



**HAL**  
open science

# Approches Monte-Carlo quantiques à chemins contraints pour le modèle en couches nucléaire

J. Bonnard

► **To cite this version:**

J. Bonnard. Approches Monte-Carlo quantiques à chemins contraints pour le modèle en couches nucléaire. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université de Caen, 2012. Français. NNT : . tel-00803317

**HAL Id: tel-00803317**

**<https://theses.hal.science/tel-00803317v1>**

Submitted on 21 Mar 2013

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**UNIVERSITÉ de CAEN BASSE-NORMANDIE**

**U.F.R. SCIENCES**

## **THÈSE**

soutenue le **7 décembre 2012** en vue de l'obtention du

**DOCTORAT de l'Université de Caen**

**Spécialité : Constituants élémentaires et physique théorique**

(Arrêté du 07 août 2006)

préparée au **Laboratoire de Physique Corpusculaire de Caen**

dans le cadre de l'**école doctorale S.I.M.E.M.**

présentée par

**Jérémy BONNARD**

---

# ***Approches Monte-Carlo quantiques à chemins contraints pour le modèle en couches nucléaire***

---

*Composition du jury :*

Monsieur **Dany Davesne**, *Professeur*, Université Claude Bernard Lyon-1

Monsieur **Thomas Duguet**, *Ingénieur-Chercheur CEA*, IRFU-SPhT, **Rapporteur**

Monsieur **Kris Heyde**, *Professeur*, Université de Gent, **Rapporteur**

Monsieur **Piet Van Isacker**, *Ingénieur-Chercheur CEA*, GANIL

Monsieur **Olivier Juillet**, *Professeur*, Université de Caen, **Directeur de thèse**





Université de Caen/Basse-Normandie  
Laboratoire de Physique Corpusculaire de Caen  
École doctorale S.I.M.E.M.



# MÉMOIRE DE THÈSE

---

*Approches Monte-Carlo quantiques à chemins  
contraints pour le modèle en couches nucléaire*

---

**Jérémy Bonnard**

7 décembre 2012



*À Charlotte*



---

---

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>Notations</b>	<b>5</b>
<b>1 Approches Monte-Carlo quantiques du problème à <math>N</math>-corps</b>	<b>7</b>
1.1 Fondements théoriques des méthodes Monte-Carlo quantiques . . . . .	8
1.1.1 Base surcomplète des déterminants de Slater : réinterprétation d'un état corrélé . . . . .	8
1.1.2 Condition de validité de la réinterprétation . . . . .	10
1.2 Propagation stochastique en temps imaginaire . . . . .	12
1.2.1 La méthode du temps imaginaire . . . . .	12
1.2.2 La dynamique standard à champs auxiliaires . . . . .	15
1.2.3 La dynamique guidée par un état d'essai . . . . .	18
1.3 Le problème de phase . . . . .	21
1.3.1 Origine du problème . . . . .	21
1.3.2 Schémas de contrôle du problème . . . . .	24
1.4 Calcul d'observables et estimateurs . . . . .	27
<b>2 Un état d'essai variationnel pour le modèle en couches nucléaire</b>	<b>31</b>
2.1 Le modèle en couches nucléaire avec mélange de configurations . . . . .	32
2.2 La méthode de champ moyen « enchevêtré » par les symétries . . . . .	36
2.2.1 Principe . . . . .	36
2.2.2 Le hamiltonien SEMF . . . . .	38
2.2.3 Mise en œuvre numérique . . . . .	41
2.3 Aspects spécifiques au modèle en couches . . . . .	43
2.4 Résultats pour les couches $sd$ et $fp$ . . . . .	46
2.5 Une première application à des noyaux exotiques . . . . .	51
<b>3 Reformulations stochastiques du modèle en couches nucléaire</b>	<b>61</b>
3.1 Forme quadratique du hamiltonien . . . . .	62
3.2 Schémas QMC à champs auxiliaires pour le modèle en couches . . . . .	65
3.3 Approximation des chemins contraints . . . . .	69
3.4 Mise en œuvre numérique . . . . .	72
3.4.1 Discrétisation des équations différentielles stochastiques . . . . .	72
3.4.2 Simulation de la distribution des marcheurs selon leur poids et estima- tion des observables . . . . .	74
3.4.3 Influence des différents paramètres de simulation . . . . .	76
3.5 Premiers résultats dans les couches $sd$ et $fp$ . . . . .	78

---

<b>4 Ouverture vers les systèmes électroniques fortement corrélés</b>	<b>85</b>
4.1 Le modèle de Hubbard . . . . .	86
4.2 Limitation des traitements QMC à champs auxiliaires . . . . .	88
4.3 Approches QMC exemptes de problème de signe . . . . .	90
4.3.1 Le schéma à dynamique guidée . . . . .	90
4.3.2 Le schéma de champ moyen stochastique à poids positifs . . . . .	91
4.3.3 Le schéma QMC « gaussien » . . . . .	94
4.3.4 Mise en œuvre, résultats, et discussion . . . . .	97
<b>Conclusion</b>	<b>101</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>108</b>
<b>Remerciements</b>	<b>109</b>

---

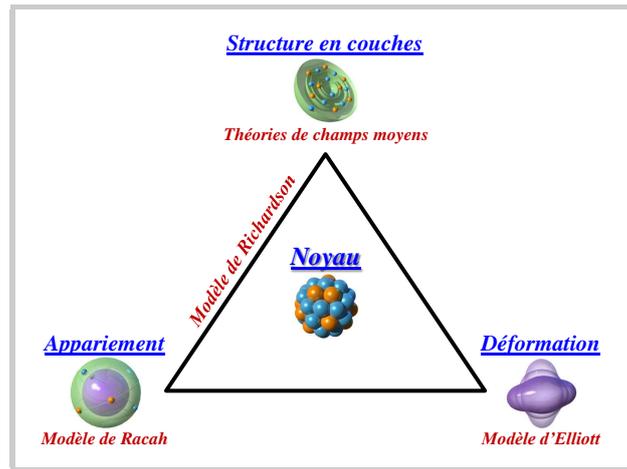
---

# Introduction

LES développements des accélérateurs de particules et des moyens techniques associés ont rendu accessibles au cours des dernières années des régions de la carte des noyaux sans cesse plus éloignées de la vallée de stabilité. Les études menées sur les noyaux exotiques ont mis en lumière des comportements jusqu'alors insoupçonnés, comme par exemple l'existence des noyaux à halos, de la radioactivité à deux protons, ou la modification des nombres magiques loin de la stabilité. Outre les activités de recherche portant sur la mise en œuvre des nouvelles techniques de production et de détection qu'ils réclament, ces noyaux de plus en plus instables constituent d'excellents tests pour les nouveaux formalismes du problème nucléaire à  $N$ -corps imaginés parallèlement par les théoriciens.

