

Formule de Thouless pour un spectre fractal

Modèle du tight-binding : N sites espacés de 1. Équation de Schrodinger discrétisée :

$$-\phi_n(k+1) - \phi_n(k-1) + 2\phi_n(k) + V(k)\phi_n(k) = E_n\phi_n(k)$$

avec $\phi_n = (\phi_n(0), \phi_n(1), \dots, \phi_n(N))$ une solution propre associée à la valeur propre E_n ; on a ajouté le site 0 avec pour conditions : $\phi_n(0) = 0$ et la normalisation : $\sum |\phi_n(k)|^2 = 1$.

Exprimé matriciellement dans la base $\{|k\rangle\}_{1,N}$ avec $|k\rangle = (\delta_{j,k})_{j=1,N}$, on obtient : $H_N\phi_n = E_n\phi_n$ avec

$$H_N = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -1 & 2+V(1) & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \cdots & \cdots & -1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 2+V(N) \end{pmatrix}$$

On utilise la matrice de Green : $G(E) = (EI - H_N)^{-1}$, pour exprimer les corrélations spatiales de ϕ_n en terme de fonctions spectrales.

D'une part :

$$G_{1N}(E) = \sum_{n=1}^N \frac{\phi_n^*(1)\phi_n(N)}{E - E_n}$$

et d'autre part, en utilisant la formule d'inversion matricielle :

$$G_{1N}(E) = \frac{(-1)^{N+1}}{\prod (E - E_n)} \text{Cof}_{N1}(EI - H_N)$$

avec $\text{Cof}_{N1}(EI - H_N) = (-1)^{N+1}$. En identifiant les deux égalités ci-dessus, en multipliant par $(E - E_n)$ et en évaluant en $E = E_n$, il vient :

$$|\phi(1)\phi(N)| = \frac{1}{\prod_{k \neq n} |E_k - E_n|}$$

puis

$$\frac{1}{N} \ln |\phi_n(1)\phi_n(N)| = -\frac{1}{N} \sum_{k \neq n} \ln |E_k - E_n|$$

Dans le cas où le spectre est un ensemble de Cantor, et avec $N = 2^m$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln |\phi_n(1)\phi_n(N)| &= -\frac{1}{2^m} \sum_{k \neq n} \ln |E_k - E_n| \\ &\simeq -\frac{3^m}{2^m} \sum_{k \neq n} \int_{E_k}^{E_k+3^{-m}} \ln |x - E_n| dx \\ &\simeq -\int_{\text{Cantor}} \ln |x - E_n| d\mu(x) \end{aligned}$$

Le passage au continu se fait mal avec l'approche matricielle ; pour N sites espacés de a , avec $L = aN$ fixé, on obtient :

$$\frac{1}{a^{2N}} \frac{1}{\prod_{k \neq n} |E_k - E_n|}$$

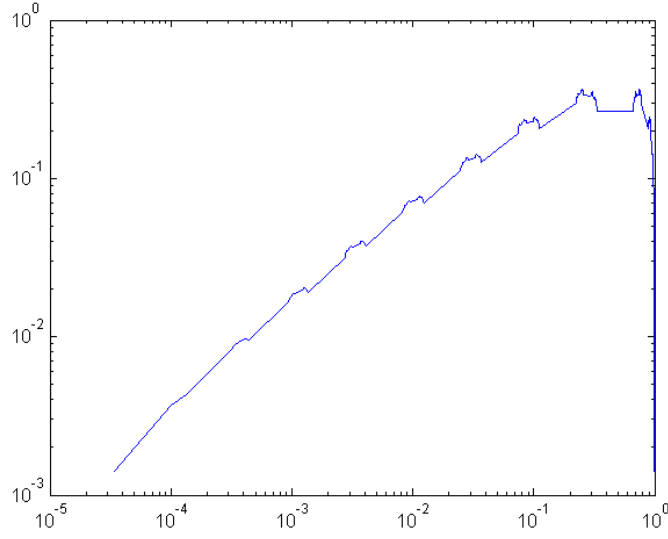


FIGURE 1 – $f(x)$ sans le terme $x^{\ln 2 / \ln 3}$, échelle loglog

En première approximation : $E_k = \frac{1}{a^2} e_k$, où e_k est une valeur propre de la matrice H_N pour N sites espacés de 1. D'où :

