

# Synthèse : Dynamique quantique pour un spectre fractal - Coefficient de Thouless - Formule de Thouless et étude du RMS pour le tight-binding model

Ce document regroupe toutes les notes dont je dispose sur la dynamique quantique pour un spectre de Cantor triadique : le calcul de la probabilité de retour à l'origine pour un un paquet d'onde (cas général), l'étude du coefficient de Thouless, puis l'étude du modèle du tight-binding : formule de Thouless et étude du RMS.

Par la suite, on notera  $K$  l'ensemble de Cantor triadique, construit à partir du segment  $[0, 1]$ , et  $d\mu$  la mesure appropriée associée.  $d\mu$  vérifie :

$$\int_k f(x)d\mu(x) = \frac{1}{2} \int_k f\left(\frac{x}{3}\right) d\mu(x) + \frac{1}{2} \int_k f\left(\frac{x+2}{3}\right) d\mu(x) \quad (1)$$

## Probabilité de retour à l'origine

cf. correlation-fun-cantor.pdf

## Coefficient de Thouless

Le coefficient de Thouless pour un système quantique dont le spectre en énergie est  $K$  est défini par :  $\gamma(x) = \int_K \ln |y - x| d\mu(y)$ . Par application de (1), on montre que  $\gamma(x)$  vérifie les équations fonctionnelles suivantes :

$$\gamma(x/3) = \begin{cases} -\ln 3 + \frac{1}{2}\gamma(x) + \frac{1}{2} \int_K \ln |x - y - 2| d\mu(y) \\ -\ln 3 + \frac{1}{2}\gamma(x) + \frac{1}{2} \int_K \ln |x - y + 2| d\mu(y) \end{cases}$$

En appliquant une transformation de Mellin a ces égalités, on en déduit que  $\gamma$  comporte des oscillations log-périodiques (voir fig. 1). De plus,  $\gamma$  a la symétrie suivante :  $\gamma(x) = \gamma(1 - x)$ .

## Formule de Thouless et dynamique quantique dans le modèle du tight-binding - application au RMS

Modèle du tight-binding : on considère une lattice 1D constituée de  $N$  sites espacés de 1,  $N$  pouvant être infini a priori. 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 :  $\sum_k |\phi_n(k)|^2 < \infty$ .

## Formule de Thouless

On suppose ici que la lattice est finie :  $N < \infty$ .

Exprimée matriciellement dans la base  $\{|k\rangle\}_{1,N}$  avec  $|k\rangle = (\delta_{j,k})_{j=1,N}$ , l'équation de Schrodinger s'écrit :  $H_N\phi_n = E_n\phi_n$  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  $\phi_n$  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  $N = 2^m$  :

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

On a donc finalement :

$$\frac{1}{N} \ln |\phi_n(1)\phi_n(N)| = -\gamma(E_n) \quad (2)$$

On va maintenant appliquer cette formule a l'étude des propriétés dynamiques du paquet d'onde.

## Dynamique quantique d'un paquet d'onde - Etude du RMS

On s'intéresse maintenant à la dynamique d'un paquet d'onde  $\psi(t)$ , dont l'évolution est régie par l'équation de Schrodinger :  $i\frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t)$ , et localisé à  $t = 0$  en  $k = k_0$  :  $\langle k|\psi(t=0)\rangle = \delta(k - k_0)$ . Après un temps  $t$ , le système est dans l'état :  $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$ ; la valeur de la fonction d'onde en un site  $k$  est donné par :

$$|\psi(k, t)| = \int_K \phi_\epsilon(k_0)^* \phi_\epsilon(k) e^{-i\epsilon t}$$

Nous distinguons deux cas : une lattice finie et une lattice infinie. Dans chacun des cas, les propriétés dynamiques du système découlent du comportement des moments :

$$h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} \epsilon^k d\mu(\epsilon)$$

Cependant, dans le cas fini, on dispose de plus de la formule de Thouless démontrée au paragraphe précédent, ce qui donne plus d'informations.