Toutes les données collectées jusqu'à nos jours démontrent que la structure nucléaire peut être schématiquement comprise comme la conjugaison de trois aspects, comme représenté sur la figure 1. Tout d'abord, de même que pour les électrons d'un atome, l'existence de configurations particulièrement stables pour des nombres magiques de protons et/ou de neutrons est interprétée comme la signature d'une structure en couches des noyaux, et donc d'un potentiel moyen dans lequel les nucléons se déplacent librement. À l'opposé, l'observation de raies typiques d'un spectre rotationnel révèle un comportement collectif des nucléons qui peut être expliqué par une interaction résiduelle de type quadrupolaire, comme dans le modèle d'Elliott [1]. À ces deux grandes caractéristiques de la structure nucléaire est venu s'ajouter dans les années 1960 un troisième aspect, suggéré par la constatation que les noyaux pair-pair se montrent systématiquement plus liés que leurs voisins pair-impair avec un état fondamental de moment cinétique total nul. Ces observations ont été considérées comme la manifestation d'un phénomène d'appariement entre nucléons identiques des couches externes. La condensation des paires de moment angulaire total nul, analogues aux paires de Cooper d'électrons responsables de la supraconductivité, peut être simplement décrite en termes d'une nouvelle interaction résiduelle entre les nucléons, comme dans le modèle de Racah [2].

Il existe à l'heure d'aujourd'hui de nombreuses théories microscopiques en physique nucléaire. Pour les noyaux de masse intermédiaire ou élevée proches de la stabilité, les méthodes de champ moyen auto-cohérent Hartree-Fock ou Hartree-Fock-Bogoliubov apportent une première description approximative, mais globalement satisfaisante, de la plupart des noyaux par une paramétrisation directe de la fonctionnelle d'énergie. Les corrélations induites par les interactions résiduelles y sont alors partiellement incluses par des brisures de symétries dans un traitement effectif à particules indépendantes. D'un autre côté, dans l'espoir d'acquiescer une vision unifiée de la structure nucléaire à partir des principes premiers, ces dernières années ont vu un développement notable des approches *ab initio*. Elles visent à résoudre le problème quantique à  $N$ -corps à partir de paramétrisations de l'interaction « nue » entre les nucléons (les potentiels d'Argonne par exemple [5]), à deux voire trois corps. Les formalismes de Fad-



**Figure 1** – Représentation schématique des trois principaux aspects de la structure nucléaire. Aux pôles sont situés les modèles théoriques traitant spécifiquement l’aspect correspondant [3]. Ces modèles, tout comme celui de Richardson qui tient compte simultanément d’effets de couches et de l’appariement [4], s’avèrent être analytiquement solubles.

deev [6, 7] et de Yakubovsky [8] offrent par exemple un traitement exacts des systèmes à trois et quatre constituants. Des fonctions d’ondes nucléaires très précises<sup>1</sup> peuvent également être reconstruites par des méthodes de type Monte-Carlo quantiques (QMC) — *fonctions de Green Monte-Carlo* et *diffusion Monte-Carlo* — au travers d’une exploration stochastique de l’espace par les nucléons [9–12]. D’autre part, il est aussi possible de rechercher les états stationnaires du noyau dans l’esprit des méthodes à *mélange de configurations* de la chimie quantique. En substance, il s’agit de tirer profit du succès de l’approximation des nucléons indépendants pour définir une base adéquate dans laquelle la matrice hamiltonienne à  $N$ -corps est diagonalisée : on parle ainsi de *modèle en couches sans cœur* [13–15]. Des calculs comparatifs ont par ailleurs récemment mis en exergue que l’ensemble de ces approches *ab initio* conduisent remarquablement à des résultats similaires [16]. Toutefois, quand bien même elles constituent à l’heure actuelle une référence en termes de calculs de structure nucléaire de par leur accord avec les mesures, ces méthodes restent limitées aux noyaux légers — typiquement jusqu’à  $A \sim 13$  — par les moyens numériques.

Finalement, le *modèle en couches avec mélange de configurations* demeure encore aujourd’hui le cadre théorique le plus performant pour prendre en compte de manière systématique l’ensemble des corrélations au-delà du champ moyen pour une large gamme de noyaux [17, 18]. En définissant un cœur magique supposé inerte et un ensemble de couches dites « actives », l’équation de Schrödinger est résolue avec un hamiltonien comportant une interaction résiduelle effective en partie ajustée aux résultats expérimentaux. Sa capacité à reproduire efficacement un grand nombre d’observations et son pouvoir prédictif concernant les noyaux relativement stables ont fait du modèle en couches un pilier des calculs de structure du noyau depuis ses premières applications. Néanmoins, la croissance rédhibitoire de la dimension de l’espace des états avec le nombre de particules et/ou le nombre de couches rend rapidement le problème à  $N$ -corps insoluble. Une telle limitation se révèle alors d’autant plus problématique que le traitement des noyaux exotiques exige de considérer un nombre de plus en plus important de couches de valence. Elle s’applique de surcroît aux extensions du modèle récemment proposées [19, 20], inspirées de travaux similaires pour son homologue atomique [21], et

1. Ces calculs ne sont toutefois pas exacts par principe, en raison des schémas de contrôle du problème de signe qui y sont implémentés. Ce problème recevra une attention particulière au sein du présent mémoire.

visant à capturer les propriétés des systèmes ouverts que représentent les noyaux proches des « drip-lines » par un couplage aux états du continuum.

