

Méthode des perturbations sur la chaîne hiérarchique

Nicolas Macé

lundi 15 septembre 2014

1 Perturbation aux premiers ordres

On considère le Hamiltonien :

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad (1)$$

avec λ un petit paramètre.

On considère $|\psi\rangle$, un vecteur propre du Hamiltonien complet. On peut le développer en puissances de λ :

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \lambda |\psi^1\rangle + \lambda^2 |\psi^2\rangle + \dots \quad (2)$$

Par ailleurs on peut faire agir $|\psi\rangle$ sur le Hamiltonien complet, et développer le résultat en puissances de λ :

$$H |\psi\rangle = \left(W^{(0)} + \lambda W^{(1)} + \lambda^2 W^{(2)} + \dots \right) |\psi\rangle \quad (3)$$

En utilisant que $H = H_0 + \lambda H_1$ on obtient

$$H_0 |\psi^0\rangle = W^{(0)} |\psi^0\rangle \quad (4)$$

$$H_0 |\psi^1\rangle + H_1 |\psi^0\rangle = W^{(0)} |\psi^1\rangle + W^{(1)} |\psi^0\rangle \quad (5)$$

$$H_0 |\psi^2\rangle + H_1 |\psi^1\rangle = W^{(0)} |\psi^2\rangle + W^{(1)} |\psi^1\rangle + W^{(2)} |\psi^0\rangle \quad (6)$$

$$\text{etc.} \quad (7)$$

Perturbation à l'ordre 0

Soit E_n une énergie propre du Hamiltonien non perturbé H_0 . On appelle $|n, r\rangle$ le $r^{\text{ième}}$ vecteur propre associé à E_n . On suppose que $|\psi^0\rangle \rightarrow |\psi_{n,q}^0\rangle$ vit dans le sous-espace propre de H_0 associé à E_n . Alors, la première des relations précédentes nous dit que

$$W_{n,q}^{(0)} = E_n \quad (8)$$

À cet ordre, les énergies propres de H sont celles de H_0 , et les fonctions propres aussi.

Perturbation à l'ordre 1

En prenant le produit scalaire de la deuxième relation avec $|n, r\rangle$, on obtient

$$\langle n, r | H_1 | \psi_{n,q}^0 \rangle = W_{nq}^{(1)} \langle n, r | \psi_{nq}^0 \rangle \quad (9)$$

par conséquent, $|\psi_{n,q}^0\rangle$ est un vecteur propre de la restriction de H_1 au sous-espace propre de H_0 d'énergie E_n , et $W_{n,q}^{(1)}$ est la valeur propre associée.

À cet ordre, les énergies propres sont donc les

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n,q} &= W_{n,q}^{(0)} + \lambda W_{n,q}^{(1)} \\ \varepsilon_{n,q} &= E_n + \lambda W_{n,q}^{(1)} \end{aligned}$$

et les vecteurs propres associés sont les $|\psi_{n,q}^0\rangle$, combinaisons linéaires des $|n, r\rangle$. Les coefficients de $|\psi_{n,q}^0\rangle$ ainsi que les $W_{n,q}^{(1)}$ sont déterminés par l'équation aux valeurs propres (9) (aussi appelée équation séculaire, parce qu'elle a servi en premier à Lagrange et Laplace pour déterminer perturbativement l'effet à long terme des interactions gravitationnelles entre les planètes du système solaire dans le cadre de la mécanique newtonienne).

Perturbation à l'ordre 2

Soit $P_{n,q}$ le projecteur orthogonal à $|\psi_{n,q}^0\rangle$. On réutilise la deuxième relation pour obtenir

$$P_{n,q} |\psi_{n,q}^1\rangle = (E_n - H_0)^{-1} P_{n,q} H_1 |\psi_{n,q}^0\rangle \quad (10)$$

Comme le vecteur propre total $|\psi_{n,q}\rangle$ est de norme 1, $\Re \langle \psi_{n,q}^0 | \psi_{n,q}^1 \rangle = 0$. Par ailleurs, on peut choisir la phase de $|\psi_{n,q}\rangle$ de telle sorte que $\Im \langle \psi_{n,q}^0 | \psi_{n,q}^1 \rangle = 0$. Cela étant fait, $P_{n,q} |\psi_{n,q}^1\rangle = |\psi_{n,q}^1\rangle$ et