### Cas d'une lattice infinie

On considère une lattice de taille infinie. Équation de Schrodinger discrétisée :

$$-\phi_E(k+1) - \phi_E(k-1) + 2\phi_E(k) + V(k)\phi_E(k) = E\phi_E(k)$$

avec  $\phi_E = (\phi_E(0), \phi_E(1), \dots, \phi_E(N), \dots)$  une solution propre associée à la valeur propre  $E$ ; on a ajouté le site 0 avec pour conditions :  $\phi_E(0) = 0$  et la normalisation :  $\sum |\phi_E(k)|^2 < \infty$ . On n'explicite pas le potentiel  $V$ ; l'on suppose uniquement que le spectre en énergie est un ensemble de Cantor triadique.

On utilise le formalisme des matrices de transfert pour calculer les  $\phi_E(k)$  de proche en proche : soient les matrices

$$M_k(E) = \begin{pmatrix} 2 + V_k - E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

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

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

La suite de polynômes  $\{p_k\}_k$  vérifie la relation de récurrence :

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

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

Comme, par hypothèse,  $\phi_E(0) = 0$ , on a pour toute énergie  $E$  et tout site  $k$  :

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

$\phi_E(1)$  est fixé par la condition de normalisation :

$$\phi_E(1) = \frac{1}{\sqrt{\sum_k |p_k(E)|^2}}$$

On peut aussi choisir d'imposer une valeur constante pour  $\phi_E(1)$ , et définir le spectre comme toutes les énergies  $E$  telles que l'orbite de  $(p_k(E))_k$  soit bornée (cf. [1], [2]) ; pour un potentiel de Fibonacci, le spectre est alors de type Cantor.

On peut donc voir les valeurs prises par fonctions propres  $\phi_E$  en les sites  $k$  comme des polynômes en  $E$ , que multiplie une certaine fonction ( $\frac{1}{\sqrt{\sum_k |p_k(E)|^2}}$  si l'on prend la condition de normalisation, ou une constante  $\phi_E(1) = c_0$  dans l'autre cas). Il suffit donc, comme on le verra sur l'exemple du RMS, d'étudier les fonctions :

$$h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} \epsilon^k d\mu(\epsilon)$$

Appliquons ceci à l'étude du RMS  $\Delta x(t)$ , défini par :

$$\Delta x(t)^2 = \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |\psi(k, t)|^2$$

On a :

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

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

Comme  $p_k$  est un polynôme de degré  $k$ , on peut développer  $p_k(\epsilon) p_{k_0}(\epsilon)$  en somme de monômes :  $p_k(\epsilon) p_{k_0}(\epsilon) = \sum_{j_k \leq k, j_{k_0} \leq k_0} c_{j_k, k} c_{j_{k_0}, k_0} \epsilon^{j_k + j_{k_0}}$ .

$\Delta x(t)^2$  est donc une combinaison linéaire de termes de la forme :  $h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} |\phi_{\epsilon}(1)|^2 \epsilon^k d\mu(\epsilon)$ . Il suffit donc d'étudier  $h_k(t)$  pour en déduire le comportement du RMS.

La transformée de Mellin de  $h_k(t)$  a des pôles de la forme :  $s_{m,k} = k + \frac{\ln 2}{\ln 3} + \frac{2i\pi m}{\ln 3}$  (voir détail du calcul en annexe) ; en conséquence,  $h_k(t)$  est de la forme :

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

avec  $\Gamma$  la fonction gamma d'Euler et  $r_{k,m}$  des coefficients complexes.

Donc,  $\Delta x(t)^2$  est une combinaison linéaire de termes de la forme  $t^{-k - \ln 2 / \ln 3} G_k(\ln t)$ , où les  $G_k(\ln t)$  sont des fonctions périodiques de  $\ln t$ , de période  $\ln 3$  :

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

Cette formule montre que  $\Delta x(t)$  a une composante log-périodique. Cependant, 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.