Afin d'étendre l'applicabilité du modèle en couches, une alternative à la diagonalisation directe du hamiltonien se trouve de nouveau dans des méthodes QMC. Basées sur une reformulation stochastique de l'équation de Schrödinger, elles permettent de ramener le problème quantique à  $N$ -corps à un ensemble de problèmes à un corps, solubles numériquement, et décrivant des particules indépendantes évoluant chacune dans un potentiel extérieur fluctuant. Les schémas QMC souffrent toutefois d'une pathologie, communément appelée *problème de signe* ou *problème de phase*, se manifestant par une divergence dramatique des erreurs statistiques. Elle apparaît en règle générale pour des systèmes fermioniques, ou pour les systèmes magnétiques frustrés en physique de la matière condensée, et rend totalement incontrôlables les simulations numériques.

Actuellement, les techniques QMC pour le modèle en couches apportent une solution exacte au problème à  $N$ -corps à température finie ou nulle avec des potentiels d'interaction schématiques, de type quadrupolaire et appariement (voir l'article de revue [22]). À l'inverse, dès que sont pris en compte des hamiltoniens réalistes, l'échantillonnage n'échappe pas à une contamination par le problème phase qui n'est alors contourné qu'au prix d'approximations incontrôlées : les calculs sont menés à bien avec seulement une petite fraction des interactions à l'origine du problème, puis extrapolés dans la limite où celle-ci tend vers un. En dehors de cette restriction principale, les approches Monte-Carlo quantiques traditionnelles du modèle en couches sont par essence incapables de fournir une spectroscopie détaillée des noyaux.

L'essentiel de ce travail poursuit l'objectif de proposer un nouveau schéma stochastique pour le modèle en couches autorisant la reconstruction de la spectroscopie « yrast ». L'originalité de l'échantillonnage réside principalement dans l'utilisation d'une approche variationnelle avec restauration des symétries du hamiltonien *avant variation* afin d'initier et de guider le processus QMC, mais également afin de le contraindre en adoptant les approximations de référence pour contrôler le problème de signe/phase. Ce mémoire est par conséquent organisé de la manière suivante. Dans un premier chapitre, nous exposerons en détail le principe général des méthodes QMC, depuis leurs fondements théoriques jusqu'à leurs conditions de validité. Après une discussion portant sur l'origine du problème de phase et sur les différentes techniques permettant de le maîtriser, nous mettrons progressivement en place le schéma QMC suggéré qui fera l'objet du chapitre 3. Auparavant, le second chapitre sera dédié à la présentation de la méthode variationnelle avec restauration des symétries sur laquelle repose notre reformulation stochastique du modèle en couches. Nous en profiterons par ailleurs pour y reporter les premiers résultats auxquels elle a conduit pour des noyaux exotiques d'intérêt actuel.

Outre la structure nucléaire, le problème du signe est également un obstacle majeur en physique de la matière condensée dans le cadre des simulations Monte-Carlo traditionnelles du modèle de Hubbard. Ce modèle se limite à considérer les électrons de la bande la plus proche du niveau de Fermi où l'interaction coulombienne est écrantée. En géométrie bidimensionnelle, il représente *a priori* une description effective minimale de la physique des composés à base d'oxydes de cuivre présentant une phase supraconductrice non conventionnelle [23]. Récemment, de nouveaux échantillonnages QMC sans problème de signe ont été proposés [24,25]. Le quatrième et dernier chapitre de ce manuscrit sera essentiellement consacré à leur étude. Nous démontrerons qu'ils sont en réalité sous-tendus par un mouvement brownien similaire à celui mise en œuvre pour le modèle en couches dans les parties précédentes. Enfin, l'origine des erreurs systématiques qu'exhibent ces schémas, en dépit de trajectoires à poids positifs avec le hamiltonien de Hubbard, sera également élucidée.



---



---

# Notations

**C**E préambule vise à récapituler les notations qui seront employées au cours des développements présentés dans ce mémoire :

- $d$  : la dimension de l'espace de Hilbert à une particule, supposée finie.
- $N$  et  $A, N, Z$  : respectivement le nombre de particules pour un système à  $N$ -corps général, et le nombre total de nucléons, de neutrons, et de protons dans le cadre du modèle en couches nucléaire. Lorsqu'il s'agira de nucléons de valence, ces trois dernières quantités se verront indicées par  $v$ . Les indices  $n, p = 1 \rightarrow N$  seront alors essentiellement attribués à des sommations portant sur le nombre de particules, mais serviront également comme exposants afin de distinguer les grandeurs associées aux neutrons et aux protons.
- $|\phi\rangle, |u\rangle$  : des vecteurs d'états individuels, et donc de dimension  $d$ . La lettre  $u$  sera notamment attribuée à une base orthonormée discrète arbitraire  $\{|u_i\rangle\}$  à un corps, et les indices  $i, j, k, l = 1 \rightarrow d$  labelleront les vecteurs qui la constituent.
- $h, T, O$  : des opérateurs à une particule agissant sur des états  $|\phi\rangle$  par exemple, représentés dans une base par une matrice de dimensions  $d \times d$  et d'éléments  $h_{ij}, T_{ij}, O_{ij}$ .
- $\hat{c}_\alpha^\dagger, \hat{c}_\alpha$  : les opérateurs de création et d'annihilation d'un fermion dans un état  $|\alpha\rangle$  quelconque. Une exception occasionnelle sera toutefois faite dans les parties concernant le modèle en couches au sein desquelles nous noterons logiquement  $\hat{n}_\alpha^\dagger, \hat{n}_\alpha$  et  $\hat{p}_\alpha^\dagger, \hat{p}_\alpha$  les opérateurs fermioniques de neutrons et protons.
- $|\Psi\rangle, |\Phi\rangle$  : des états quantiques à  $N$ -corps. En particulier,  $\Psi$  sera systématiquement réservé aux états corrélés et  $\Phi$  aux états de fermions indépendants. Un déterminant de Slater constitué de  $N$  états individuels  $\{|\phi_n\rangle\}$  sera ainsi donné par  $|\Phi\rangle = \prod_{n=1}^N \hat{c}_{\phi_n}^\dagger |-\rangle$  où  $|-\rangle$  correspond au vide de particules.
- $\hat{H}, \hat{A}, \hat{U}$  : des opérateurs à  $N$ -corps. Si  $\hat{H}$  désigne par exemple un opérateur à un corps alors  $\hat{H} = \sum_{n=1}^N \hat{h}(n)$  où  $\hat{h}(n) = \mathbb{1}_1 \otimes \dots \otimes h(n) \otimes \dots \otimes \mathbb{1}_N$  est le prolongement dans l'espace à  $N$  particules de l'opérateur  $h(n)$  associé à la particule  $n$ . De cette manière  $\hat{H}$  s'exprime dans le langage de la seconde quantification comme  $\hat{H} = \sum_{i,j=1}^d h_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$ . S'il s'agit d'un opérateur  $\hat{V}$  à deux corps,  $\hat{V} = \sum_{n < p}^N \hat{V}(n, p) = \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_l$ , les éléments  $V_{ijkl}$  étant, pour des fermions, antisymétrisés.
- $\langle \hat{A} \rangle_\Psi = \frac{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$  : valeur moyenne de l'observable  $\hat{A}$  dans l'état quelconque  $|\Psi\rangle$ .