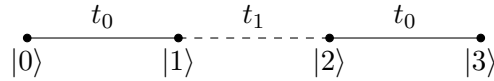
$$|\psi_{n,q}^1\rangle = (E_n - H_0)^{-1} P_{n,q} H_1 |\psi_{n,q}^0\rangle \quad (11)$$

À cet ordre, le vecteur propre est donc

$$\begin{aligned} |\psi_{n,q}\rangle &= |\psi_{n,q}^0\rangle + \lambda |\psi_{n,q}^1\rangle \\ |\psi_{n,q}\rangle &= |\psi_{n,q}^0\rangle + \lambda (E_n - H_0)^{-1} P_{n,q} H_1 |\psi_{n,q}^0\rangle \end{aligned}$$

À cet ordre les valeurs propres sont aussi modifiées par l'ajout de $W_{n,q}^{(2)}$, que je ne vais pas calculer ici ! Si on voulait le faire, il faudrait prendre le produit scalaire par $|n, r\rangle$ de la troisième relation.

2 Application à la chaîne hiérarchique



On écrit

$$H = H_0 + H_1 \quad (12)$$

où H_0 contient les termes de saut sur les sites liés par le couplage t_0 , et H_1 les termes de saut sur les sites liés par le couplage t_1 . Ici, le petit paramètre est $\lambda = t_1/t_0$.

Perturbation à l'ordre 0

Les états propres de H_0 sont

$$\begin{aligned} |0, \pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \pm |1\rangle) \\ |2, \pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle \pm |3\rangle) \end{aligned}$$

Les états $|i, +\rangle$ sont associés à l'énergie t_0 , tandis que les états $|i, -\rangle$ sont associés à l'énergie $-t_0$.

Perturbation à l'ordre 1

On cherche maintenant les valeurs propres des restrictions $Q_{\pm} H_1 Q_{\pm}$ de H_1 aux deux sous-espaces propres de H_0 , associés à $\pm t_0$.

On a

$$\begin{aligned} H_{\text{eq}}^{\pm} &= H_0 + Q_{\pm} H_1 Q_{\pm} \\ &= H_0 + \frac{t_1}{2} (|0, \pm\rangle \langle 1, \pm| + |1, \pm\rangle \langle 0, \pm|) \end{aligned}$$

Les états propres que l'on va déterminer seront ceux que l'on avait noté $|\psi_{n,q}^0\rangle$ précédemment. Ici, $n = \pm$ et $q = \pm$. On a

$$\begin{aligned} |\psi_{++}^0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, +\rangle + |1, +\rangle) \leftrightarrow W_+^{(0)} + W_{++}^{(1)} = +t_0 + \frac{t_1}{2} \\ |\psi_{+-}^0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, +\rangle - |1, +\rangle) \leftrightarrow W_+^{(0)} + W_{+-}^{(1)} = +t_0 - \frac{t_1}{2} \\ |\psi_{-+}^0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, -\rangle - |1, -\rangle) \leftrightarrow W_-^{(0)} + W_{-+}^{(1)} = -t_0 + \frac{t_1}{2} \\ |\psi_{--}^0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, -\rangle + |1, -\rangle) \leftrightarrow W_-^{(0)} + W_{--}^{(1)} = -t_0 - \frac{t_1}{2} \end{aligned}$$

Perturbation à l'ordre 2

On calcule maintenant le déplacement des vecteurs propres à l'ordre 2, $|\psi_{\pm\pm}^1\rangle$. Ici, la formule (11) donne

$$|\psi_{\varepsilon_1\varepsilon_2}^1\rangle = \sum_{(\varepsilon'_1, \varepsilon'_2) \neq (\varepsilon_1, \varepsilon_2)} \frac{\langle \psi_{\varepsilon'_1\varepsilon'_2}^0 | H_1 | \psi_{\varepsilon_1\varepsilon_2}^0 \rangle}{E_{\varepsilon_1\varepsilon_2} - E_{\varepsilon'_1\varepsilon'_2}} |\psi_{\varepsilon'_1\varepsilon'_2}^0\rangle \quad (13)$$

