimension, la fenêtre  $W$  est la projection sur  $E_{\perp}$  de la maille élémentaire de  $Z_2$ . De façon analogue, à deux dimensions, la fenêtre d’acceptance  $W$ , est la projection du cube de quatre dimensions sur  $E_{\perp}$  et elle a une forme octogonale (voir figure).

FIG. A.2 – Vue de la fenêtre dans l’espace perpendiculaire

Les sommets du pavage dans l’espace parallèle peuvent ainsi être mis en correspondance bi-univoque avec un point dans la fenêtre  $W$ . On peut distinguer sept domaines différents à l’intérieur de l’octogone  $W$  (figure). Chacun de ces domaines dans l’espace perpendiculaire regroupe le sous-ensemble de sommets d’une valeur de coordonnée  $z$  donnée dans l’espace physique. (Noter que la symétrie d’ordre huit est respectée dans  $E_{\perp}$  ainsi que  $E_{\parallel}$ ).

Pour calculer les fréquences de chacun des environnements locaux A,B,...,F définis dans le chapitre 1, il suffit de calculer l’aire de son domaine d’acceptance et de diviser par l’aire totale de l’octogone  $2\lambda^2$ . On trouve ainsi  $f_A = \lambda^{-4}$ ;  $f_B = \lambda^{-5}$ ;  $f_C = 2\lambda^{-4}$ ;  $f_{D_1} = \lambda^{-3} = f_{D_2}$ ;  $f_E = 2\lambda^{-2}$ ;  $f_F = \lambda^{-1}$ .

Enfin, pour voir l’effet des inflations on peut s’imaginer que toutes les coordonnées dans l’espace perpendiculaire sont amplifiées par un facteur  $\lambda$ , tout en gardant les mêmes domaines de sélection A,B, etc. Les points les plus à l’extérieur – les  $D_2$ ,E et F ne restent plus dans la fenêtre après inflation. Les points  $D_1$  restent, mais sont maintenant devenus des F. Les transformations de sites sont ainsi faciles à déduire :

$$\begin{array}{lcl} A & \rightarrow & A \text{ ou } B \text{ ou } C \text{ ou } D_1 \\ B & \rightarrow & D_2 \\ C & \rightarrow & E \\ D_1 & \rightarrow & F \end{array}$$

On voit que le domaine central A recouvre l’ancien domaine A au milieu de la fenêtre – les points ici restent inchangés après inflation. D’autres points changeront et deviendront, selon la distance à l’origine, des sites B,C ou  $D_1$ . Les sites A les plus proches du centre de ce diagramme sont les plus tardifs à changer de famille. Ceux-ci

auront une symétrie huit jusqu'aux échelles de distance très grandes, et il n'y a qu'un seul point sur le pavage octogonal qui peut posséder une symétrie huit parfaitement respectée à toutes les distances, c'est le point qui correspond au centre de la fenêtre  $W$ .

## A.3 Les approximants et conditions aux bords

### A.3.1 Les approximants périodiques d'un quasicristal

La méthode de projection permet d'obtenir un pavage quasipériodique en projetant certains sites d'un réseau de plus haute dimension  $D$  sur un plan irrationnel de dimension  $d$ . Quand on choisit une orientation rationnelle proche, le pavage ainsi obtenu sera périodique, avec une période d'autant plus grande que l'orientation est proche de la direction irrationnelle. L'intérêt de ces approximants est dans le fait que l'on peut travailler avec des systèmes de taille finie en évitant des effets spurieux aux bords – plus exactement, en les atténuant par l'application des conditions aux limites périodiques.

