

Étude du modèle de Hartree-Fock-Bogoliubov pour les systèmes quantiques attractifs

Séverine Paul

severine.paul@u-cergy.fr

(Université de Cergy-Pontoise)

directeur de thèse : Mathieu Lewin

Hamiltonien à N corps

$$H_N = \sum_{i=1}^N T_{x_i} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(x_i - x_j)$$

- cas relativiste : $T = \sqrt{c^4 - c^2 \Delta} - c^2$
- cas non-relativiste : $T = -\frac{\Delta}{2}$
- V interaction entre particules
(ici, V attractif; ex : $V(x) = -\frac{\kappa}{|x|}$ gravitationnel)

Problème de minimisation :

$$E(N) = \inf_{\substack{\Psi_N \in \mathcal{H}_N \\ \|\Psi_N\|=1}} \langle \Psi_N, H_N \Psi_N \rangle \text{ avec } \mathcal{H}_N = \underbrace{\bigwedge_1^N L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^q)}_{\substack{\text{Fonctions antisymétriques } \% x_j \\ q = \text{nbre degré interne de liberté}}}$$

Approximation de Hartree-Fock

- Restriction de l'énergie à N corps aux déterminants de Slater :

$$\Psi_N(x_1, \sigma_1, x_2, \sigma_2, \dots, x_N, \sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\phi_i(x_j, \sigma_j)) \quad \text{tq} \quad \int_{\mathbb{R}^3} \phi_i^* \phi_j = \delta_{ij}$$

pour $x_i \in \mathbb{R}^3$ et $\sigma_i \in \{1, \dots, q\} \quad \forall 1 \leq i \leq N$

- Matrice densité et Densité du système :

$$\gamma_\Phi(x, y) = \sum_{i=1}^N \phi_i(x) \phi_i^*(y) \quad \rho_\Phi(x) = \gamma_\Phi(x, x) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(x)|^2$$

on voit que $0 \leq \gamma_\Phi \leq 1$ et $\text{Tr}(\gamma_\Phi) = N$

Fonctionnelle d'énergie HF

$$\mathcal{E}^{\text{HF}}(\gamma_\Phi) = \langle \Psi_N, H_N \Psi_N \rangle = \text{Tr}(T \gamma_\Phi) + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} V(x-y) (\rho_\Phi(x) \rho_\Phi(y) - |\gamma_\Phi(x, y)|^2) dx dy$$

Le nombre de particules n'est plus fixé !

Fonctionnelle d'énergie HFB

$$\mathcal{E}^{HFB}(\gamma, \alpha) = \text{Tr}(T\gamma) + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} V(x-y) (\rho_\gamma(x)\rho_\gamma(y) - |\gamma(x,y)|^2 + |\alpha(x,y)|^2) dx dy$$

- $0 \leq \gamma^* = \gamma \leq 1$ et $\text{Tr}(\gamma) = N < \infty$ nombre moyen de particules
- $\alpha(x, y)_{\sigma, \sigma'} = -\alpha(y, x)_{\sigma', \sigma}$ fonction d'onde à 2 corps pour les paires de Cooper
- $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \leq \Gamma := \begin{pmatrix} \gamma & \alpha \\ \alpha^* & 1 - \bar{\gamma} \end{pmatrix} \leq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ matrice densité

Problème de minimisation HFB

$$I(N) = \inf \{ \mathcal{E}^{HFB}(\gamma, \alpha) : (\gamma, \alpha) \text{ vérifient les contraintes ci-dessus} \}$$

Théorème (Existence + Propriétés [LenLew10])

$$\text{Soit } |V(x)| = \frac{c}{|x|}, \quad V(x) \leq -\frac{\kappa}{|x|} \text{ pour } |x| \geq R_0, \quad T = -\Delta/2$$

Alors $\forall N \geq 0$, le problème $I(N)$ admet au moins un minimiseur (γ, α) .
Il est solution de l'équation d'Euler-Lagrange :

$$\Gamma = \chi_{(-\infty, 0)}(F_\Gamma - \mu\mathcal{N}) + D$$

où D est un opérateur de rang fini tel que $\text{Im}(D) \subset \ker(F_\Gamma - \mu\mathcal{N})$

$$\text{avec } F_\Gamma = \begin{pmatrix} T + \rho_\gamma \star V - (\gamma V) & \alpha V \\ (\alpha V)^* & -(T + \bar{\rho}_\gamma \star V - (\bar{\gamma} V)) \end{pmatrix}, \quad \mathcal{N} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

μ multiplicateur de Lagrange.

Remarque : Si (γ, α) est un minimiseur pour $I(N)$, avec $\alpha \neq 0$ et q pair, alors γ et α sont de rang infini.

Réduction au problème sans spin

Théorème ([BacFroJon09])

Soit $q = 2$ et V purement attractif.

