

# Étude numérique : RMS pour un potentiel de Fibonacci, modèle tight-binding

## Vérification de la formule $\phi_E(k) = p_k(E)\phi_E(1)$ pour les fonctions propres

Les résultats numériques confirment que, dans le modèle du tight-binding, on peut écrire les fonctions propres sous la forme suivante :  $\phi_E(k) = p_k(E)\phi_E(1)$ , la suite de polynômes  $\{p_k\}_k$  vérifiant la relation de récurrence :

$$p_{k+1}(E) = (2 + V_{k+1} - E)p_k(E) - p_{k-1}(E)$$

$$\text{avec conditions initiales : } \begin{cases} p_1(E) = 2 + V_1 - E \\ p_0(E) = 1 \end{cases}$$

Le figure 1 compare les graphes de  $\phi_E(k)$  et  $p_k(E)\phi_E(1)$ , comme fonctions de  $E$ , pour un site donné. Les deux courbes se superposent.

## RMS pour un potentiel de Fibonacci

J'ai retracé la RMS (directement et avec la formule utilisant les polynômes) pour un potentiel de Fibonacci ; la formule théorique est donc :

$$\begin{aligned} \Delta x(t)^2 &= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |\psi(k, t)|^2 \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left| \int_K e^{i\epsilon t} \phi_{\epsilon}^*(k_0) \phi_{\epsilon}(k) d\mu(\epsilon) \right|^2 \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left| \int_K e^{i\epsilon t} |\phi_{\epsilon}(1)|^2 p_k(\epsilon) p_{k_0}(\epsilon) \right|^2 d\mu(\epsilon) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |j_{k+k_0}(t)|^2 \end{aligned}$$

On retrouve bien un comportement globalement croissant pour  $\Delta x(t)$ , et les graphes théoriques et numériques coïncident (cf figures 2,3).

## Comparaison avec les résultats de Hiramoto

Ces résultats ne correspondent pas à ceux de l'article de Hiramoto, mais il est possible que ce soit en raison des unités (j'ai posé  $\hbar = 1$  pour les calculs, je vais comparer avec ce que j'obtiendrai avec des unités correctes).

## RMS pour un spectre de Cantor

La formule

$$h_k(t) = t^{-k-\ln 2/\ln 3} \sum_{m \in \mathbb{Z}} t^{-2i\pi m/\ln 3} e^{-i\pi s_{m,k}/2} r_{k,m} \Gamma(s_{m,k}) \quad (1)$$

avec  $h_k(t) = \int_K e^{iet} |\phi_\epsilon(1)|^2 e^k d\mu(\epsilon)$ ,  $k \in \mathbb{N}$  se vérifie bien numériquement. Il s'agit de la formule centrale pour montrer que le RMS, pour un spectre de Cantor triadique, est de la forme :

$$\Delta x(t) = \sqrt{t^{-2 \ln 2 / \ln 3} \sum_{k \in \mathbb{Z}} k^2 \sum_{0 \leq l_k \leq k} d_{l_k} t^{-l_k} G_{l_k}(\ln t)}$$

La figure 4 compare les graphes de la formule théorique et du calcul direct de la fonction  $h_k(t) = \int_K e^{iet} e^k d\mu(\epsilon)$  pour  $k = 2$ ; la figure 5 montre les mêmes graphes en échelle log.

Enfin, j'ai vérifié la formule donnée dans les notes (synthese-dynq.pdf, sur drop-box) pour  $\Delta x$  :

$$\Delta x(t) = \sqrt{t^{-2 \ln 2 / \ln 3} \sum_{k \in \mathbb{Z}} k^2 \sum_{0 \leq l_k \leq k} d_{l_k} t^{-l_k} G_{l_k}(\ln t)}$$

On considère l'équation de Schrodinger sans potentiel, dans le modèle du tight-binding, que l'on résoud dans  $l_2(\mathbb{N})$ ; les fonctions propres sont des suites  $(\phi_\lambda(n))_n$  vérifiant :

$$-\phi_\lambda(n+1) - \phi_\lambda(n-1) + 2u_\lambda(n) = \lambda \phi_\lambda(n)$$

Pour reproduire un système régit dont le spectre est un ensemble de Cantor triadique  $K$ , on se restreint à l'espace des fonctions engendré par les les fonctions propres associées aux valeurs propres  $\lambda \in K$ . On vérifie que ces fonctions sont bien orthonormales.