$$\begin{aligned} \frac{1}{aN} \ln |\phi_n(1)\phi_n(N)| &= -\frac{1}{aN} \sum_{k \neq n} \ln |e_k - e_n| \\ &\simeq \underbrace{-\frac{1}{a} \int_{Cantor} \ln |x - e_n| d\mu(x)}_{\text{diverge quand } a \text{ tend vers } 0} \end{aligned}$$

Comportement de $\gamma(E) = \int_{Cantor} \ln |y - E| d\mu(y)$. Posons :

$$f(x) = \gamma(x) - \gamma(0)$$

Alors :

$$f(x) = 2f(x/3) - \underbrace{\int \ln |x - y - 2| d\mu(y)}_{h(x)}$$

f a la symétrie suivante : $f(x) = f(1 - x)$, $x \in [0, 1]$. D'où :

$$f(x) = \begin{cases} x^{\ln 2 / \ln 3} \sum x^{2i\pi n / \ln 3} h_n & \text{pour } x \in [0, 1/2] \\ f(1 - x) & \text{pour } x \in [1/2, 1] \end{cases}$$

avec $h_n = M_h(-\ln 2 / \ln 3 - 2i\pi n / \ln 3)$ et M_h la transformée de Mellin de h . Il est difficile d'évaluer analytiquement et numériquement h_n , mais l'équation fonctionnelle vérifiée par f se vérifie bien numériquement (cf fig 1 et 2).

Généralisation de la formule de Thouless et application au calcul du RMS

Considérons la cas d'un potentiel de Fibonacci, pour un système de $N = F_L$ sites, où F_L est un nombre de la suite de Fibonacci. L'approche utilisée précédemment permet d'obtenir la relation

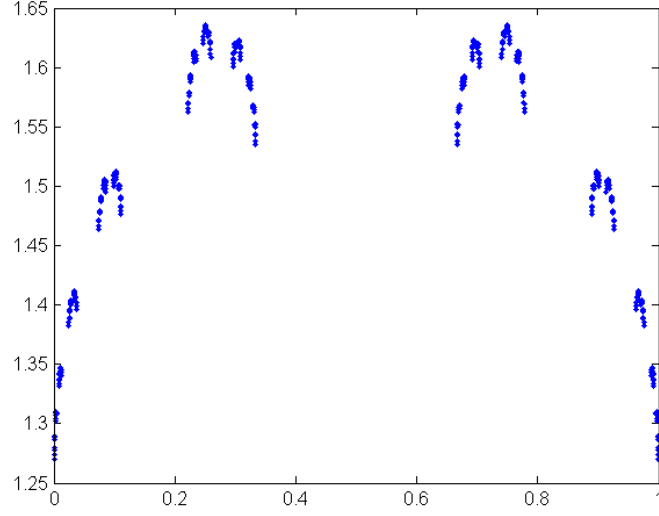


FIGURE 2 – coefficient de Thouless

suivante pour la corrélation spatiale de la fonction propre ϕ_n entre les sites 1 et $F_j \leq F_L$:

$$|\phi(1)\phi(F_j)| = \frac{Cof_{F_j,1}(EI - H_{F_L})|_{E=E_n}}{\prod_{k \neq n} |E_k - E_n|} = \frac{1}{\prod_{k \neq n} |E_k - E_n|} \Delta_{F_j+1, F_L}(E_n)$$

avec

$$\Delta_{F_j+1, F_L}(E) = \det \begin{pmatrix} E - (2 + V(F_j + 1)) & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ & \vdots & & & \\ & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ & 0 & \cdots & 0 & 1 & E - (2 + V(F_L)) \end{pmatrix}$$

$$\Delta_{F_j+1, F_L} \text{ est le polynôme caractéristique de la matrice } H_{F_L}^j = \begin{pmatrix} V_{F_j+1} & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \cdots & \ddots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & V_{F_L} \end{pmatrix}$$

avec pour alléger les notations $V_k = 2 + V(k)$.

