1 Le Modèle de Maryland

Le modèle de Maryland, introduit dans les travaux de Simon et al. **[?]**, est un modèle quasi-périodique en une dimension (1D) qui étend le cadre du modèle tight-binding en incorporant un potentiel quasi-périodique à singularité. Contrairement au modèle d'Anderson avec un potentiel aléatoire ou au modèle d'Aubry-André avec un potentiel cosinusoïdal, le modèle de Maryland utilise un potentiel en tangente, $\lambda \tan(2\pi\beta n + \theta)$, qui présente des singularités périodiques.

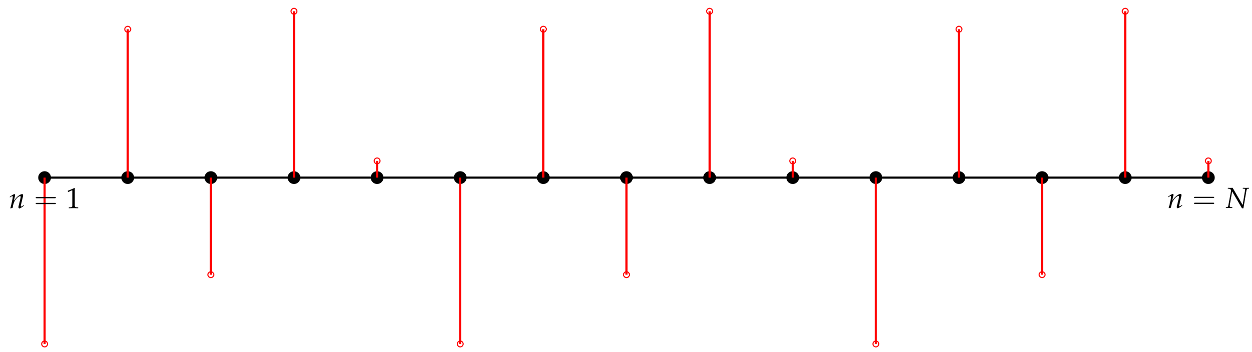

FIGURE 1 – Graphe du modèle de Maryland 1D : sites couplés avec un potentiel quasi-périodique singulier

1.1 Définition du Modèle

Le modèle de Maryland est un modèle tight-binding unidimensionnel avec un potentiel quasi-périodique singulier. L'Hamiltonien s'écrit dans la base des états localisés $\{|n\rangle\}$, où $|n\rangle$ représente un électron localisé sur le site n, avec

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$

$$H = \sum_n [\lambda \tan(2\pi\beta n + \theta)] |n\rangle \langle n| + t \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|)$$

où :

— $\lambda > 0$ est l'amplitude du potentiel quasi-périodique.

— β est un nombre irrationnel (par exemple, le nombre d'or $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$), assurant la quasi-périodicité.

— $\theta \in [0, 2\pi)$ est une phase initiale.

— $t > 0$ est l'amplitude de saut entre sites voisins.

Le modèle de Maryland se distingue du modèle d'Aubry-André, qui utilise un potentiel cosinusoïdal $V_n = \lambda \cos(2\pi\beta n + \theta)$. La fonction $\tan(2\pi\beta n + \theta)$ introduit des singularités périodiques, rendant le potentiel non borné pour certains n, contrairement au potentiel borné $\cos$ de l'Aubry-André. Ces singularités entraînent un spectre ponctuel pour tout $\lambda \neq 0$, comme nous le verrons.

1.2 Équation de Schrödinger et Ansatz de Fourier

L'objectif est de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire :
En projetant sur $\langle n|$, on obtient :

$$[\lambda \tan(2\pi\beta n + \theta)]\, \psi_n + t(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) = E\psi_n$$

Réarrangeons :

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} = \left[\frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta n + \theta)}{t}\right] \psi_n$$

Pour résoudre cette équation, nous utilisons un ansatz de type Bloch généralisé, adapté aux systèmes quasi-périodiques :

$$\psi_n = e^{i\alpha n}\phi(n)$$

où α est un paramètre de phase (analogue au vecteur d'onde dans un cristal périodique), et $\phi(n)$ est une fonction périodique de période liée à la quasi-périodicité de β. Puisque β est irrationnel, le potentiel $\tan(2\pi\beta n + \theta)$ est quasi-périodique, et $\phi(n)$ est généralement considérée comme une fonction lentement variable ou approximativement périodique dans un cadre effectif.