### Cas d'une lattice finie

On considère maintenant une lattice finie, constituée de  $N+1$  sites. On impose de plus les conditions aux limites (Dirichlet) :  $\phi_E(0) = 0$  et  $\phi_E(N) = a$ . Le raisonnement avec les matrices de transfert utilisé précédemment est toujours valide : les fonctions propres sont de la forme :  $\phi_E(k) = p_k(E)\phi_E(1)$ . Par ailleurs, la formule de Thouless donne :  $\frac{1}{N} \ln |\phi_E(1)\phi_E(N)| = -\gamma(E)$ , d'où :  $\phi_E(1) = \frac{1}{\phi_E(N)} e^{-N\gamma(E)} = \frac{1}{a} e^{-N\gamma(E)}$ . Finalement, on a l'expression suivante pour les fonctions d'onde :

$$\phi_E(k) = \frac{1}{a} p_k(E) e^{-N\gamma(E)}$$

De même que dans le cas infini, on peut ramener l'étude du RMS à l'étude des fonctions :  $h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} \epsilon^k e^{-N\gamma(\epsilon)} d\mu(\epsilon)$ . Le passage par les transformées de Mellin permettent de même de montrer que  $\Delta x(t)$  a une composante log-périodique.

### Résultats numériques

J'ai étudié numériquement deux situations, dans le cadre du modèle du tight-binding : un système avec un spectre de Cantor triadique, et un autre avec un potentiel de Fibonacci  $V$ . Dans le second cas, j'ai comparé les graphes du RMS issu du calcul théorique et du calcul direct, et testé la validité de la formule :  $\phi_E(k) = \frac{1}{a} p_k(E) e^{-N\gamma(E)}$ .

#### *RMS pour un spectre de Cantor triadique*

La figure 2 montre le graphe de la fonction  $h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} \epsilon^k d\mu(\epsilon)$  pour  $k = 0$  pour un spectre de Cantor triadique.

La figure 3 est le graphe du RMS dans le cas d'un spectre de Cantor, calculé à partir de l'expression simplifiée suivante pour les fonctions propres :

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

$$\text{et } \phi_E(1) = \frac{1}{\text{sqr}t \sum |p_k(E)|^2} = \sqrt{1 - E^2}.$$

#### *RMS pour un potentiel de Fibonacci; application de la formule de Thouless*

On étudie maintenant le cas d'un système régi par un potentiel  $V$  de Fibonacci, construit de la manière suivante : en notant  $F_N$  le  $N$ -ième nombre de la suite de Fibonacci et  $S_N$  la séquence  $(V_k)_{k=1, \dots, N}$  donnant la valeur  $V_k$  du potentiel en les sites  $1 \leq k \leq F_N$ , on construit les  $S_N$  récursivement :  $S_{N+1} = [S_N, S_{N-1}]$ , avec  $S_1 = V_A$  et  $S_2 = V_B$ . Pour les calculs, on a pris :  $V_A = -V_B = 0.6$ , et on construit une lattice de 233 sites. Le Hamiltonien  $H_N$  du système est représenté par une matrice tridiagonale, de la forme de celle donnée dans le paragraphe sur le coefficient de Thouless, et définie à partir du potentiel  $V$ . Les valeurs propres et vecteurs propres du système sont ceux de  $H_N$ . La figure 4 montre le spectre du système.

On construit par ailleurs les polynômes  $p_k(E)$  à partir de la relation de récurrence :

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

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

La figure 5 compare les graphes de  $|\phi_E(1)|$  avec le graphe de  $a * e^{-F_N|\gamma(E)|}$ , où  $a$  est un paramètre correspondant à la valeur de la fonction d'onde au site  $F_N$ . A une constante additive près, les graphes ont des structures proches : pics localisés aux mêmes énergies, même variations. Je ne sais pas d'où provient l'écart entre les graphes ; cela provient peut-être juste des approximations numériques faites pour le calcul de  $\gamma(E)$  par matlab.

La figure 6 compare les graphes de la fonction propre pour l'énergie la plus basse,  $\phi_{E_0}(k)$ , en fonction de  $k$ , avec le graphe obtenu avec la formule théorique :  $\phi_{E_0}(k) = \frac{1}{a}p_k(E_0)e^{-N\gamma(E_0)}$ .

Enfin, les figures 7,8 comparent les graphes du RMS calculé directement à partir des fonctions propres et obtenu avec la formule théorique  $\phi_E(k) = \frac{1}{a}p_k(E)e^{-N\gamma(E)}$  pour les fonctions propres.