On obtient

$$\begin{aligned} |\psi_{++}^1\rangle &= -\frac{t_1}{4t_0} |\psi_{-+}^0\rangle \\ |\psi_{+-}^1\rangle &= +\frac{t_1}{4t_0} |\psi_{--}^0\rangle \\ |\psi_{-+}^1\rangle &= +\frac{t_1}{4t_0} |\psi_{++}^0\rangle \\ |\psi_{--}^1\rangle &= -\frac{t_1}{4t_0} |\psi_{+-}^0\rangle \end{aligned}$$

Soit, dans la base $|0, +\rangle, |0, -\rangle, |1, +\rangle, |1, -\rangle$:

$$|++\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ 1, -\frac{t_1}{4}, 1, \frac{t_1}{4} \right\} \quad (14)$$

$$|+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ 1, \frac{t_1}{4}, -1, \frac{t_1}{4} \right\} \quad (15)$$

$$|-+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{t_1}{4}, 1, \frac{t_1}{4}, -1 \right\} \quad (16)$$

$$|--\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ -\frac{t_1}{4}, 1, \frac{t_1}{4}, 1 \right\} \quad (17)$$

(À vérifier avec la méthode des perturbations)

$$|\psi_{+++}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, ++\rangle + |1, ++\rangle) \quad (18)$$

$$|\psi_{++-}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, ++\rangle - |1, ++\rangle) \quad (19)$$

$$|\psi_{+-+}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, +- \rangle - |1, +- \rangle) \quad (20)$$

$$|\psi_{+--}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, +- \rangle + |1, +- \rangle) \quad (21)$$

$$|\psi_{-++}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, -+ \rangle + |1, -+ \rangle) \quad (22)$$

$$|\psi_{-+-}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, -+ \rangle - |1, -+ \rangle) \quad (23)$$

$$|\psi_{--+}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, -- \rangle - |1, -- \rangle) \quad (24)$$

$$|\psi_{---}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, -- \rangle + |1, -- \rangle) \quad (25)$$

$$|\psi_{+++}^1\rangle = -\frac{t_2}{4t_1} |\psi_{+-+}^0\rangle + \frac{t_2}{8t_0} (+|\psi_{-++}^0\rangle - |\psi_{--+}^0\rangle) \quad (26)$$

$$|\psi_{++-}^1\rangle = +\frac{t_2}{4t_1} |\psi_{+--}^0\rangle + \frac{t_2}{8t_0} (-|\psi_{-+-}^0\rangle + |\psi_{---}^0\rangle) \quad (27)$$

$$|\psi_{+-+}^1\rangle = +\frac{t_2}{4t_1} |\psi_{+++}^0\rangle + \frac{t_2}{8t_0} (-|\psi_{-++}^0\rangle + |\psi_{--+}^0\rangle) \quad (28)$$

$$|\psi_{+--}^1\rangle = -\frac{t_2}{4t_1} |\psi_{++-}^0\rangle + \frac{t_2}{8t_0} (+|\psi_{-+-}^0\rangle - |\psi_{---}^0\rangle) \quad (29)$$

$$|\psi_{-++}^1\rangle = -\frac{t_2}{4t_1} |\psi_{--+}^0\rangle + \frac{t_2}{8t_0} (-|\psi_{+++}^0\rangle + |\psi_{+-+}^0\rangle) \quad (30)$$

$$|\psi_{-+-}^1\rangle = +\frac{t_2}{4t_1} |\psi_{---}^0\rangle + \frac{t_2}{8t_0} (+|\psi_{++-}^0\rangle - |\psi_{+--}^0\rangle) \quad (31)$$

$$|\psi_{--+}^1\rangle = +\frac{t_2}{4t_1} |\psi_{-++}^0\rangle + \frac{t_2}{8t_0} (+|\psi_{+++}^0\rangle - |\psi_{+-+}^0\rangle) \quad (32)$$

$$|\psi_{---}^1\rangle = -\frac{t_2}{4t_1} |\psi_{-+-}^0\rangle + \frac{t_2}{8t_0} (-|\psi_{++-}^0\rangle + |\psi_{+--}^0\rangle) \quad (33)$$