Note pédagogique: *L'ansatz $\psi_n = e^{i\alpha n}\phi(n)$ généralise la condition de Bloch pour les cristaux périodiques, où $\psi_n = e^{ikn}u(n)$ avec $u(n)$ périodique. Ici, α joue le rôle d'un quasi-vecteur d'onde, et $\phi(n)$ capture les variations dues au potentiel quasi-périodique.*

Substituons $\psi_n = e^{i\alpha n}\phi(n)$ dans l'équation de Schrödinger :

$$\psi_{n+1} = e^{i\alpha(n+1)}\phi(n+1), \quad \psi_{n-1} = e^{i\alpha(n-1)}\phi(n-1)$$

L'équation devient :

$$e^{i\alpha(n+1)}\phi(n+1) + e^{i\alpha(n-1)}\phi(n-1) = \left[\frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta n + \theta)}{t}\right] e^{i\alpha n}\phi(n)$$

Multiplions par $e^{-i\alpha n}$ pour simplifier :

$$e^{i\alpha}\phi(n+1) + e^{-i\alpha}\phi(n-1) = \frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta n + \theta)}{t}\phi(n)$$

1.3 Problème de Rotation de Phase et Cocycle Analytique

Définissons $\phi_n = \phi(n)$ et réécrivons l'équation sous forme matricielle. Posons $\vec{u}_n = \begin{pmatrix} \phi_n \\ \phi_{n-1} \end{pmatrix}$. L'équation de récurrence s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \phi_{n+1} \\ \phi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E-\lambda \tan(2\pi\beta n+\theta)}{te^{i\alpha}} & -e^{-i\alpha} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_n \\ \phi_{n-1} \end{pmatrix}$$

Soit la matrice de transfert :

$$M_n = \begin{pmatrix} \frac{E-\lambda \tan(2\pi\beta n+\theta)}{te^{i\alpha}} & -e^{-i\alpha} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

La dynamique est donnée par le produit :

$$\vec{u}_n = \left(\prod_{k=1}^{n} M_k\right) \vec{u}_0$$

*Ce produit de matrices définit un **cocycle analytique**, où M_n dépend de $\tan(2\pi\beta n + \theta)$, et β irrationnel induit une rotation de phase quasi-périodique.*

***Note pédagogique:** Le cocycle analytique décrit l'évolution de la fonction d'onde comme une transformation linéaire itérée, où chaque matrice M_n dépend de la phase quasi-périodique $2\pi\beta n + \theta$. La théorie des cocycles est un outil puissant pour analyser les systèmes quasi-périodiques, car elle relie la dynamique à des transformations géométriques comme les rotations ou les transformations de Möbius.*

1.4 Spectre du Modèle de Maryland

*Selon Simon et al. [?], le spectre du modèle de Maryland pour $\lambda \neq 0$ et β irrationnel est **ponctuel** (c'est-à-dire constitué uniquement de valeurs propres discrètes, sans partie continue). Contrairement au modèle d'Aubry-André, où une transition de localisation se produit à $\lambda = 2t$, le modèle de Maryland présente une localisation forte pour tout $\lambda \neq 0$, due aux singularités du potentiel $\tan$. Le spectre est :*

- ***Ponctuel** : Les énergies propres E forment un ensemble dénombrable, sans bande continue.*
- ***Dense** : Pour β irrationnel, le spectre est dense dans un intervalle, mais chaque état est localisé.*

***Note pédagogique:** La ponctualité du spectre résulte des singularités du potentiel $\tan$, qui perturbent fortement la propagation des électrons, même pour de faibles λ. Cela contraste avec le modèle d'Aubry-André, où le spectre peut être continu pour $\lambda < 2t$.*