Alors tout minimiseur est sous la forme

$$\gamma = \begin{pmatrix} \tau & 0 \\ 0 & \tau \end{pmatrix} \quad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\tau(1-\tau)} \\ -\sqrt{\tau(1-\tau)} & 0 \end{pmatrix}$$

avec $\tau = \bar{\tau} = \tau^*$. En particulier, $\Gamma^2 = \Gamma$.

Energie sans-spin

$$\mathcal{E}(\tau) = \text{Tr}(T\tau) + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} V(x-y) \left(2\rho_\tau(x)\rho_\tau(y) - |\tau(x,y)|^2 + |\sqrt{\tau(1-\tau)}(x,y)|^2 \right) dx dy$$

Question : $\alpha \neq 0$?

[BacFroJon09] V. Bach, J. Fröhlich, L. Jonsson. *J. Math.Phys* 2009

Discrétisation 1

Soit (V_h) une suite d'espace de $H^1(\mathbb{R}^3)$ tels que

$$\forall f \in H^1(\mathbb{R}^3) \quad \exists f_n \in V_h \text{ et } \|f - f_n\|_{H^1(\mathbb{R}^3)} \rightarrow 0$$

Problème de minimisation discrétisé

$$I_h(N) = \inf \left\{ \mathcal{E}^{HFB}(\gamma, \alpha) : (\gamma, \alpha) \text{ vérifient les contraintes ci-dessus et } \right. \\ \left. \gamma\pi_h = \pi_h\gamma = \gamma, \alpha\pi_h = \pi_h\alpha = \alpha \right\}$$

où $\pi_h =$ projecteur orthogonal sur V_h .

Théorème ([Pau11])

Soit (γ_h, α_h) un minimiseur pour le problème approché $I_h(N)$. Alors, à une sous-suite près et à translation près, (γ_h, α_h) tend vers un minimiseur du problème initial $I(N)$, quand $h \rightarrow 0$.

[Pau11] S.P. *Thèse de doctorat*, en préparation.

$V_h = \text{Vect}\{(\chi_i)_{1 \leq i \leq N_b}\}$ sous-espace de Galerkin dans $H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$

- Matrice de recouvrement : $S_{ij} = (\langle \chi_i, \chi_j \rangle)_{ij}$, $\forall 1 \leq i, j \leq N_b$
- Energie cinétique : $t = (\langle \chi_i, T \chi_j \rangle)_{ij}$
- Matrice densité : $\Gamma = \begin{pmatrix} G & A \\ A & S^{-1} - G \end{pmatrix}$ tq $\Gamma S \Gamma \leq \Gamma$, $\text{Tr}(S \Gamma) = N/2$

Energie discrétisée

$$E^{HFB}(G, A) = \text{Tr}(tG) + \frac{1}{2} \left(2 \text{Tr}(G J(G)) - \text{Tr}(G K(G)) + \text{Tr}(A K(A)) \right)$$

où $(J(G))_{ij} = \sum_{kl} G_{kl}(ij, kl)$ et $(K(G))_{ij} = \sum_{kl} G_{kl}(ik, jl)$

avec $(ij, kl) = \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} V(x-y) \chi_i(x) \chi_j(x) \chi_k(y) \chi_l(y) dx dy$

Algorithme de Roothaan et Optimal Damping Algorithm

Construction de la suite $(\Gamma_n)_{n \in \mathbb{N}}$: (Algorithme de point fixe)

$$\begin{cases} \Gamma_{n+1} = \mathbb{S}^{-1/2} \chi_{(-\infty, 0)} (\mathbb{S}^{-1/2} F(\Gamma_n) \mathbb{S}^{-1/2} - \mu_{n+1} \mathcal{N}) \mathbb{S}^{-1/2} \\ \text{Tr}(S G_{n+1}) = N/2 \end{cases}$$

\Rightarrow **Difficulté pour trouver μ_{n+1} !** (Dichotomie, Newton)

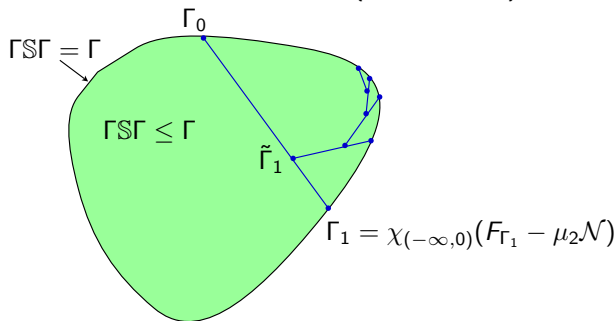
Algorithme de Roothaan et Optimal Damping Algorithm

Construction de la suite $(\Gamma_n)_{n \in \mathbb{N}}$: (Algorithme de point fixe)

$$\begin{cases} \Gamma_{n+1} = \mathbb{S}^{-1/2} \chi_{(-\infty, 0)} (\mathbb{S}^{-1/2} F(\Gamma_n) \mathbb{S}^{-1/2} - \mu_{n+1} \mathcal{N}) \mathbb{S}^{-1/2} \\ \text{Tr}(S \Gamma_{n+1}) = N/2 \end{cases}$$

\Rightarrow **Difficulté pour trouver μ_{n+1} !** (Dichotomie, Newton)

Roothaan ne se comporte pas toujours bien (oscillations) \Rightarrow ODA



[CanBri00] E. Cancès, C. Le Bris. *Int. J. Quantum Chem.* **79** (2000)

Théorème ([Pau11])

Soit $(\Gamma_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite générée par l'algorithme de Roothaan, uniformément bien posée, i.e.