Dans le cas de la chaîne de Fibonacci, le “plan” irrationnel correspond à la pente  $\tan \theta = \tau$ , qui possède une série d'approximants rationnels,  $\{\tau_1, \dots\} = \{1, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{3}{5}, \dots, \frac{F_k}{F_{k+1}} \dots\}$ , où  $F_k$  est le  $k$ ième terme dans la séquence de Fibonacci,

$$\begin{aligned} F_{k+1} &= F_k + F_{k-1} \\ F_0 &= F_1 = 1 \end{aligned} \tag{A.1}$$

On peut obtenir des approximants de la chaîne de Fibonacci en choisissant une orientation rationnelle, déterminée par les approximants rationnels du nombre d'or. Lorsque la bande de sélection est orientée avec un angle  $\theta_k$  tel que  $\tan \theta_k = \gamma_k = \frac{F_k}{F_{k+1}}$ , on obtient une séquence de points qui se répète avec une période de  $F_k + F_{k+1} = F_{k+2}$ .

A deux dimensions, l'approche utilisée dans le cas du pavage octogonal pour obtenir des approximants périodiques est un peu différente. Duneau et al [55] ont montré que pour des structures possédant une symétrie sous une transformation d'inflation on peut obtenir des approximants en faisant un autre choix de fenêtre et des points sélectionnés pour projection dans l'espace physique. Dans leur approche la fenêtre, de forme proche d'une octogone comporte des cotés de longueurs rationnelles, dépendant des approximants du nombre d'argent :  $\lambda_k = O_{k+1}/O_k$  où

$$\begin{aligned} O_{k+1} &= 2O_k + O_{k-1} \\ O_1 &= 1; \quad O_2 = 2 \end{aligned} \tag{A.2}$$

Le nombre de points sélectionnés  $N_k$  augmente avec  $k$  en conséquence. Après projection, on obtient une maille carrée comportant  $N_k$  points.

La table donne les valeurs de  $N_k$  des premiers approximants carrés.



k	2	3	4	5
$N_k$	239	1393	8119	47321

Table A.1. Nombre de sites dans chaque approximant carré en fonction de k

### A.3.2 Structure et symétries des approximants carrés

Les approximants ont les mêmes environnements locaux A,B,... que le pavage infini (voir chapitre 1), et au fur et à mesure que  $k$  augmente, ont des régions de taille de plus en plus grandes en commun avec le pavage infini. Les défauts apparaissent aux bords, et auront une importance relative en termes de nombre de sites concernés qui diminue. Donc, du point de vue numérique, on peut espérer obtenir les propriétés du pavage infini en effectuant des analyses de scaling. Les fréquences d'apparition des environnements sont de plus en plus proches de celles attendues pour le pavage infini quand on augmente la taille des approximants.

A cause de leur règle de construction, il se trouve que les approximants carrés possèdent en outre une structure symétrique par rapport à la diagonale du carré. Cette symétrie a notamment pour conséquence la possibilité de former des états électroniques de parité positive/négative sous l'opération de réflexion. En conséquence, il y aura l'apparition de niveaux d'énergie doublement dégénérés. Cette symétrie n'existe pas dans le pavage infini, et lors d'un calcul de la distribution d'écart entre niveaux, par exemple, on doit faire le calcul dans chacun des sous espaces de parité. Si on négligeait de le faire, la présence des écarts nuls (ou petits, comme nous allons expliquer ci-dessous) on risquerait d'avoir une attraction des niveaux au lieu de la répulsion que nous avons trouvée.

Les approximants transforment sous l'inflation en l'approximant suivant comme on le montre dans la figure Fig.A.3. Le plus grand approximant de 239 sites est transformé en l'approximant de 41 sites (indiqué par des traits plus gras).

