

Eléments de correction du complément.

1) Par définition et en utilisant le caractère auto-adjoint de l'hamiltonien, nous obtenons;

$$\begin{vmatrix} -E & -B & -A \\ -B & -E & -A \\ -A & -A & -E \end{vmatrix} = 0 \tag{1}$$

2) Les valeurs propres sont racines du polynome caractéristique, obtenu en annulant le déterminant: $Det(H - EI) = 0$. En utilisant une formule de développement selon la troisième colonne nous trouvons:

$$Det(H - EI) = -A(AB - AE) + A(EA - BA) - E(E^2 - B^2) = 0.$$

La valeur propre $E=B$ est manifestement solution et peut se factoriser pour donner:

$$Det(H - EI) = (E - B)(A^2 + A^2 - E(E + B)) = -(E - B)(E^2 + EB - 2A^2)$$

La racine du discriminant de l'équation du second degré s'écrit:

$$\sqrt{\Delta} = (B^2 + 8A^2)^{1/2} = (9A^2 + 2At + t^2)^{1/2} = 3A(1 + 2t/9A + t^2/9A^2)^{1/2} \approx 3A + t/3 + \dots$$

Nous obtenons donc les nouvelles valeurs propres:

$$E = -2A - 2t/3, \quad E = A - t/3, \quad E = A + t$$

Les racines s'organisent donc selon le diagramme de la Figure (Gauche)1c ci-dessous.

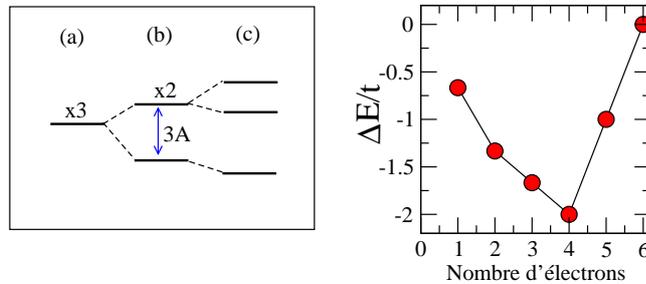


FIG. 1: (Gauche) Evolution des niveaux d'énergie de (a) sans interaction entre les sites, (b) après avoir branché l'interaction "A" entre les sites dans le cas de la molécule en triangle, et (c) après distorsion de la molécule (dans la limite où $t \ll A$, la figure n'est pas à l'échelle). (Droite) Evolution de l'énergie électronique sous distorsion ΔE (en unité de t) en fonction du remplissage des niveaux.

3) Regardons l'évolution après distorsion de l'énergie électronique en fonction du nombre d'électrons (deux électrons maximum de spin opposés par niveau d'énergie). Nous pouvons tracer en particulier la différence d'énergie: $\Delta E = E_{\text{basse symétrie}} - E_{\text{haute symétrie}}$ en fonction du nombre d'électrons. Nous obtenons la figure 1(Droite)(ronds rouges). Comme nous le voyons il peut y avoir stabilisation de la molécule sous déformation car l'énergie électronique diminue. D'autres termes dans l'énergie (répulsion entre les noyaux, etc.) peuvent cependant venir modérer ou annuler cet effet en réalité.

Supposons maintenant qu'un photon incident assure la promotion d'un électron des niveaux $(-2A-2t/3)$ ou $(A-t/3)$ vers le niveau $(A+t)$. Cet électron en $(A+t)$ déstabilise le système déformé par rapport au système à haute symétrie, déplaçant vers les énergies positives la courbe tracée en question précédente. Dans ce cas, la molécule va redevenir parfaitement symétrique. Le même raisonnement peut être conduit en injectant un électron par une pointe STM dans un des niveaux de plus haute énergie.

Nous voyons donc sur cette expérience "de principe" qu'on peut induire un mouvement de la molécule (ici un passage de la forme non-symétrique à la forme symétrique) à l'aide d'une source de lumière ou d'une pointe STM (voir Yu, Nakano, Ikeda, Nature 2003, dans l'énoncé.)