Suivant le même raisonnement que dans les notes, on peut voir les valeurs prises par fonctions propres  $\phi_\lambda$  en les sites  $n$  comme des polynômes en  $\lambda$  :

$$\phi_\lambda(n) = p_n(\lambda)$$

avec

$$p_n(x) = \sum_{j_n \leq n} d_{j_n, k} x^{j_n}$$

Les  $d_{j_n}$  sont calculés numériquement grâce à la relation de récurrence qui définit les polynômes  $p_n(x)$  (cf synthese-dynq.pdf).

On construit un paquet d'onde simple :

$$\psi(k, t) = \sum_{\lambda \in K} \phi_\lambda(n) e^{-i\lambda t}$$

On compare maintenant numériquement les graphes du RMS calculé directement :

$$\Delta x_{dir}(t) = \sqrt{\sum k^2 |\psi(k, t)|^2}$$

et théorique :

$$\Delta x_{th}(t) = t^{-\ln 2 / \ln 3} \sqrt{\sum_{k \in \mathbb{Z}} k^2 \sum_{0 \leq l_k \leq k} c_{l_k} t^{-l_k} G_{l_k}(\ln t)}$$

où les  $c_{l_k}$ , issus du réarrangement des termes en monômes de même degré, sont déterminés numériquement. Les figures 6,7 montrent les graphes issus du calcul direct (échelle normale et échelle log); les figures 8,9 montrent les graphes théoriques.