- $\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_1, \Psi_2} = \frac{\langle \Psi_1 | \hat{A} | \Psi_2 \rangle}{\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle}$  : élément de matrice normalisé entre deux états non orthogonaux  $|\Psi_1\rangle$  et  $|\Psi_2\rangle$ .
- $\langle \hat{A} \rangle_{\hat{D}} = \text{Tr}(\hat{D}\hat{A})$  : valeur moyenne de l'observable  $\hat{A}$  dans l'état de mélange statistique décrit par l'opérateur densité  $\hat{D}$  supposé normalisé (dans le cas contraire apparaîtrait un facteur  $1/\text{Tr}(\hat{D})$  dans la définition précédente). Dans le cas particulier où celui-ci prend la forme d'une dyade normée  $|\Psi_2\rangle\langle\Psi_1|/\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$ , la moyenne  $\langle \hat{A} \rangle_{\hat{D}}$  se ramène à l'un des deux points précédents.
- $\hbar, k_B$  : les constantes de Planck réduite et de Boltzmann.
- $\tau$  : temps imaginaire ou inverse de la température  $T$  ( $\tau = 1/k_B T$ ) en fonction du contexte.
- $\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | J, M \rangle$  : un coefficient de Clebsch-Gordan réalisant le couplage dans le canal  $(J, M)$  des états  $|j_1, m_1\rangle$  et  $|j_2, m_2\rangle$  d'une base standard. Pour les définir sans ambiguïté, nous adoptons la convention de phase de la référence [26], plus précisément  $\langle j_1, j_1, j_2, j_1 - J | J, J \rangle$  est réel et positif, de sorte qu'ils soient tous réels.
- $\mathbb{E}[X]$  : l'espérance mathématique (moyenne statistique) d'un processus stochastique  $X$ .

---

---

# CHAPITRE 1

---

---

## Approches Monte-Carlo quantiques du problème à $N$ -corps

LES méthodes Monte-Carlo quantiques (QMC) sont généralement considérées comme une puissante alternative à la diagonalisation du hamiltonien pour résoudre l'équation de Schrödinger dans les systèmes à  $N$ -corps. Derrière l'acronyme QMC se cachent en réalité une multitude d'algorithmes visant schématiquement à reconstruire les états stationnaires en échantillonnant une base continue selon un processus stochastique défini par le hamiltonien. Ces méthodes sont applicables aussi bien aux systèmes de bosons que de fermions en interaction, et offrent la possibilité d'étudier les propriétés à température nulle ou à l'équilibre thermodynamique. Dans la majorité des cas, elles souffrent toutefois de l'émergence de réalisations à « poids » négatifs, voire complexes, qui contaminent la reconstruction des états corrélés au point de conduire à un rapport signal sur bruit quasiment nul.

Dans ce chapitre, nous présentons les fondements mathématiques des approches QMC et les conditions qu'elles doivent satisfaire pour être concrètement utiles à la compréhension des systèmes à  $N$ -corps ne pouvant être appréhendés par une application directe des principes de la mécanique quantique. Nous discuterons également du problème de signe/phase et des principaux schémas approximatifs de son contrôle.

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Fondements théoriques des méthodes Monte-Carlo quantiques . . . . .</b>	<b>8</b>
1.1.1	Base surcomplète des déterminants de Slater : réinterprétation d'un état corrélé . . . . .	8
1.1.2	Condition de validité de la réinterprétation . . . . .	10
<b>1.2</b>	<b>Propagation stochastique en temps imaginaire . . . . .</b>	<b>12</b>
1.2.1	La méthode du temps imaginaire . . . . .	12
1.2.2	La dynamique standard à champs auxiliaires . . . . .	15
1.2.3	La dynamique guidée par un état d'essai . . . . .	18
<b>1.3</b>	<b>Le problème de phase . . . . .</b>	<b>21</b>
1.3.1	Origine du problème . . . . .	21
1.3.2	Schémas de contrôle du problème . . . . .	24
<b>1.4</b>	<b>Calcul d'observables et estimateurs . . . . .</b>	<b>27</b>

---

# 1.1 Fondements théoriques des méthodes Monte-Carlo quantiques

## 1.1.1 Base surcomplète des déterminants de Slater : réinterprétation d'un état corrélé

L'application des postulats de la mécanique quantique passe traditionnellement par le choix d'une base orthonormée discrète. Une base couramment employée pour un problème à  $N$  fermions est celle formée par les déterminants de Slater dans lesquels chacune des  $N$  particules occupe un état individuel d'une base orthonormée discrète de l'espace de Hilbert à un corps. Les approches Monte-Carlo quantiques vont elles faire appel à des bases continues. Par exemple, les méthodes<sup>1</sup> des *fonctions de Green Monte-Carlo* [27–31] et de *diffusion Monte-Carlo* [32–35] recourent à la base orthonormée continue de la représentation position qu'elles explorent aléatoirement sous l'effet de l'énergie cinétique.