## Annexe

### Calcul de $h_k(t)$

On calcule ici les fonctions de la forme :  $h_k(t) = \int_K e^{i\epsilon t} |\phi_\epsilon(1)|^2 \epsilon^k d\mu(\epsilon)$ , avec  $k \in \mathbb{N}$ .

Transformée de Mellin :

$$\begin{aligned} m_k(s) &= \int_0^\infty t^{s-1} h_k(t) dt \\ &= \int_K d\mu(\epsilon) |\phi_\epsilon(1)|^2 \epsilon^k \int_0^\infty t^{s-1} e^{i\epsilon t} dt \\ &= \Gamma(s) e^{-i\pi s/2} \underbrace{\int_K d\mu(\epsilon) |\phi_\epsilon(1)|^2 \epsilon^{k-s}}_{l_k(s)} \end{aligned}$$

avec  $\Gamma$  la fonction gamma d'Euler. Maintenant, en appliquant (1) :

$$\begin{aligned} l_k(s) &= \int_K d\mu(\epsilon) |\phi_\epsilon(1)|^2 \epsilon^{k-s} \\ &= \frac{1}{2} \int_K d\mu(\epsilon) |\phi_{\frac{\epsilon}{3}}(1)|^2 \frac{\epsilon^{k-s}}{3^{k-s}} + \frac{1}{2} \int_K d\mu(\epsilon) |\phi_{\frac{\epsilon+2}{3}}(1)|^2 \frac{(\epsilon+2)^{k-s}}{3^{k-s}} \end{aligned}$$

Par ailleurs :  $|\phi_\epsilon(1)|^2 = \frac{1}{\sum_k |p_k(\epsilon)|^2} = c_0 + \mathcal{O}(\epsilon)$ ,  $c_0$  étant une constante ; on fait donc l'approximation :  $|\phi_{\frac{\epsilon}{3}}(1)|^2 \frac{\epsilon^{k-s}}{3^{k-s}} \simeq |\phi_\epsilon(1)|^2 \frac{\epsilon^{k-s}}{3^{k-s}}$ . Si l'on choisit les conditions aux limites "mixtes" :  $\phi_\epsilon(0) = 0$ ,  $\phi_\epsilon(1) = a$  cela tient aussi. Donc :

$$\begin{aligned}
l_k(s) &\simeq c_0 \int_K d\mu(\epsilon) \epsilon^{k-s} \\
&= \frac{1}{2} \int_K d\mu(\epsilon) \frac{\epsilon^{k-s}}{3^{k-s}} + \underbrace{\frac{1}{2} \int_K d\mu(\epsilon) \frac{(\epsilon+2)^{k-s}}{3^{k-s}}}_{r_k(s)} \\
&= \frac{3^{s-k}}{2} l_k(s) + r_k(s)
\end{aligned}$$

$r_k(s)$  n'a pas de pôles car  $\epsilon + 2$  ne s'annule pas sur  $K$ . Donc :

$$l_k(s) = \frac{r_k(s)}{1 - 3^{s-k}/2}$$

Les pôles de  $l_k(s)$  sont de la forme :  $s_{m,k} = k + \frac{\ln 2}{\ln 3} + \frac{2i\pi m}{\ln 3}$ . En appliquant la transformée de Mellin inverse, on a donc :

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

## Références

- [1] D. Wurtz, T. Schneider, A. Politi, Phys. Lett. A vol 129 number 2, 9 May 1988
- [2] H. Hiramoto, M. Kohmoto, International Journal of Modern Physics B, Vol 6, Nos 3 - 4 (1992) 281-320