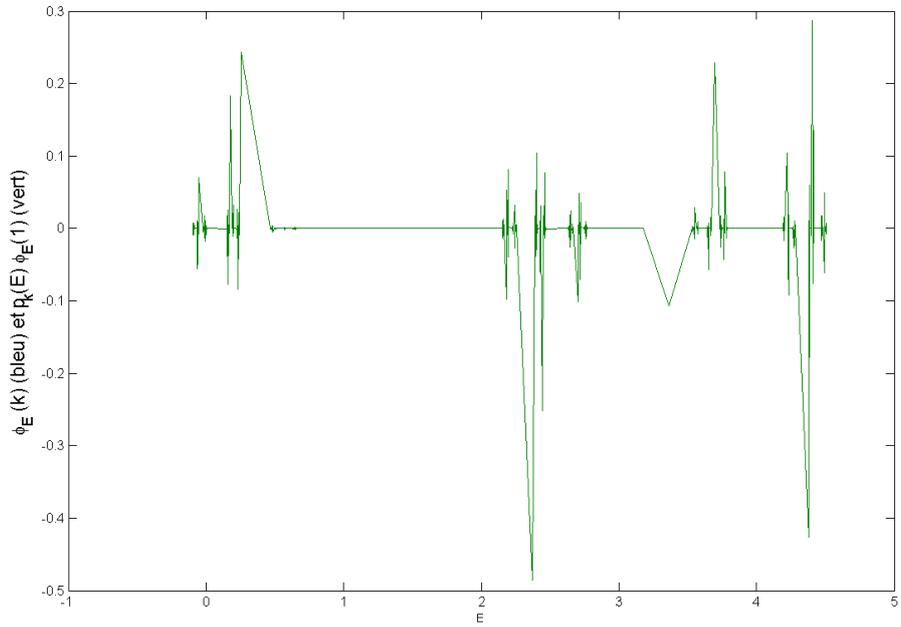


FIGURE 1 –

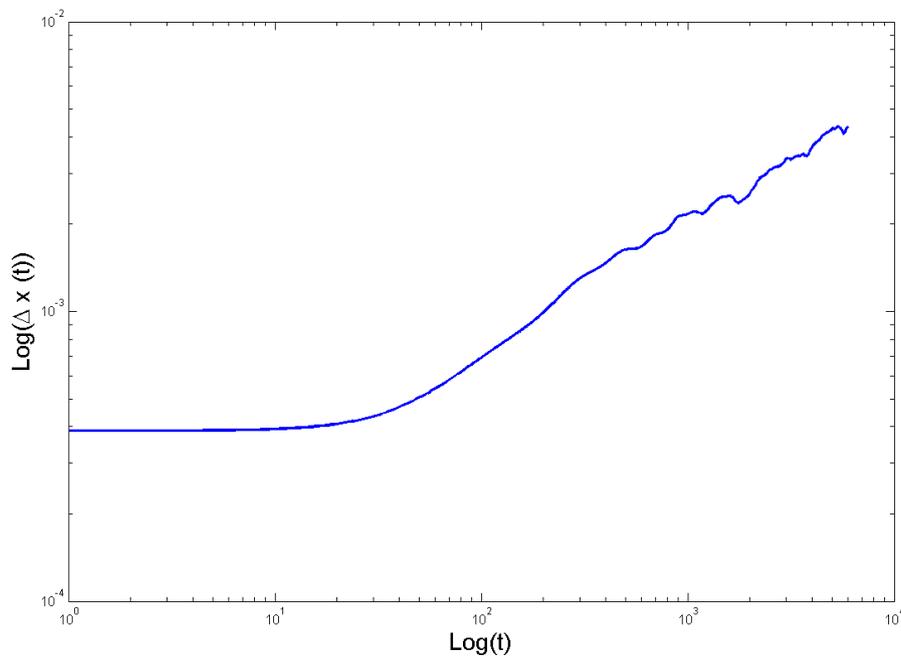


FIGURE 2 – RMS théorique pour un potentiel de Fibonacci, paquet d'onde initialement sur le site 1 (au bord)

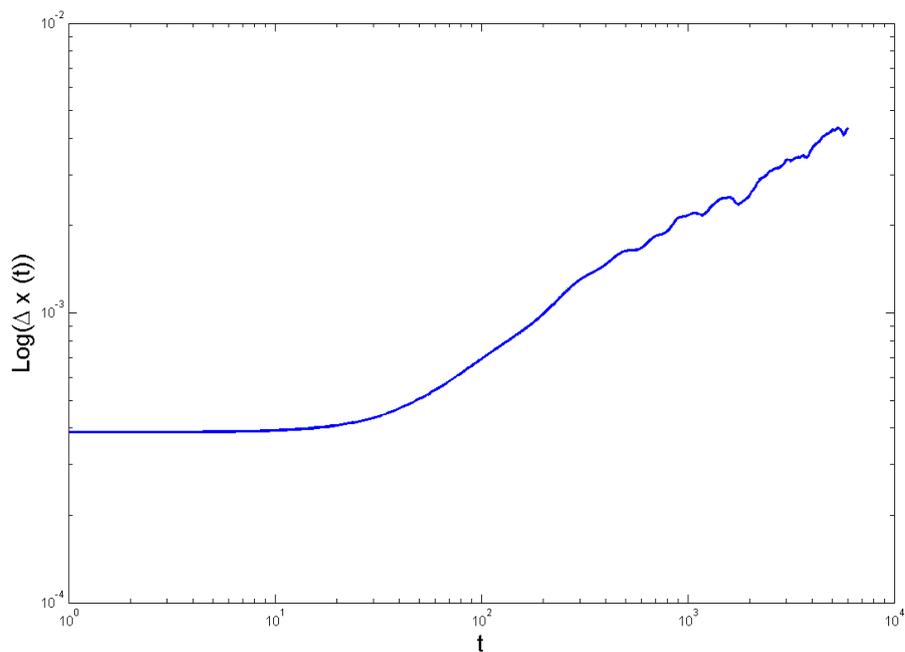


FIGURE 3 – RMS pour un potentiel de Fibonacci, paquet d'onde initialement sur le site 1 (au bord)

