

Points à discuter concernant l'article sur la dynamique quantique pour un spectre de Cantor.

RMS et formule de Thouless dans le cas du tight-binding

cf. les dernières notes sur ce sujet : synthese-dynq.pdf sur la dropbox.

- *Formule de Thouless* :

Est-il intéressant de parler de la formule :

$$\frac{1}{N} \ln |\phi_n(1)\phi_n(N)| = -\gamma(E_n)$$

cela a déjà plus ou moins été établi par Thouless, et je ne pense pas que ceci soit l'argument clef pour expliquer le comportement log-périodique du RMS dans le cas du tight-binding. Dans ce cas, en effet, on peut mettre les fonctions propres sous la forme suivante :

$$\phi_E(k) = \phi_E(1)p_k(E)$$

où $p_k(E)$ est un polynôme en E et avec $\phi_E(1)$ dépendant des conditions limites ($\phi_E(1) \propto e^{-N\gamma(E)}$ pour une lattice finie avec pour conditions limites $\phi_E(0) = 0$, $\phi_E(N) = a$; $\phi_E(1) = \frac{1}{\sqrt{\sum_k |p_k(E)|^2}}$ si l'on impose la normalisation $\sum |\phi_E(k)|^2 = 1$).

Le RMS est alors donné par :

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

i.e. une combinaison linéaire de termes de la forme :

$$j_{k+k_0}(t) = \int_K e^{i\epsilon t} |\phi_{\epsilon}(1)|^2 p_k(\epsilon) p_{k_0}(\epsilon) d\mu(\epsilon)$$

Les pôles de la transformation de Mellin de ces fonctions proviennent des termes ϵ^k dans les polynômes; cela ne dépend pas de l'expression de $\phi_E(1)$, me semble-t-il, du moins pas pour les deux cas envisagés. Les pôles sont de la forme : $s_{m,k} = k + \frac{\ln 2}{\ln 3} + \frac{2i\pi m}{\ln 3}$.

- *Expression du RMS pour le tight-binding* :

L'approche avec l'expression suivante pour les fonctions propres : $\phi_E(k) = \phi_E(1)p_k(E)$, conduit à l'expression suivante pour le RMS :

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

où les $G_k(\ln t)$ sont des fonctions périodiques de $\ln t$, de période $\ln 3$. Cela explique le comportement log-périodique observé pour les polaritons, dans le papier de Hiramoto et Kohmoto [1] et dans le papier de Mantica [2]. En revanche, la loi de puissance $t^{-\ln 2/\ln 3}$ en facteur est surprenante : on attendait plutôt un exposant positif. Toutefois, il faudrait étudier plus en détail les coefficients d_{l_k} (issus du réarrangement des termes en monômes de même degré dans $j_{k+k_0}(t)$ et du calcul des $p_k(\epsilon)$) pour connaître le comportement global (croissant, décroissant, présence ou non d'une loi de puissance globale) du RMS.

Dans [1], ils obtiennent le comportement asymptotique suivant :

$$\Delta x(t) \approx_{t \rightarrow \infty} t^\alpha$$

avec : $\alpha = 0$ pour des états localisés, et $\alpha = 1/2$ ou 1 pour les états étendus. Pour comparer, il faudrait reprendre les calculs avec les mêmes conditions initiales que celle qu'ils choisissent ; peut-être que cela permettra de retrouver leur résultat, je n'ai pas encore essayé.

Dans [2], Mantica étudie également les moments $\nu_\alpha(t) = \sum_n n^\alpha x_n^2(t)$ (pour $\alpha = 2$, il s'agit donc du carré du RMS) pour un spectre de Cantor et obtient :

$$\ln \nu_\alpha(t) \approx \alpha \beta(\alpha) \ln t + g(\ln t)$$

avec g bornée et β convexe et positive. L'approche de Mantica est proche de celle que j'ai utilisée : la fonction d'onde est décrite en fonction des polynômes orthogonaux pour la mesure μ du spectre, ce qui donne également $\nu_\alpha(t)$ en fonction de termes de la forme $\int_K e^{i\epsilon t} |\phi_\epsilon(1)|^2 p_k(\epsilon) p_{k_0}(\epsilon) d\mu(\epsilon)$. J'espérais donc retrouver la même chose, mais rien de concluant pour le moment.

Je suis en train de reprendre les calculs pour comprendre ce qui semble poser problème. Numériquement, j'obtiens une fonction plutôt lentement croissante. Donc : soit il y a une erreur de calcul, où j'oublierais un exposant à un moment donné, soit que le comportement croissant ; soit il faut étudier plus en détails les coefficients d_{l_k} .

Corrélation spatiale des fonctions propres

Dans la première version du papier (rédigée cet été), figurent deux pistes à explorer pour continuer l'étude du RMS et du rapport de participation. Voici le paragraphe en question :

The first one is to obtain an approximate expression of the participation ratio by finding an upper and lower bound for $\int \phi(x, \epsilon)^* \phi(x', \epsilon) d\mu(\epsilon)$. In fact, it has been established ([11], [12]) for a lot of diffusive processes that the non-diagonal Green function $G(x, x', t)$ verifies :

$$F_t(c_1, c_2, x, x') \leq G(x, x', t) \leq F_t(c_3, c_4, x, x')$$

with

$$F_t(c_i, c_j, x, x') = \frac{c_i}{t^{d_s/2}} e^{-c_j \left(\frac{|x-x'|^{d_w}}{t} \right)^{\frac{1}{d_w-1}}}$$

where c_1, c_2, c_3, c_4 are positive constants, d_w the walk dimension which occurs in the dispersion relation $\langle x^2(t) \rangle = t^{2/d_w}$, d_s the spectral dimension such that $d_s = \frac{2d_f}{d_w}$ and d_f the Hausdorff dimension [13] of the space in which the diffusive process takes place. These bounds hold for diffusive processes; however, it could be possible to use the same logic for the case of Schroedinger's equation, since the difference with the diffusion equation lies in the factor i in the time derivative.

The second idea is the following : it is an empirical numerical result that, in the case of a euclidean manifold, the eigenfunctions $\{\phi(\mathbf{r}, \epsilon)\}$ of the Laplacian verify (see [12] and references therein) : $\overline{\phi(\mathbf{r}, \epsilon) \phi(\mathbf{r}', \epsilon)} = f\left(\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{l_\epsilon}\right)$, where $\overline{(\dots)}$ denotes the average over the points \mathbf{r}, \mathbf{r}' such as $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \text{constant}$ and f is some function. This has recently been used for a Laplacian defined on a fractal [12]. Assuming furthermore that, by analogy with the euclidean case, the relation between l_ϵ and ϵ is of the form : $l_\epsilon \propto \epsilon^\alpha$, we are able to obtain an analytical expression of the participation ratio, with the expected log-periodic feature.

A numerical simulation would therefore be interesting in order to verify this conjecture. This requires, in our case, a system such that the Laplacian has a triadic Cantor set spectrum, or any self-similar fractal spectrum.

Ce passage est-il toujours pertinent ?

Il me semble que la première piste, concernant l'encadrement de la fonction de Green, n'est plus nécessaire : cet encadrement ne mène finalement pas à des résultats très concluants.

Concernant la seconde piste, cela serait intéressant de voir si cela marche avec le modèle du tight-binding.

Références

- [1] H. Hiramoto, M. Kohmoto, International Journal of Modern Physics B, Vol. 6, Nos. 3 & 4 (1992) 281-320
- [2] G. Mantica, Physica D 109 (1997) 113-127