$H_{F_L}^j$ est la matrice associée à la restriction de l'opérateur défini par H_{F_L} à l'espace engendré par les vecteurs $\{|k\rangle\}_{k=F_j+1, F_L}$. Or, la restriction de H_{F_L} à l'espace engendré par $\{|k\rangle\}_{k=1, F_j}$ est exactement H_{F_j} , donc :

$$|\phi(1)\phi(F_j)| = \frac{1}{\prod_{E_k \neq E_n, E_k \in sp(H_{F_j})} |E_k - E_n|}$$

De plus, nous disposons de : $sp(H_{F_j}) \subset sp(H_{F_L})$ pour tout $j \leq L$.

On fait maintenant l'approximation suivante :

$$\text{pour tout } j, \frac{1}{F_j} \sum_{sp(H_{F_j})} \approx \int_K d\mu$$

avec K le spectre de H_{F_L} pour $L \rightarrow \infty$, que l'on sait de type Cantor.

Disposant d'informations sur ses sites particuliers de la lattice, on peut en déduire une valeur approchée de l'expression du RMS. On considère un paquet d'onde :

$$\xi(t) = \sum_{E_n \in sp(H_{F_L})} c_n \phi_n e^{-iE_n t}$$

puis :

$$\begin{aligned} \Delta x(t)^2 &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{F_L} k^2 |\xi(k, t)|^2 \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{E_n, E_{n'} \in sp(H_{F_L})} e^{i(E_n - E_{n'})t} \sum_{k=1}^{F_L} k^2 \phi_n(k)^* \phi_{n'}(k) \\ &\simeq \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{E_n, E_{n'} \in sp(H_{F_L})} e^{i(E_n - E_{n'})t} \sum_{k=1}^{F_L} \int_k^{k+1} x^2 \phi_n(x)^* \phi_{n'}(x) dx \\ &\simeq \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{E_n, E_{n'} \in sp(H_{F_L})} e^{i(E_n - E_{n'})t} \sum_{j=1}^L \int_{F_j}^{F_{j+1}} x^2 \phi_n(x)^* \phi_{n'}(x) dx \\ &\simeq \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{E_n, E_{n'} \in sp(H_{F_L})} e^{i(E_n - E_{n'})t} \sum_{j=1}^L \underbrace{(F_{j+1} - F_j)}_{F_{j-1}} F_j^2 \phi_n(F_j)^* \phi_{n'}(F_j) dx \\ &\simeq \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{E_n, E_{n'} \in sp(H_{F_L})} e^{i(E_n - E_{n'})t} \sum_{j=1}^L F_{j-1} F_j^2 e^{-(\gamma(E_n) + \gamma(E_{n'}))F_j} \end{aligned}$$

avec $\gamma(E) = \int_K \ln(|x - E|) d\mu(x)$ le coefficient de Thouless discuté précédemment (on a supposé pour le moment que les c_n sont uniformes ; la dépendance du RMS en les coefficients c_n sera discutée ultérieurement).

Pour estimer la somme $\sum_{j=1}^L F_{j-1} F_j^2 e^{-(\gamma(E_n) + \gamma(E_{n'}))F_j}$, on utilise la formule donnant F_j en fonction de $\alpha = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$: $F_j = \frac{\alpha^j - (1-\alpha)^j}{\sqrt{5}}$, avec l'approximation : $F_j \simeq \alpha^j$. Maintenant :