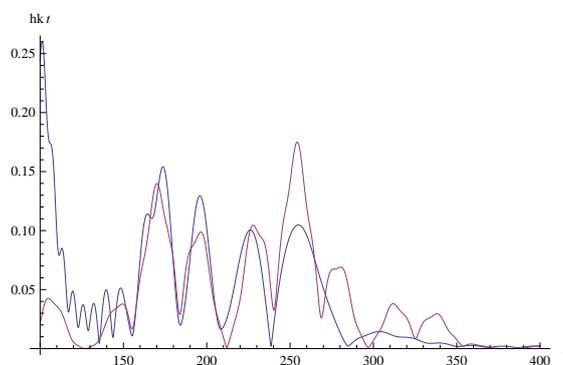


FIGURE 4 – Graphes théorique et numérique de  $h_k(t)$

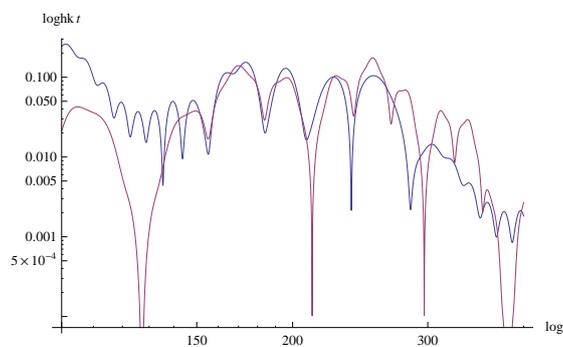


FIGURE 5 – Graphes théorique et numérique de  $h_k(t)$ , échelle log

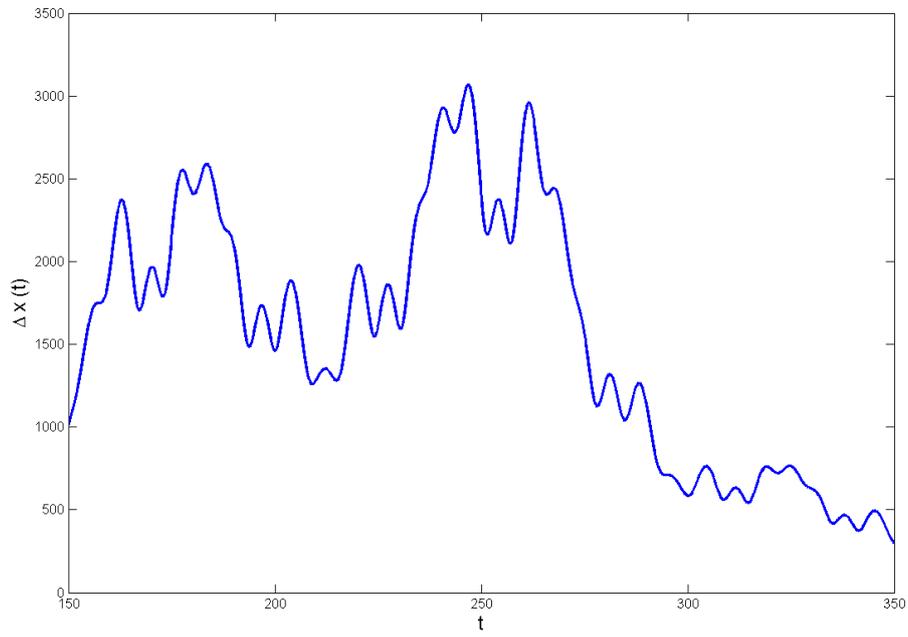


FIGURE 6 – RMS pour un spectre de Cantor triadique, calculé directement