Les méthodes QMC présentées dans ce mémoire exploitent une autre base continue, à savoir la base *surcomplète* constituée des déterminants de Slater formés à partir d'états individuels arbitraires. La relation de fermeture associée s'écrit

$$\frac{1}{N!\pi^{Nd}} \int \mathfrak{D}\Phi \exp\left(-\sum_{n=1}^N \|\phi_n\|^2\right) |\Phi\rangle\langle\Phi| = \hat{\mathbb{1}}_N, \quad (1.1)$$

où  $\hat{\mathbb{1}}_N$  est l'opérateur identité de l'espace des états *antisymétrisés* à  $N$ -corps et  $|\Phi\rangle$  un déterminant de Slater quelconque. Le symbole  $\int \mathfrak{D}\Phi$  indique l'intégrale fonctionnelle sur la mer de Fermi composée des  $N$  états  $|\phi_n\rangle = \sum_{i=1}^d \phi_{n,i}|u_i\rangle$  occupés qui appartiennent à l'espace de Hilbert à une particule, supposé de dimension  $d$  finie et sous-tendu par une base orthonormée  $\{|u_i\rangle\}$ ;  $\|\phi_n\|^2 = \sum_{i=1}^d |\phi_{n,i}|^2$  est bien sûr le carré de la norme de « l'orbitale »  $|\phi_n\rangle$ . Avec ces notations, la mesure d'intégration est  $\mathfrak{D}\Phi = \prod_{n=1}^N \prod_{i=1}^d d\text{Re}(\phi_{n,i})d\text{Im}(\phi_{n,i})$ . Il est possible de démontrer la relation de fermeture (1.1) en partant de la paramétrisation de Thouless des déterminants de Slater [36], ou bien directement. Les états individuels  $|\phi\rangle$  les plus généraux forment effectivement eux même une base surcomplète de l'espace à une particule :

$$\frac{1}{\pi^d} \int \mathfrak{D}\phi \exp(-\|\phi\|^2) |\phi\rangle\langle\phi| = \mathbb{1}, \quad (1.2)$$

avec  $\mathbb{1}$  la matrice identité de dimension  $d$ . En exprimant les composantes de  $|\phi\rangle$  comme  $\phi_i = r_i e^{i\theta_i}$  : la mesure  $\mathfrak{D}\phi$  est alors  $\mathfrak{D}\phi = \prod_{i=1}^d d\text{Re}(\phi_i)d\text{Im}(\phi_i) = \prod_{i=1}^d r_i dr_i d\theta_i$ , et par un calcul simple l'intégrale (1.2) devient

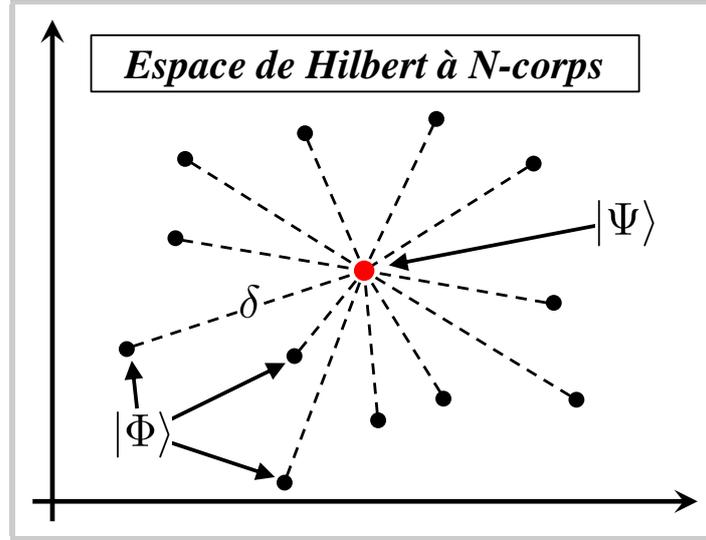
$$\sum_{k,l=1}^d \int \left( \prod_{i=1}^d r_i dr_i d\theta_i \right) e^{-r_i^2} r_k r_l e^{i(\theta_k - \theta_l)} |u_k\rangle\langle u_l| = \pi^d \sum_{i=1}^d |u_i\rangle\langle u_i| = \pi^d \mathbb{1}. \quad (1.3)$$

Par produit tensoriel, la relation (1.2) conduit immédiatement à la complétude des états factorisés pour un système de  $N$  particules discernables. Il suffit ensuite de se restreindre au sous-espace des états antisymétriques par application de l'opérateur d'antisymétrisation  $\hat{\mathcal{A}}$  pour obtenir (1.1), les déterminants  $|\Phi\rangle$  étant donnés par  $|\Phi\rangle = \sqrt{N!} \hat{\mathcal{A}}|\phi_1\phi_2 \cdots \phi_N\rangle$ .

Tout état de  $N$  fermions  $|\Psi\rangle$  se décompose ainsi sur la base surcomplète (1.1) des déterminants de Slater comme

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{N!\pi^{Nd}} \int \mathfrak{D}\Phi \exp\left(-\sum_{n=1}^N \|\phi_n\|^2\right) \langle\Phi|\Psi\rangle |\Phi\rangle.$$

1. Plus connues dans la littérature comme les méthodes de « Green's-function Monte-Carlo » et « Diffusion Monte-Carlo ».



**Figure 1.1** – Représentation schématique du nuage de points associés aux réalisations stochastiques d'un état  $|\Psi\rangle$  en termes de déterminants de Slater. Son barycentre se confond avec l'état exact  $|\Psi\rangle$ .