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^L F_{j-1} F_j^2 e^{-(\gamma(E_n) + \gamma(E_{n'}))F_j} &\simeq \sum_{j=1}^L \alpha^{j-1} \alpha^{2j} e^{-(\gamma(E_n) + \gamma(E_{n'}))\alpha^j} \\ &\simeq \int_{-\infty}^L \alpha^{3x-1} e^{-(\gamma(E_n) + \gamma(E_{n'}))x} dx \\ &\simeq \frac{2}{\alpha \ln \alpha} (\gamma(E_n) + \gamma(E_{n'}))^{-3} \text{ pour } L \rightarrow \infty \end{aligned}$$

En prenant maintenant l'approximation : $\sum_{E_n \in sp(H_L)} \simeq \int_K$, et en négligeant (pour alléger les calculs) la constante $\gamma(0)$, l'utilisation de l'équation fonctionnelle vérifiée par γ conduit à :

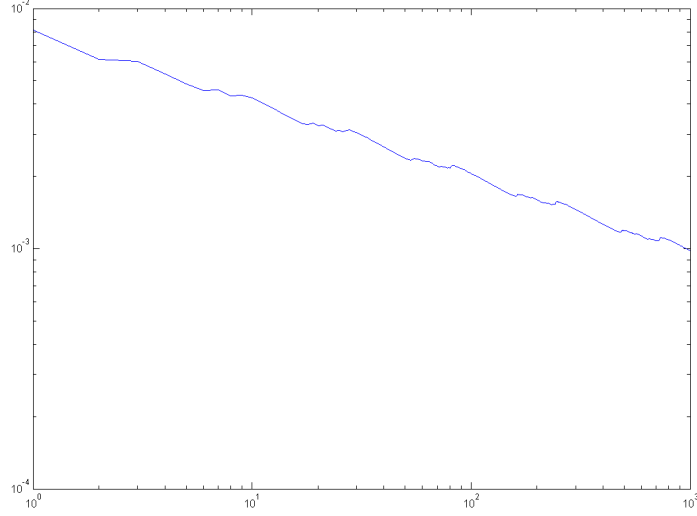


FIGURE 3 – RMS théorique, échelle loglog

$$\begin{aligned}
\Delta x(t)^2 &\simeq \iint_{K \times K} d\mu(E) d\mu(E') e^{i(E-E')t} \frac{2}{(\gamma(E) + \gamma(E'))^3} \\
&= \frac{1}{b^2} \iint_{K \times K} d\mu(E) d\mu(E') e^{i(E-E')t/a} \frac{2}{\alpha \ln \alpha} \frac{1}{(\gamma(E/a) + \gamma(E'/a))^3} \\
&+ \underbrace{\frac{1}{b^2} \iint_{K \times K} d\mu(E) d\mu(E') e^{i(E-E')t/a} \frac{2}{(\gamma(\frac{E+b}{a}) + \gamma(\frac{E'}{a}))^3} + \dots}_{H(t)} \\
&= \frac{1}{b^2} \iint_{K \times K} d\mu(E) d\mu(E') e^{i(E-E')t/a} \frac{2b^3}{\alpha \ln \alpha} \frac{1}{(\gamma(E) + \gamma(E'))^3} + H(t) \\
&= b \Delta x(t/a)^2 + H(t)
\end{aligned}$$

On obtient ainsi une équation fonctionnelle pour $\Delta x(t)$, qui, suivant la même méthode que celle utilisée pour la fonction de retour à l'origine, explique son comportement log-périodique.

Résultats numériques

La figure 3 est le graphe de l'expression théorique du RMS pour un potentiel de Fibonacci, avec l'approximation

$$\Delta x(t)^2 \simeq \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{E_n, E_{n'} \in \text{sp}(H_{F_L})} e^{i(E_n - E_{n'})t} \sum_{k=1}^{F_L} \int_k^{k+1} x^2 \phi_n(x)^* \phi_{n'}(x) dx$$

et

$$\sum_{j=1}^L F_{j-1} F_j^2 e^{-(\gamma(E_n) + \gamma(E_{n'})) F_j} \simeq \frac{2}{\alpha \ln \alpha} (\gamma(E_n) + \gamma(E_{n'}))^{-3}$$

pour un paquet d'onde initial localisé sur un site.