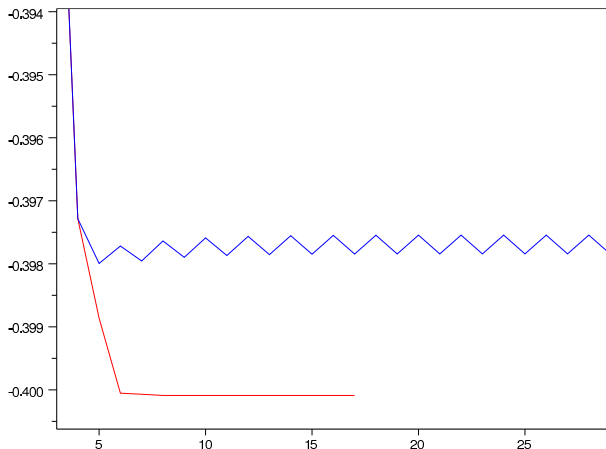
$$\exists \delta > 0 \quad \text{t.q.} \quad |F(\Gamma_n) - \mu_{n+1} \mathcal{N}| \geq \frac{\delta}{2}$$

On définit la fonctionnelle à deux variables :

$$\mathcal{G}(\Gamma, \Gamma') = \frac{1}{2} \text{Tr}(tG) + \frac{1}{2} \text{Tr}(tG') + \frac{1}{2} \left(2 \text{Tr}(G J(G')) - \text{Tr}(G K(G')) + \text{Tr}(A K(A')) \right)$$

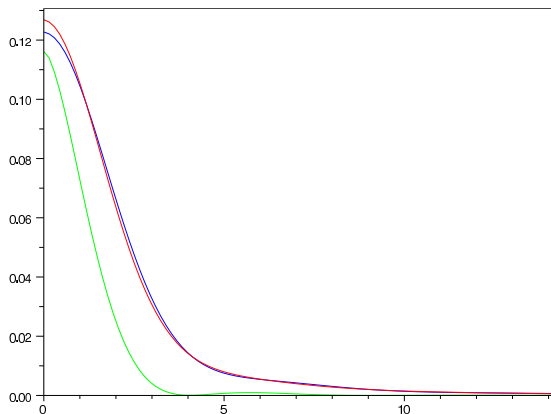
- La suite des itérés par Roothaan coïncide avec celle obtenue en minimisant \mathcal{G} , alternativement par rapport à chaque variable.
- La suite $(\mathcal{G}(\Gamma_{2n}, \Gamma_{2n+1}))_{n \in \mathbb{N}}$ décroît vers une valeur stationnaire de \mathcal{G} .
- La suite $(\Gamma_{2n}, \Gamma_{2n+1})_{n \in \mathbb{N}}$ converge à extraction près, vers un point critique de \mathcal{G} .

Résultats : Roothaan vs ODA



Energie de HF calculée avec Roothaan — et ODA —
pour $N = 6$ particules et $N_b = 200$ fns de base

Résultats : Existence d'appariement

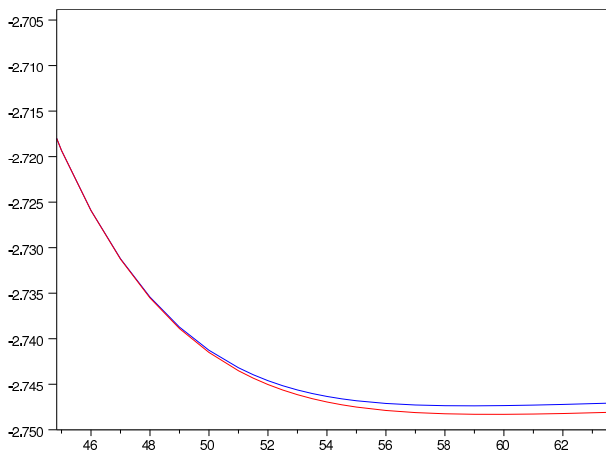


Densités HF et HFB pour $N = 6$ particules et $N_b = 400$ fns de base
Répartition des paires de Cooper —

$$E_{HF}(6) = -0.400456$$

$$E_{HFB}(6) = -0.408908$$

Résultats : Taille du réseau



Energie HF — et HFB — en fonction de la taille du réseau
pour $N = 20$ particules et $N_b = 400$ fns de base