FIG. A.3 – Superposition de deux approximants montrant la relation d'inflation entre les deux

Une autre symétrie du pavage infini est que celui-ci possède deux sous-réseaux, c'est-à-dire qu'il est bipartite. Les approximants aussi ont la propriété que chaque site est relié à des voisins appartenant à l'autre sous-réseau, et donc peuvent être décomposés en deux sous-réseaux. Cette symétrie se traduit par une symétrie du spectre de l'hamiltonien sous  $E \rightarrow -E$ . Cependant il y a un nombre impair de changements de réseau en traversant l'approximant, avec pour conséquence qu'un site du sous-réseau A devient de type B lorsqu'on continue sur la maille suivante. Une fonction d'onde de type alternante sera frustrée, quoique de moins en moins avec l'augmentation du nombre de sites. Le résultat de cette frustration est que, pour une valeur de  $\vec{k}$  donnée, les valeurs propres de l'hamiltonien ne sont plus symétriques

autour de  $E = 0$  pour les approximants. De plus, la frustration a pour effet aussi de briser la dégénérescence exacte des énergies. Les valeurs propres alors apparaîtront en paires, avec des petits écarts entre les deux membres de chaque paire qui diminuent avec la taille du système. Il est clair que s'il l'on considère l'ensemble des niveaux ainsi calculés on trouvera beaucoup de petits écarts et une distribution des écarts faussée à petit  $s$ . Ce problème est résolu en séparant les niveaux selon leur parité, et considérant l'écart entre niveau dans chacun des sous ensembles. Nous avons aussi essayé d'appliquer des conditions aux bords non-frustrantes, comme nous allons expliquer maintenant. Les résultats pour  $P(s)$  pour les deux types de conditions limites sont, cependant, les mêmes.

### Conditions aux limites pour restaurer la propriété bipartite

Dans les calculs des modèles avec interactions nous avons utilisé des systèmes  $2 \times 2$  – des approximants groupés par quatre, de sorte que le pavage carré résultant n'est plus frustré et possède de nouveau la symétrie bipartite mentionnée ci-dessus. En conséquence, la dégénérescence double des niveaux est retrouvée, et les énergies apparaissent en paires  $(E, -E)$ , correspondant aux états pair et impair sous réflexion.

### Etats localisés de symétrie huit

Une dernière remarque : la dégénérescence du niveau  $E = 0$  est différente de celle des autres, étant beaucoup plus grande. Cette dégénérescence est macroscopique, puisque due aux états localisés autour des sites A. Pour les approximants il est facile de calculer le nombre de ces niveaux  $E = 0$ . Ceci permet de compter le nombre de valeurs propres et de vérifier que l'on a bel et bien calculé *tous* les niveaux puisque le programme de Lanczos ne donne que les valeurs propres de  $\mathcal{H}$  nondégénérées.

# Bibliographie

- [1] T. J. Sato, H. Takakura, A. P. Tsai, K. O. K. Shibata, and K. H. Andersen, Phys. Rev. B **61**, 476 (2000).
- [2] F. Piéchon, *Propriétés électroniques des quasicristaux*, PhD thesis, Université Paris-Sud, 1995.
- [3] E. Belin-Ferre, C. Berger, M. Quiquandon, and A. Sadoc, editors, *Quasicrystals. Current Topics*.
- [4] B. Charrier, B. Ouladdiaf, and D. Schmitt, Phys. Rev. Lett. **78**, 4637 (1997).
- [5] R. Penrose, Math. Intelligencer **2**, 32 (1979).
- [6] M. Gardner, Scientific American **236**(1), 110 (1977).
- [7] J. M. Luck and Th. M. Nieuwenhuizen, Europhys. Lett. **4**, 257 (1986).
- [8] K. Hida, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 3177 (1999).
- [9] J. Hermisson, U. Grimm, and M. Baake, J. Phys. A **30**, 7315 (1997).
- [10] J. Hermisson, J. Phys. A **33**, 57 (2000).
- [11] M. Kohmoto, L. P. Kadanoff, and C. Tang, Phys. Rev. Lett. **50**, 1870 (1983).
- [12] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H. J. Schnellhuber, and E. Siggia, Phys. Rev. Lett. **50**, 1873 (1983).
- [13] M. Kohmoto, B. Sutherland, and C. Tang, Phys. Rev. B **35**, 1020 (1987).
- [14] *Fundamental problems in Statistical Mechanics VIII*, Elsevier, 1994.
- [15] J. Vidal, D. Mouhanna, and T. Giamarchi, Phys. Rev. Lett. **83**, 3908 (1999).
- [16] J. Vidal, D. Mouhanna, and T. Giamarchi, Phys. Rev. B **65**, 014201 (2001).
- [17] K. Hida, Phys. Rev. Lett. **86**, 1331 (2001).