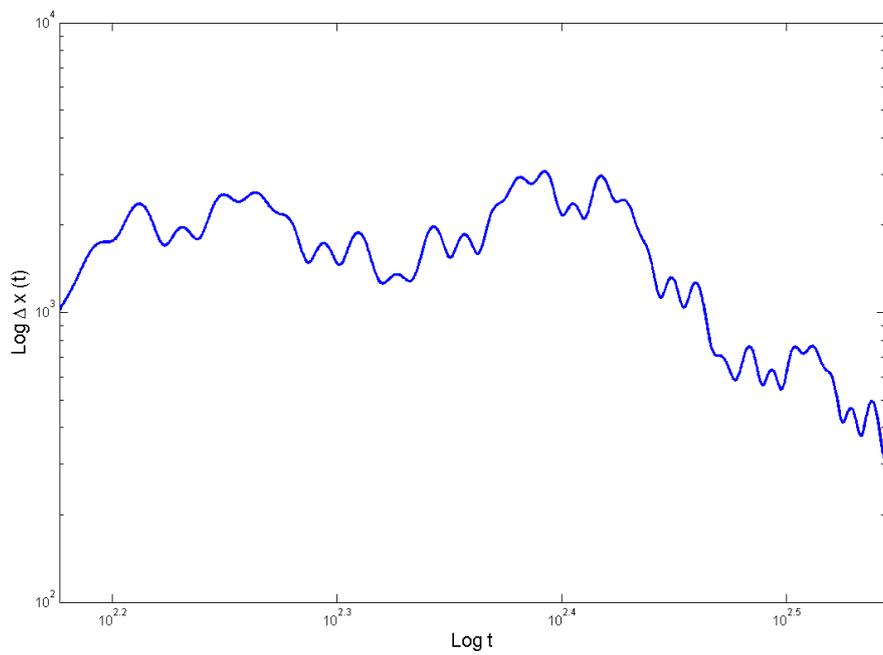


FIGURE 7 – RMS pour un spectre de Cantor triadique, calculé directement, échelle log

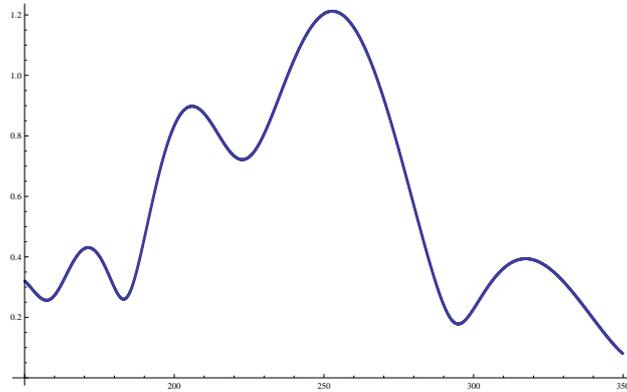


FIGURE 8 – RMS théorique pour un spectre de Cantor triadique

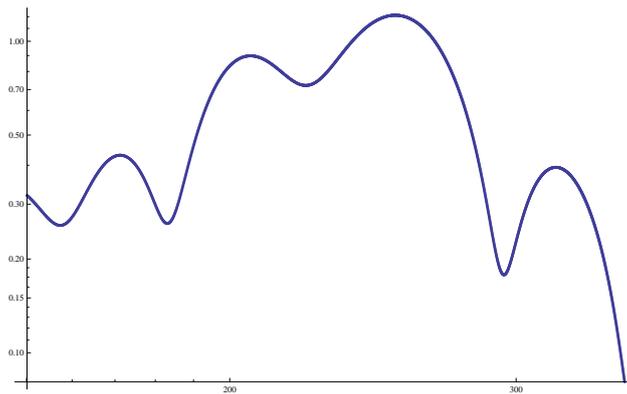


FIGURE 9 – RMS théorique pour un spectre de Cantor triadique, échelle log