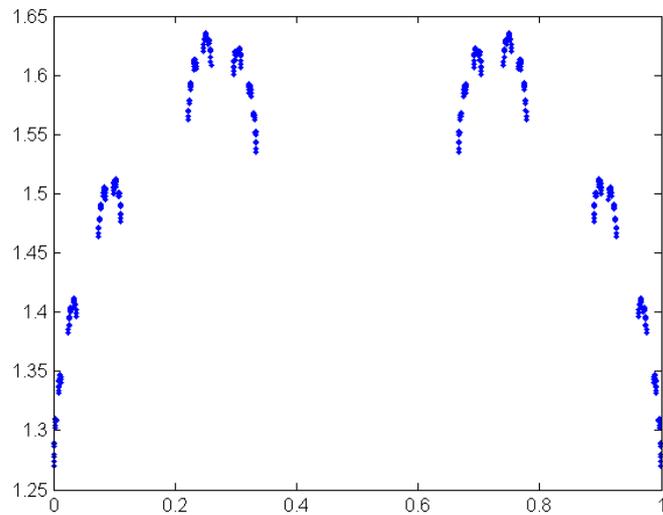


FIGURE 1 – coefficient de Thouless

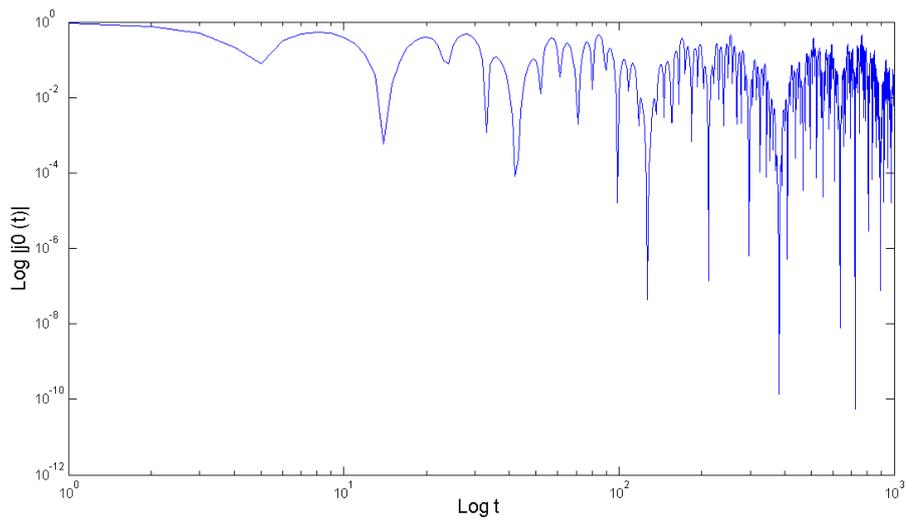


FIGURE 2 –  $j_0(t)$  pour un spectre de Cantor triadique

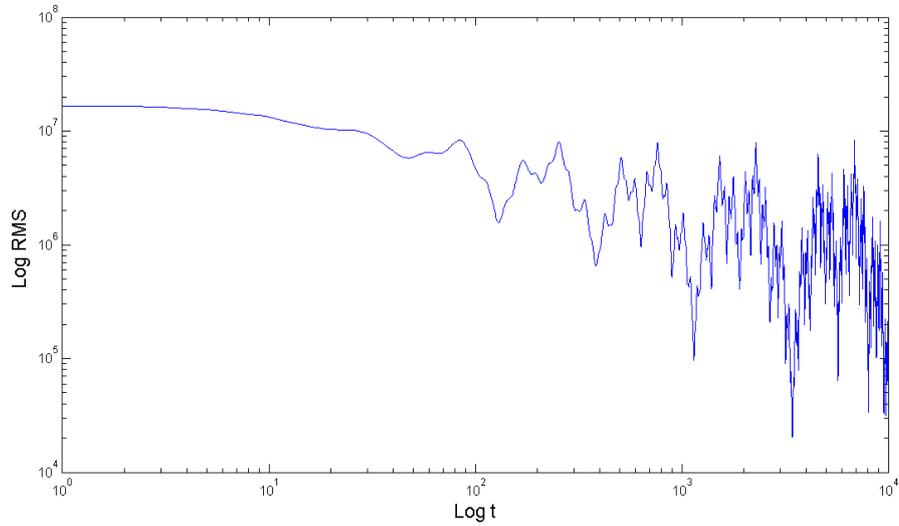


FIGURE 3 – Graphe théorique du RMS, avec une expression simplifiée, pour un spectre de Cantor triadique