- [18] J. E. S. Socolar, Phys. Rev. B **39**, 10519 (1989).
- [19] S. Wessel, A. Jagannathan, and S. Haas, Phys. Rev. Lett. **90**, 177205 (2002).
- [20] C. Godreche, J. M. Luck, and H. Orland, J. Stat. Phys. **45**, 777 (1986).
- [21] C. Sire and J. Bellissard, Europhys. Lett. **11**, 439 (1990).
- [22] J.X.Zhong and R. Mosseri, J. Phys. I (France) **4**, 1513 (1994).
- [23] P. Kalugin, A. Kitaev, and L. Levitov, JETP Lett. **41**, 145 (1985).
- [24] V. Elser, Phys. Rev. B **32**, 4892 (1985).
- [25] M. Duneau and A. Katz, Phys. Rev. Lett. **54**, 2688 (1985).
- [26] M. Baake and D. Joseph, Phys. Rev. B **42**, 8091 (1990).
- [27] M. Duneau and D. Gratias, Lecture Notes, Marrakesh School (2002).
- [28] G. Sierra, editor, *Strongly Correlated Magnetic and Superconducting Systems*, volume 478 of *Springer Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, New York, 1996.
- [29] G. Sierra and M. Martin-Delgado, Phys. Lett. **391B**, 381 (1997).
- [30] A. Jagannathan, Phys. Rev. Lett. **92**, 047202 (2004).
- [31] E. Y. Vedmedenko, U. Grimm, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **93**, 076407 (2004).
- [32] R. Lifshitz, Mater.Sci.Eng.A **294**, 508 (2000).
- [33] A. Jagannathan and H. J. Schulz, Phys. Rev. B **55**, 8045 (1997).
- [34] J.Souletie, J. Vannimenus, and R. Stora, editors, *la Chance et la matière*, Les Houches, North-Holland, 1986.
- [35] F. Hippert and D. Gratias, editors, *Lectures on Quasicrystals*, Les Editions de la Physique, Les Ulis, 1994.
- [36] F.Piechon, Phys. Rev. Lett. **76**, 4372 (1996).
- [37] F.Piechon, M. Benakli, and A. Jagannathan, Phys. Rev. Lett. **74**, 5248 (1995).
- [38] S. Evangelou and J. Pichard, Phys. Rev. Lett. **84**, 1643 (2000).
- [39] V. G. Benza and C. Sire, Phys. Rev. B **44**, 10343 (1991).
- [40] H.Q.Yuan, U.Grimm, P.Repetowicz, and M.Schreiber, Phys. Rev. B **62**.

