Méthode des perturbations sur la chaîne hiérarchique

Nicolas Macé

lundi 15 septembre 2014

1 Perturbation aux premiers ordres

On considère le Hamiltonien :

$$H = H_0 + \lambda H_1 \tag{1}$$

avec λ un petit paramètre.

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

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \lambda |\psi^1\rangle + \lambda^2 |\psi^2\rangle + ... \tag{2}$$

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

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

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

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

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

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

$$\text{etc.} \tag{7}$$

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 $|\psi^0\rangle \to |\psi^0_{n,q}\rangle$ vit dans le sous-espace propre de H_0 associé à E_n. Alors, la première des relations précédentes nous dit que

$$W^{(0)}_{n,q} = E_n \tag{8}$$

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

$$\langle n, r|H_1|\psi^0_{n,q}\rangle = W^{(1)}_{nq} \langle n, r|\psi^0_{nq}\rangle \tag{9}$$

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

À cet ordre, les énergies propres sont donc les

$$\varepsilon_{n,q} = W^{(0)}_{n,q} + \lambda W^{(1)}_{n,q}$$

$$\varepsilon_{n,q} = E_n + \lambda W^{(1)}_{n,q}$$

et les vecteurs propres associés sont les $|\psi^0_{n,q}\rangle$, combinaisons linéaires des $|n,r\rangle$. Les coefficients de $|\psi^0_{n,q}\rangle$ ainsi que les $W^{(1)}_{n,q}$ 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 $|\psi^0_{n,q}\rangle$. On réutilise la deuxième relation pour obtenir

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

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

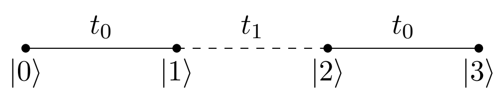
$$|\psi^1_{n,q}\rangle = (E_n - H_0)^{-1} P_{n,q} H_1\, |\psi^0_{n,q}\rangle \tag{11}$$

À cet ordre, le vecteur propre est donc

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

À cet ordre les valeurs propres sont aussi modifées par l'ajout de $W^{(2)}_{n,q}$, 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

$$H = H_0 + H_1 \tag{12}$$

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

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

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

$$|\psi^0_{++}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0,+\rangle + |1,+\rangle\right) \leftrightarrow W^{(0)}_{+} + W^{(1)}_{++} = +t_0 + \frac{t_1}{2}$$
$$|\psi^0_{+-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0,+\rangle - |1,+\rangle\right) \leftrightarrow W^{(0)}_{+} + W^{(1)}_{+-} = +t_0 - \frac{t_1}{2}$$
$$|\psi^0_{-+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0,-\rangle - |1,-\rangle\right) \leftrightarrow W^{(0)}_{-} + W^{(1)}_{-+} = -t_0 + \frac{t_1}{2}$$
$$|\psi^0_{--}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0,-\rangle + |1,-\rangle\right) \leftrightarrow W^{(0)}_{-} + W^{(1)}_{--} = -t_0 - \frac{t_1}{2}$$

Perturbation à l'ordre 2

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

$$|\psi^1_{\varepsilon_1\varepsilon_2}\rangle = \sum_{(\varepsilon_1',\varepsilon_2')\neq(\varepsilon_1,\varepsilon_2)} \frac{\langle\psi^0_{\varepsilon_1'\varepsilon_2'}|H_1|\psi^0_{\varepsilon_1\varepsilon_2}\rangle}{E_{\varepsilon_1\varepsilon_2} - E_{\varepsilon_1'\varepsilon_2'}}\,|\psi^0_{\varepsilon_1'\varepsilon_2'}\rangle \tag{13}$$

On obtient

$$|\psi^1_{++}\rangle = -\frac{t_1}{4t_0}\,|\psi^0_{-+}\rangle$$
$$|\psi^1_{+-}\rangle = +\frac{t_1}{4t_0}\,|\psi^0_{--}\rangle$$
$$|\psi^1_{-+}\rangle = +\frac{t_1}{4t_0}\,|\psi^0_{++}\rangle$$
$$|\psi^1_{--}\rangle = -\frac{t_1}{4t_0}\,|\psi^0_{+-}\rangle$$

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

$$|{+}{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{1, -\frac{\mathrm{t1}}{4}, 1, \frac{\mathrm{t1}}{4}\right\} \tag{14}$$
$$|{+}{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{1, \frac{\mathrm{t1}}{4}, -1, \frac{\mathrm{t1}}{4}\right\} \tag{15}$$
$$|{-}{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\frac{\mathrm{t1}}{4}, 1, \frac{\mathrm{t1}}{4}, -1\right\} \tag{16}$$
$$|{-}{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{-\frac{\mathrm{t1}}{4}, 1, \frac{\mathrm{t1}}{4}, 1\right\} \tag{17}$$

(À vérifier avec la méthode des perturbations)

$$|\psi^1_{+++}\rangle = -\frac{t_2}{4t_1}\,|\psi^0_{+-+}\rangle + \frac{t_2}{8t_0}\left(+|\psi^0_{-++}\rangle - |\psi^0_{--+}\rangle\right) \tag{18}$$
$$|\psi^1_{++-}\rangle = +\frac{t_2}{4t_1}\,|\psi^0_{+--}\rangle + \frac{t_2}{8t_0}\left(-|\psi^0_{-+-}\rangle + |\psi^0_{---}\rangle\right) \tag{19}$$
$$|\psi^1_{+-+}\rangle = +\frac{t_2}{4t_1}\,|\psi^0_{+++}\rangle + \frac{t_2}{8t_0}\left(-|\psi^0_{-++}\rangle + |\psi^0_{--+}\rangle\right) \tag{20}$$
$$\tag{21}$$