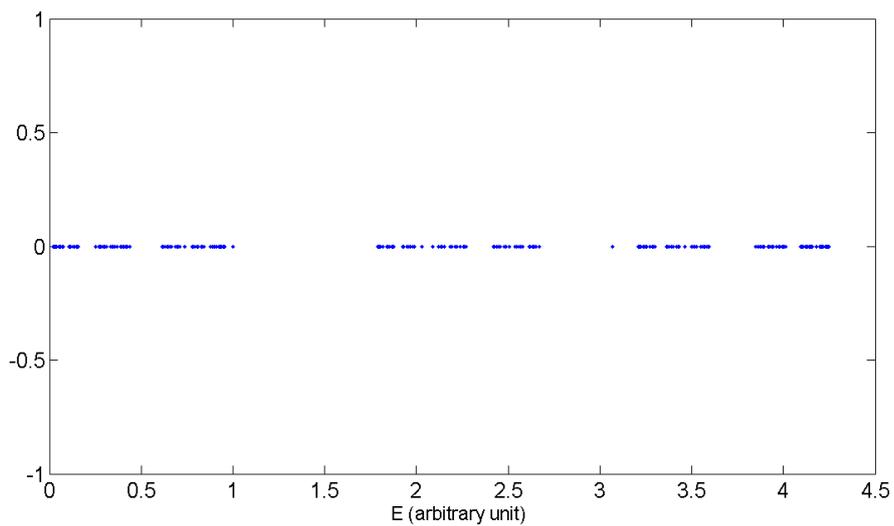


FIGURE 4 – Spectre associé au potentiel de Fibonacci, pour un système de 233 sites.

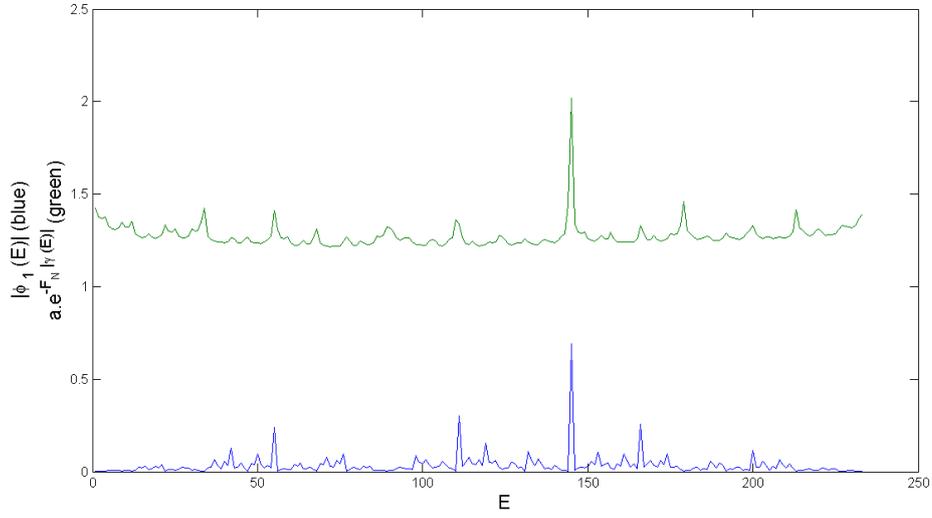


FIGURE 5 – Bleu : module de  $\phi_E(1)$ ; Vert :  $a * e^{-F_N |\gamma(E)|}$  pour un potentiel de Fibonacci.