1.5 Forme des Solutions

Les solutions de l'équation de Schrödinger peuvent être exprimées comme :

$$\psi_n = e^{i\alpha n} \prod_{j=1}^{n} \left(\frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta j + \theta)}{2t} \right)$$

Cette forme découle de la récurrence de la fonction d'onde. En posant $z_n = \frac{\psi_n}{\psi_{n-1}}$, l'équation de récurrence donne :

$$z_n = \frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta n + \theta)}{2te^{i\alpha}}$$

Ainsi :

$$\psi_n = \psi_0 \prod_{j=1}^{n} z_j = \psi_0 e^{i\alpha n} \prod_{j=1}^{n} \left(\frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta j + \theta)}{2t} \right)$$

Cette solution est liée à la théorie des cocycles, car le produit $\prod_{j=1}^{n} M_j$ peut être vu comme une transformation de Möbius itérée sur le plan complexe. Chaque matrice $M_n \in SL(2, \mathbb{C})$ agit comme une transformation de Möbius :

$$z \mapsto \frac{az + b}{cz + d}, \quad \textit{avec} \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = M_n$$

Les singularités de $\tan(2\pi\beta n + \theta)$ amplifient les fluctuations, conduisant à une localisation forte.

1.6 Construction Itérative de la Fonction d'Onde

Pour construire ψ_n itérativement, partons de l'équation de récurrence :

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} = \left[\frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta n + \theta)}{t} \right] \psi_n$$

Initialisons avec ψ_0 et ψ_1. Puis, pour chaque $n \geq 1$:

$$\psi_{n+1} = \left[\frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta n + \theta)}{t} \right] \psi_n - \psi_{n-1}$$

En utilisant l'ansatz $\psi_n = e^{i\alpha n}\phi_n$, nous résolvons pour ϕ_n, puis reconstruisons ψ_n. La forme explicite donnée ci-dessus est obtenue en itérant cette récurrence.

1.7 Normalisation et Localisation

Pour analyser la localisation, calculons l'amplitude au carré $|\psi_n|^2$. À partir de :

$$\psi_n = e^{i\alpha n} \prod_{j=1}^{n} \left(\frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta j + \theta)}{2t} \right)$$

on a :

$$|\psi_n|^2 = \left| \prod_{j=1}^{n} \frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta j + \theta)}{2t} \right|^2 = \prod_{j=1}^{n} \left(\frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta j + \theta)}{2t} \right)^2$$

L'exposant de Lyapunov λ est donné par :

$$\lambda = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln |\psi_n| = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \ln \left| \frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta j + \theta)}{2t} \right|$$

*Puisque β est irrationnel, la séquence $\{2\pi\beta j + \theta\} \mod 2\pi$ est uniformément distribuée sur $[0, 2\pi)$. Par le théorème ergodique de Birkhoff [**?**], on a :*

$$\lambda = \int_0^1 \ln \left| \frac{E - \lambda \tan(2\pi x)}{2t} \right| dx$$

Pour $|\psi_n|^2$, on calcule :

$$\frac{1}{n} \ln |\psi_n|^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \ln \left(\frac{E - \lambda \tan(2\pi\beta j + \theta)}{2t} \right)^2 \approx \int_0^1 \ln \left(\frac{E - \lambda \tan(2\pi x)}{2t} \right)^2 dx$$

Pour évaluer la normalisation, la condition est $\sum_n |\psi_n|^2 < \infty$. Puisque $\lambda > 0$ (dû aux singularités de $\tan$), $|\psi_n|^2 \sim e^{-2\lambda n}$ décroît exponentiellement, assurant la normalisabilité des états.

*Pour démontrer que $\lambda > 0$, notons que $\tan(2\pi x)$ diverge périodiquement, rendant $|E - \lambda \tan(2\pi x)|$ grand pour certains x. L'intégrale donne typiquement $\lambda > 0$, car les contributions des singularités dominent. Une analyse rigoureuse (voir [**?**]) montre que pour $\lambda \neq 0$ et β irrationnel, λ est strictement positif, indiquant une localisation forte.*