En nommant  $\Theta(\Phi)$  la phase du recouvrement  $\langle\Phi|\Psi\rangle$ , soit  $\exp(i\Theta(\Phi))|\langle\Phi|\Psi\rangle| = \langle\Phi|\Psi\rangle$ , il vient immédiatement que

$$|\Psi\rangle = \int \mathcal{D}\Phi P_{\Psi}(\Phi) \exp(i\Theta(\Phi))|\Phi\rangle, \quad (1.4)$$

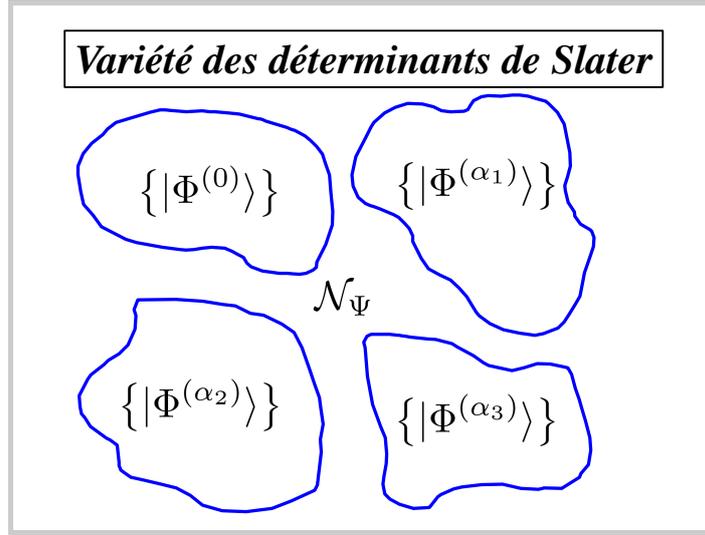
avec

$$P_{\Psi}(\Phi) = \frac{1}{N!\pi^{Nd}} \exp\left(-\sum_{i=1}^N \|\phi_n\|^2\right) |\langle\Phi|\Psi\rangle|, \quad (1.5)$$

Le vecteur  $\exp(i\Theta(\Phi))|\Phi\rangle$  intervenant dans (1.4) est bien entendu également un déterminant de Slater — les états individuels le composant ne diffèrent de ceux de  $|\Phi\rangle$  que par le changement de phase  $\exp(i\Theta(\Phi)/N)$  — et par construction son recouvrement avec l'état corrélé est réel et positif,  $\langle\Psi|\exp(i\Theta(\Phi))|\Phi\rangle = |\langle\Phi|\Psi\rangle|$ . Les « composantes » (1.5)  $P_{\Psi}(\Phi)$  de  $|\Psi\rangle$  sur la base surcomplète étant réelles et positives, nous sommes parfaitement en droit de les assimiler, à une normalisation près, à une distribution de probabilité sur la variété des déterminants de Slater. Par conséquent, tout état quantique à  $N$ -corps  $|\Psi\rangle$  peut se réinterpréter comme une espérance mathématique, c'est-à-dire comme une moyenne statistique, d'états de fermions indépendants  $\{|\Phi^{(0)}\rangle\}$ , générés selon la distribution  $P_{\Psi}$  et ayant un recouvrement de phase nulle avec l'état corrélé considéré :

$$|\Psi\rangle = \mathbb{E}\left[|\Phi^{(0)}\rangle\right]. \quad (1.6)$$

Notons que dans cette relation, la réalisation  $|\Phi^{(0)}\rangle$  correspond au nouveau déterminant construit à partir d'états individuels colinéaires aux orbitales originelles  $\{|\phi_n\rangle\}$  mais dont la phase et la normalisation sont ajustées pour inclure à la fois le facteur de phase  $\exp(i\Theta(\Phi)/N)$  et la normalisation de la loi  $P_{\Psi}$ . De façon schématique et géométrique, l'état  $|\Psi\rangle$  peut se voir comme le barycentre d'un nuage de points dont chacun est associé à un déterminant de Slater, comme illustré par la figure 1.1 (l'exposant (0) y est volontairement omis). Nous retrouvons là l'esprit des méthodes Monte-Carlo qui amènent à évaluer l'intégrale d'une fonction comme la valeur moyenne d'un processus aléatoire. D'autre part, remarquons de suite que la même distribution de probabilité est également en mesure d'échantillonner le même état physique en termes de déterminants de Slater  $\{|\Phi^{(\alpha)}\rangle\}$  tels que la phase de leurs recouvrements avec  $|\Psi\rangle$



**Figure 1.2** – Représentation schématique de la structuration de la variété des déterminants de Slater. Chacun des domaines admet une représentation stochastique d'un état  $e^{i\alpha}|\Psi\rangle$ , physiquement équivalent à un vecteur  $|\Psi\rangle$  quelconque, comme l'espérance mathématique de déterminants de Slater  $|\Phi^{(\alpha)}\rangle$  possédant tous une même phase  $\alpha$  pour leur recouvrement avec  $|\Psi\rangle$ .

soit égale à  $\alpha$ . En effet, les états  $|\Psi\rangle$  et  $e^{i\alpha}|\Psi\rangle$  ne peuvent être distingués par aucune mesure et

$$e^{i\alpha}|\Psi\rangle = \int \mathcal{D}\Phi P_\Psi(\Phi) \exp(i(\Theta(\Phi) + \alpha))|\Phi\rangle = \mathbb{E}[|\Phi^{(\alpha)}\rangle] ,$$

où  $|\Phi^{(\alpha)}\rangle = \exp(i(\Theta(\Phi) + \alpha))|\Phi\rangle$  si bien que  $\langle\Psi|\Phi^{(\alpha)}\rangle = e^{i\alpha}|\langle\Psi|\Phi\rangle|$ .

En définitive, pour tout état  $|\Psi\rangle$  d'un système de fermions, la variété des déterminants de Slater apparaît comme la réunion d'une infinité de domaines au sein de chacun desquels peut être élaboré un processus stochastique permettant de reconstruire un vecteur physiquement équivalent à  $|\Psi\rangle$  par une moyenne d'état de particules indépendantes possédant tous une phase globale identique (voir figure 1.2). L'espace libre situé entre les frontières des divers domaines constitue l'ensemble des déterminants de Slater orthogonaux à  $|\Psi\rangle$ , et se voit qualifié de *surface nodale*  $\mathcal{N}_\Psi := \{|\Phi\rangle / \langle\Psi|\Phi\rangle = 0\}$  associée à l'état  $|\Psi\rangle$ , par analogie avec l'hypersurface regroupant les nœuds de la fonction d'onde à  $N$ -corps en base position.