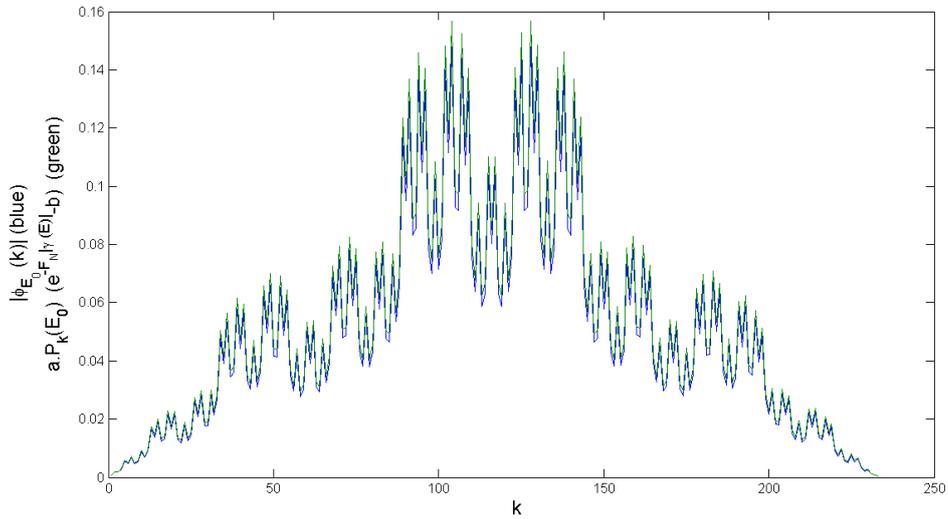


FIGURE 6 – Bleu : module de  $\phi_{E_0}(k)$ ; Vert :  $a * (e^{-F_N |\gamma(E_0)|} - b)$  pour un potentiel de Fibonacci.  $b$  est un paramètre correctif (pour compenser l'écart observé fig. 5)

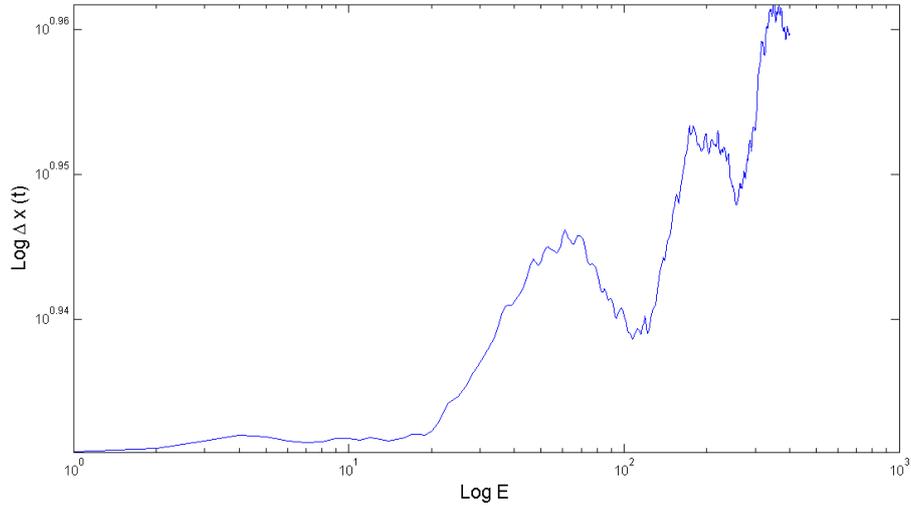


FIGURE 7 –  $\Delta x(t)$  pour un potentiel de Fibonacci

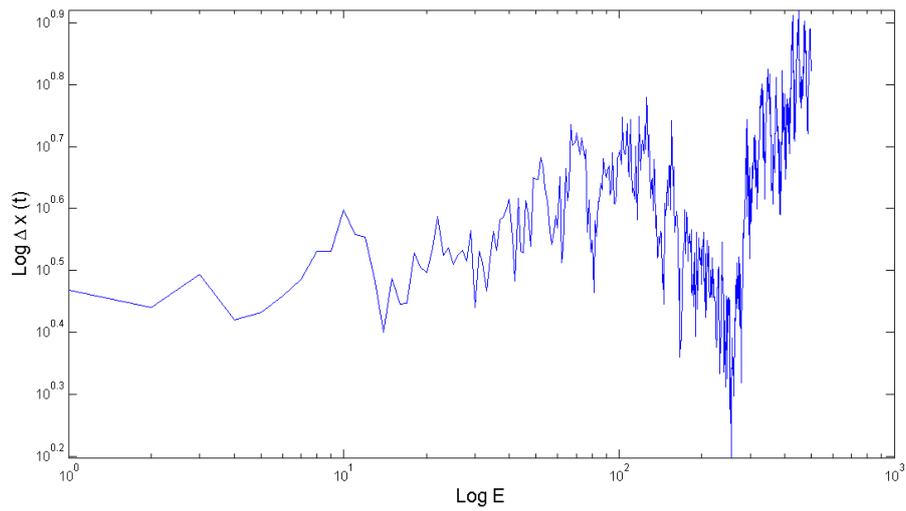


FIGURE 8 –  $\Delta x(t)$  théorique pour un potentiel de Fibonacci