

On suppose que toutes les fonctions d'onde des singulets s'écrivent sous la forme :

$$\lambda|g\bar{g}| + \mu|u\bar{u}| + \nu(|g\bar{u}| + |u\bar{g}|)$$

On a mis en colonne les projections de chaque fonction d'onde.

On note :

- $\Psi_f$  la fonction d'onde du fondamental,
- $\Psi_u$  la fonction d'onde du singlet de type u,
- $\Psi_e$  la fonction d'onde du singlet excité.

On a donc par exemple :

$$\Psi_f = \lambda_f|g\bar{g}| + \mu_f|u\bar{u}| + \nu_f(|g\bar{u}| + |u\bar{g}|)$$

$E_1$  désigne l'énergie du singlet fondamental de type "g".  $E_2$  désigne l'énergie du triplet de  $M_s$

0.  $E_1$  désigne l'énergie du singlet de type "u".  $E_1$  désigne l'énergie du singlet excité de type "g".

On note :

- $\Psi_{g,n} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\bar{b}| + |b\bar{a}|)$
- $\Psi_{g,i} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\bar{a}| + |b\bar{b}|)$
- $\Psi_{u,i} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\bar{a}| - |b\bar{b}|)$

De plus on a :

- $|g\bar{g}| = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{g,n} + \Psi_{g,i})$
- $|u\bar{u}| = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{g,n} - \Psi_{g,i})$

-

$$|g\bar{u}| + |u\bar{g}| = \sqrt{2}\Psi_{u,i} \tag{1}$$

## 1 Lancement du programme

Le programme se lance de la manière suivante :

`./extraction_propre.pl fichier_coeff_energie`

où fichier\_coeff\_energie est de la forme suivante :

$\lambda_f$	$\lambda_u$	$\lambda_e$
$\mu_f$	$\mu_u$	$\mu_e$
$\nu_f$	$\nu_u$	$\nu_e$
$E_1$		
$E_2$		
$E_3$		
$E_4$		

## 2 Fonctionnement

Le programme commence par lire les coefficients et les énergies dans le fichier d'entrée.

Ensuite, les énergies sont remises à zéro en prenant le triplet comme référence, elles sont également converties en  $cm^{-1}$ .

Le coefficient  $\nu$  est multiplié par  $\sqrt{2}$  pour prendre en compte ce facteur dû à l'équation 1 (sinon on sous estime le poids de la forme ionique de symétrie u).

On calcule la norme de chaque vecteur puis on divise chaque coefficient par la racine carrée de la norme pour normaliser les fonctions.

On calcule la matrice de recouvrement qui est supposée avoir la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} 1 & s_{f,u} & s_{f,e} \\ s_{f,u} & 1 & s_{u,e} \\ s_{f,e} & s_{u,e} & 1 \end{pmatrix}$$

Attention, sans la normalisation préalable de la fonction d'onde, la matrice  $S^{-1}$  sera fausse (car codée en dur)!!.

On calcule ensuite la matrice  $S^{-1}$

On réexprime les fonction d'onde dans la base  $\Psi_{g,n}$ ,  $\Psi_{g,i}$ ,  $\Psi_{u,i}$  via la matrice de passage suivante :

$$P^* = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

On a donc  $\Psi^{\epsilon} = P^* \cdot \Psi$

On construit la matrice  $\Psi^{\dagger} = \Psi^{\epsilon} \cdot S^{-1}$ . Attention, ici, ça ne correspond pas à l'équation (33) de la publi mais ça colle avec les équations (34).

On transpose cette matrice pour avoir les biorthogonaux en tant que bra.

On construit les termes  $|\Psi_j\rangle E_j \langle \Psi_j^{\dagger}|$  puis la matrice de l'hamiltonien effectif.

On repasse dans la base localisée grâce à la matrice de passage suivante :

$$P^{\#} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

On exprime ensuite l'hamiltonien dans la base  $|a\bar{a}|$ ,  $|b\bar{b}|$ ,  $|a\bar{b}|$   $|b\bar{a}|$  :

$$H_{eff,localis} = P^{\#} \cdot H_{eff} \cdot {}^t P^{\#}$$

Remarque  ${}^t P^{\#} = P^{\#-1}$