La décomposition d'un vecteur sur une base surcomplète n'étant pas unique, la distribution de probabilité  $P_\Psi$  autorisant la réinterprétation d'un état  $|\Psi\rangle$  quelconque ne l'est pas non plus. Nous devinons d'ores et déjà que des problèmes potentiels surviennent si jamais le processus stochastique choisi peuple simultanément des domaines distincts : certaines réalisations vont dans ce cas pouvoir se compenser mutuellement et ainsi annuler leurs contributions à la reconstruction de l'état  $|\Psi\rangle$ . Il s'agit précisément de l'origine du problème de phase sur lequel nous reviendrons en détails ultérieurement.

### 1.1.2 Condition de validité de la réinterprétation

Parmi les multiples schémas stochastiques de reconstruction d'un état à  $N$ -corps  $|\Psi\rangle$  en termes d'une moyenne de déterminants de Slater  $|\Phi\rangle$ , seuls ceux assurant une variance finie de l'erreur  $|\Psi\rangle - |\Phi\rangle$  peuvent prétendre à un échantillonnage Monte-Carlo. Par définition, cette

variance coïncide avec l'erreur quadratique moyenne  $\mathbb{E}[\delta^2]$  où

$$\delta = \|\Psi\rangle - |\Phi\rangle\| ,$$

n'est autre, d'un point de vue géométrique, que la distance entre l'état souhaité et une de ses réalisations  $|\Phi\rangle$ , comme signalé sur la figure 1.1. Un calcul simple nous dévoile alors que le second moment de la norme des déterminants de Slater détermine  $\mathbb{E}[\delta^2]$  :

$$\mathbb{E}[\delta^2] = \mathbb{E}\left[\|\Psi\|^2 + \|\Phi\|^2 - \langle\Psi|\Phi\rangle - \langle\Phi|\Psi\rangle\right] = \mathbb{E}\left[\|\Phi\|^2\right] - \|\Psi\|^2 . \quad (1.7)$$

Le premier moment  $\mathbb{E}[\|\Phi\|]$  contrôle par ailleurs la dispersion des réalisations, c'est-à-dire l'extension du nuage de points sur la figure 1.1, puisque l'erreur moyenne  $\mathbb{E}[\delta]$  vérifie, en vertu de l'inégalité triangulaire,

$$\mathbb{E}[\|\Phi\|] = \mathbb{E}[\|(|\Phi\rangle - |\Psi\rangle) + |\Psi\rangle\|] \leq \mathbb{E}[\delta] + \|\Psi\| . \quad (1.8)$$

Toute divergence de la norme moyenne entraîne donc une erreur moyenne infinie sur l'état exact  $|\Psi\rangle$ . En outre, le critère  $\mathbb{E}[\|\Phi\|^2] < \infty$  s'avère essentiel pour la reconstitution des observables physiques. En effet, estimer la valeur moyenne  $\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$  d'un opérateur  $\hat{A}$  quelconque nécessite de disposer de deux populations de déterminants de Slater  $\{|\Phi^{(a)}\rangle\}$  et  $\{|\Phi^{(b)}\rangle\}$  statistiquement indépendantes afin de retrouver le ket  $|\Psi\rangle$  et le bra  $\langle\Psi|$ . Dès lors

$$\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \mathbb{E}\left[\langle\Phi^{(b)}|\hat{A}|\Phi^{(a)}\rangle\right] = \mathbb{E}\left[\text{Tr}\left(\hat{A}\hat{\sigma}\right)\right] , \quad (1.9)$$

où l'on a introduit la dyade fluctuante  $\hat{\sigma} = |\Phi^{(a)}\rangle\langle\Phi^{(b)}|$  associée à une réalisation de chaque population. En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz de l'espace de Liouville, la variance de l'élément de matrice  $\langle\Phi^{(b)}|\hat{A}|\Phi^{(a)}\rangle$  satisfait

$$\text{Var}\left[\langle\Phi^{(b)}|\hat{A}|\Phi^{(a)}\rangle\right] = \mathbb{E}\left[\left(\text{Tr}\left(\hat{A}\hat{\sigma}\right) - \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle\right)^2\right] \leq \text{Tr}\left(\hat{A}^2\right) \mathbb{E}\left[\text{Tr}\left(\hat{\sigma}\hat{\sigma}^\dagger\right)\right] .$$

Mais l'indépendance statistique des deux déterminants implique

$$\mathbb{E}\left[\text{Tr}\left(\hat{\sigma}\hat{\sigma}^\dagger\right)\right] = \mathbb{E}\left[\|\Phi^{(a)}\| \cdot \|\Phi^{(b)}\|\right] = \left(\mathbb{E}\left[\|\Phi^{(a)}\|\right]\right)^2 ,$$

et par suite, d'après (1.7),

$$\text{Var}\left[\langle\Psi^{(b)}|\hat{A}|\Psi^{(a)}\rangle\right] \leq \text{Tr}\left(\hat{A}^2\right) \left(\mathbb{E}\left[\|\Phi^{(a)}\|\right]\right)^2 = \text{Tr}\left(\hat{A}^2\right) \left(\mathbb{E}[\delta^2] + \|\Psi\|^2\right)^2 .$$

Par conséquent, une divergence de l'erreur quadratique moyenne prive les observables de la garantie d'une variance finie.