- [41] H.-R. Trebin, *Quasicrystals - Structure and physical properties*, Wiley.
- [42] E. Zijlstra, Phys. Rev. B **66**.
- [43] E. Akkermans and G. Montambaux, editors, *Physique mésoscopique des électrons et des photons*.
- [44] E.P.Wigner, Ann. Math. **62**, 548 (1955).
- [45] E. P. Wigner, Ann. Math. **65**, 203 (1957).
- [46] F. J. Dyson, J. Math. Phys. **3**, 140, 1199 (1962).
- [47] M. L. Mehta, *Random Matrices*, Academic Press, Boston, 1991.
- [48] J. Dehesa, J. Gomez, and A. Polls, editors, *Mathematical and Computational Methods in Nuclear Physics*.
- [49] A. G. Aronov, V. E. Kravtsov, and I. V. Lerner, Phys. Rev. Lett. **74**, 1174 (1995).
- [50] D. Braun and G. Montambaux, Phys. Rev. B **52**, 13903 (1995).
- [51] M. Batsch, L. Schweitzer, I. Zharekeshev, and B.Kramer, Phys. Rev. Lett. **77**, 1552 (1996).
- [52] D. Braun and G. Montambaux, Phys. Rev. Lett. **81**, 1062 (1998).
- [53] E. Bogomolny, U. Gerland, and C. Schmit, Phys. Rev. B **59**, R1315 (1999).
- [54] N. Argaman, Y. Imry, and U. Smilansky, Phys. Rev. B **47**, 4440 (1993).
- [55] M. Duneau, R. Mosseri, and C. Oguey, J. Phys. A **22**, 4549 (1989).
- [56] P. Steinhardt and D. Vincenzo, editors, *Quasicrystals :The State of the Art*, World Scientific, 1991.
- [57] M. Widom, K. Strandberg, and R. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **58**, 706 (1987).
- [58] M. Widom, D. P. Deng, and C. L. Henley, Phys. Rev. Lett. **63**, 310 (1989).
- [59] M. Widom, Phys. Rev. Lett. **70**, 2094 (1993).
- [60] P.A.Kalugin, J. Phys. A **27**, 3599 (1994).
- [61] W. Li, H. Park, and M. Widom, J. Stat. Phys. **66**, 1 (1992).
- [62] F.Piechon and A. Jagannathan, Phys. Rev. B **51**, 179 (1995).
- [63] A. Jagannathan, Phys. Rev. B **61**, R834 (2000).

- [64] J. X. Zhong, U. Grimm, R.A.Roemer, and M.Schreiber, Phys. Rev. Lett. **80**, 3996 (1998).
- [65] C. Sire and R. Mosseri, Phys. Rev. B **44**, 10343 (1991).
- [66] J. Vidal and R. Mosseri, Generalized Rauzy tilings, J. Phys. A **34**, 3927 (2001).
- [67] A. Jagannathan, Phys. Rev. B **64**, 140201(R) (2001).
- [68] F. Triozon, J. Vidal, R. Mosseri, and D. Mayou, Phys. Rev. B **65**, 220202 (2002).
- [69] J. Vidal, N. Destainville, and R. Mosseri, Phys. Rev. B **68**, 172202 (2003).
- [70] T. Janssen, J. Los, and F. Gaehler, Intl. J. Mod. Phys. **7**, 1505 (1993).
- [71] K.Gianno, A. Sologubenko, M.A.Chernikov, H. Ott, I. Fisher, and P. Canfield, Phys. Rev. B **62**, 292 (2000).
- [72] A. Bilusic, A. Smontara, J. Dolinsek, H. Ott, I. Fisher, and P. Canfield, Cond-mat/0307458 (2003).
- [73] E. Thompson, P. Vu, and R. Pohl.
- [74] F. Bert and G. Bellessa, Phys. Rev. B **65**, 014202 (2002).
- [75] C.Janot, Phys. Rev. B **53**, 181 (1996).

# Annexe B

## Quelques Publications

**Quantum spins and quasiperiodicity : A real space renormalization group approach**

A. Jagannathan, Phys. Rev. Lett. **92** 047202 (2004)

**Quantum Antiferromagnetism in quasicrystals**

Stefan Wessel, Anuradha Jagannathan and Stephan Haas, Phys. Rev. Lett. **90** 177205 (2002)

**Magnetic states induced by electron-electron interactions on a plane quasiperiodic tiling**

A. Jagannathan and H. J. Schulz, Phys. Rev. B **55** 8045 (1997)

**Less singular quasicrystals : the case of low codimensions**

A. Jagannathan, Phys. Rev. B **64** 140201(R) (2001)

**Self-similarity under inflations and level statistics : A study in two dimensions**

A. Jagannathan, Phys. Rev. B **61** R834 (2000)

**Energy level statistics of electrons in a two dimensional quasicrystal**

Frederic Piechon and A. Jagannathan, Phys. Rev. B **51** 179 (1995)