Le coefficient de Thouless est calculé avec le spectre associé au potentiel de Fibonacci, de type Cantor (cf, figure 5). La figure 6 montre les graphes des coefficients de Thouless calculés pour des séquences finies de F_{14} , F_{15} et F_{16} sites respectivement ; on constate que les trois graphes sont pratiquement identiques, ce qui justifie l'approximation : $\sum_{E_n \in \text{sp}(H_L)} \simeq \int_K$. On observe un

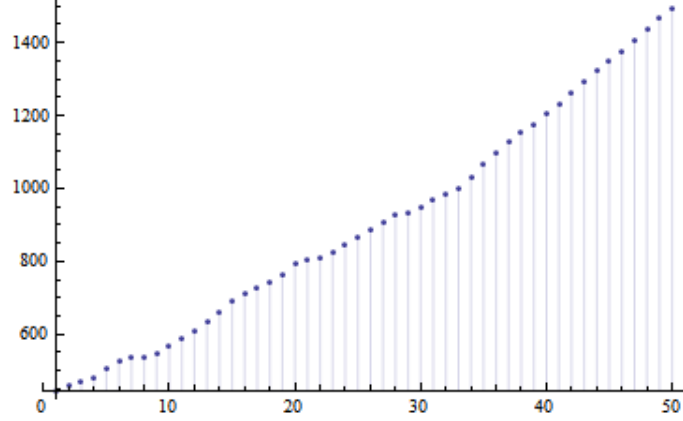


FIGURE 4 – calcul numérique du RMS pour un potentiel de Fibonacci

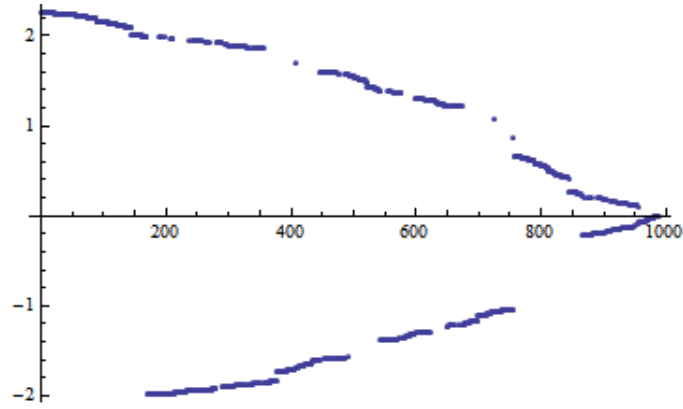


FIGURE 5 – Spectre du potentiel de Fibonacci

comportement log-périodique, mais la décroissance de la fonction est surprenante. Cela provient probablement d'une mauvaise définition du paquet d'onde initial et/ou d'approximations numériques ; je continue de travailler sur ce point actuellement.

La figure 4 est le graphe obtenu directement de la définition du RMS, en fonction des fonctions propres du hamiltonien :

$$\Delta x(t)^2 = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{E_n, E_{n'} \in \text{sp}(H_{F_L})} e^{i(E_n - E_{n'})t} \sum_{k=1}^{F_L} k^2 \phi_n(k)^* \phi_{n'}(k)$$

Utilisation des matrices de transfert

Une autre approche pour calculer $|\phi(1)\phi(k)|$ utilise les matrices de transfert :

$$M_k = \begin{pmatrix} V_k - E_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

telles que : $\begin{pmatrix} \phi_n(k) \\ \phi_n(k-1) \end{pmatrix} = M_k \begin{pmatrix} \phi_n(k) \\ \phi_n(k-1) \end{pmatrix}$

Posons : $\begin{pmatrix} p_k & q_k \\ p_{k-1} & q_{k-1} \end{pmatrix} = \prod_{j=k}^1 \begin{pmatrix} p_j & q_j \\ p_{j-1} & q_{j-1} \end{pmatrix}$.

$(p_k)_k$ et $(q_k)_k$ vérifient la même relation de récurrence : $p_{k+1} = v_{k+1}p_k - p_{k-1}$, avec conditions initiales : $\begin{cases} p_1 = V_1 \\ p_2 = V_1 V_2 - 1 \end{cases}$ et $\begin{cases} q_1 = -1 \\ p_2 = -V_2 \end{cases}$

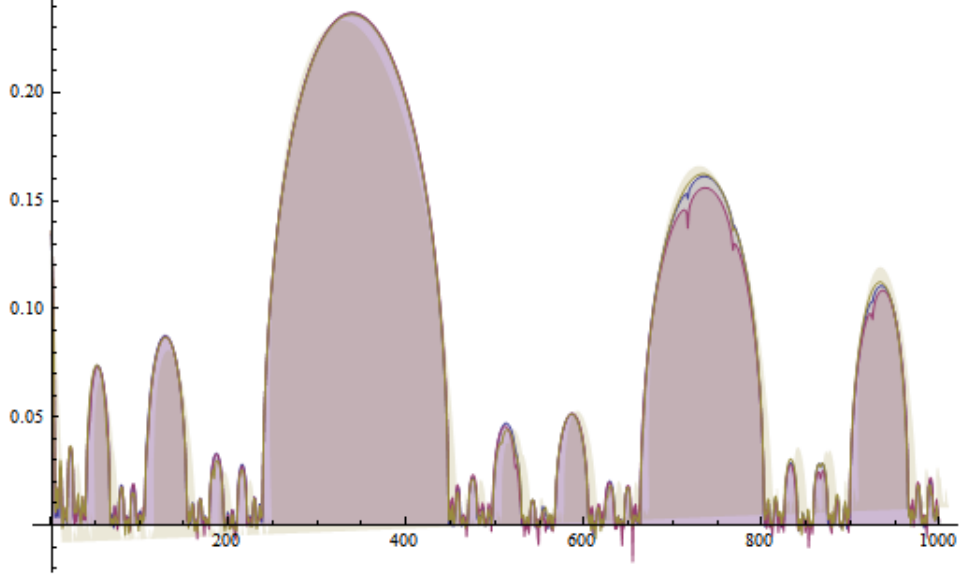


FIGURE 6 – Coefficient de Thouless pour le potentiel de Fibonacci

La suite $(p_k)_k$ est reliée à $(\Delta_{k,N})_k$ via : $|\phi_n(1)|^2 p_k = \frac{1}{\prod_{k \neq n} |E_k - E_n|} \Delta_{k,N}(E_n)$

L'utilisation des matrices $\begin{pmatrix} p_k & q_k \\ p_{k-1} & q_{k-1} \end{pmatrix}$ permet d'obtenir, en exploitant la symétrie potentiel de Fibonacci ($V_{F_j+k} = V_k$) :

$$\begin{pmatrix} \phi_n(F_j + k) \\ \phi_n(F_j + k - 1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_k & q_k \\ p_{k-1} & q_{k-1} \end{pmatrix} M_{F_j} \begin{pmatrix} \phi_n(1) \\ \phi_n(0) \end{pmatrix}.$$

En fixant la condition initiale : $\phi_n(0) = 0$, on en déduit :

$$\phi_n(F_j + k) = \left(1 + \frac{q_k p_{F_j-1}}{p_k p_{F_j}}\right) \frac{\phi_n(k) \phi_n(F_j)}{\phi_n(1)} \simeq \left(1 + \frac{q_k}{p_k}\right) \frac{\phi_n(k) \phi_n(F_j)}{\phi_n(1)}$$

Ceci conduit à :

$$\phi_n(k) = \frac{\phi_n(1)}{1 + \frac{q_k}{p_k}} e^{\delta_n k}$$

avec δ_n fixé par la condition de normalisation : $\sum_k |\phi_n(k)|^2 = 1$.

En réinjectant cette relation dans l'expression du RMS, on obtient également des relations intéressantes, mais je n'ai pas encore d'informations suffisantes sur le comportement des δ_n pour avoir des résultats concluants.