Finalement, pour que l'échantillonnage échappe aux problèmes d'erreur moyenne et/ou de variance infinie qui viennent d'être mis en exergue, la distribution  $P_{\|\Phi\|}$  de la norme des déterminants doit obligatoirement conduire à un premier et à un second moment bien définis. Anticipons légèrement sur la suite en affirmant dès maintenant que la reconstruction d'un état stationnaire va solliciter des déterminants déduits d'équations différentielles stochastiques à *bruits multiplicatifs*. Or, il est reconnu que de telles équations tendent au développement d'un comportement asymptotique en loi de puissance de la distribution de probabilité de leurs solutions. Par exemple, si l'on prend en compte un bruit proportionnel à l'impulsion dans l'équation de Langevin classique d'une particule en mouvement brownien, la résolution de l'équation de Fokker-Planck correspondante mène à une densité de probabilité non plus gaussienne mais exhibant une queue en loi de puissance [37]. Partant alors du principe que, pour  $\|\Phi\| \rightarrow +\infty$ , la

densité de probabilité de la norme des déterminants de Slater varie comme  $P_{\|\Phi\|} \propto 1/\|\Phi\|^{1+\nu}$ , le moment d'ordre  $\lambda$  converge si et seulement si  $\nu > \lambda$  :

$$\mathbb{E}[\|\Phi\|^\lambda] = \int_0^{+\infty} d\|\Phi\| P_{\|\Phi\|}(\|\Phi\|) \|\Phi\|^\lambda \rightarrow +\infty \quad \text{si} \quad \int_{\mathcal{N}} d\|\Phi\| \|\Phi\|^{\lambda-1-\nu} \rightarrow +\infty ,$$

où  $\mathcal{N}$  désigne une valeur typique de la norme à partir de laquelle la loi de puissance apparaît. Pour  $\nu \leq 1$ , les deux indicateurs statistiques  $\mathbb{E}[\delta]$  et  $\mathbb{E}[\delta^2]$  tendent donc vers l'infini. Si  $1 < \nu \leq 2$ , seule l'erreur quadratique moyenne diverge. Dans les deux cas, certaines observables physiques  $\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$  seront malgré tout caractérisées par une variance finie et se verront de fait correctement reproduites<sup>2</sup>, l'erreur statistique diminuant avec le nombre  $N_r$  de réalisation comme  $1/\sqrt{N_r}$ . Pour les autres qui souffrent d'une variance QMC infinie, leur reconstruction exige d'avoir recours au théorème de la limite centrale généralisé [38]. Celui-ci garantit toujours la convergence vers la valeur moyenne exacte (1.9) dans la limite  $N_r \rightarrow \infty$ , mais avec une erreur décroissant comme  $1/N_r^{1-\mu}$  où  $1 < \mu \leq 2$ . Ce comportement inhabituel peut se révéler difficile à détecter en pratique dans la mesure où il trouve son origine dans la queue de la distribution : sans une population de taille suffisante, la simulation numérique paraîtra sous contrôle, mais la moyenne statistique (1.9) sera faussée. Nous illustrons ces considérations sur la figure 1.3 pour un cas schématique. Insistons enfin sur le fait qu'il est totalement impossible de savoir par avance quelles sont les observables problématiques.

En résumé, le comportement asymptotique de la distribution de probabilité de la norme des déterminants de Slater  $|\Phi\rangle$  permettant de reconstruire un état quantique  $|\Psi\rangle$  conditionne l'efficacité et la validité de l'échantillonnage. Lorsque ce comportement est dominé par une loi de puissance de la forme  $1/\|\Phi\|^{1+\nu}$  pour  $\|\Phi\| \rightarrow \infty$ , le calcul Monte-Carlo quantique exige  $\nu > 2$  sous peine d'une reproduction biaisée, voire impossible, des valeurs moyennes d'observables.

## 1.2 Propagation stochastique en temps imaginaire

La section précédente a montré que tout état quantique admet une reformulation en termes de moyenne statistique d'états de type Hartree-Fock. Nous présentons ici les principaux schémas stochastiques qui mènent à un échantillonnage des états d'intérêt physique, à savoir les vecteurs propres d'un hamiltonien  $\hat{H}$  donné.

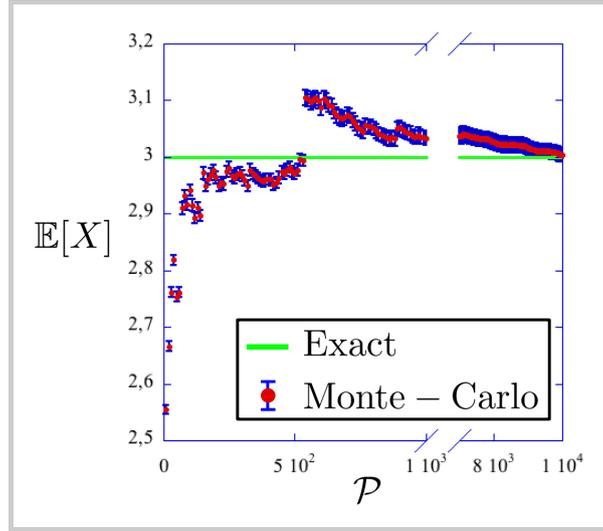
### 1.2.1 La méthode du temps imaginaire

Afin de reconstruire les états stationnaires, la majorité des formalismes Monte-Carlo quantiques repose traditionnellement sur la méthode de la *propagation en temps imaginaire*. En substituant au temps conventionnel  $t$  la quantité  $\tau = it/\hbar$  appelée *temps imaginaire*, l'équation de Schrödinger régissant l'évolution d'un état à  $N$ -corps  $|\Psi\rangle$  devient

$$-\frac{d|\Psi\rangle}{d\tau} = \hat{H}|\Psi\rangle . \quad (1.10)$$

Une solution formelle  $|\Psi_\tau\rangle$  au temps imaginaire  $\tau$  de cette équation est simplement obtenue par application sur un état initial  $|\Psi_0\rangle$  de l'opérateur d'évolution dans lequel a été pratiqué un

2. Nous excluons de la discussion les distributions de probabilité des éléments de matrice  $\langle \Phi^{(b)} | \hat{A} | \Phi^{(a)} \rangle$  dont la valeur moyenne diverge. Tous les schémas QMC considérés ici conduisant en moyenne à l'état exact, l'existence de (1.9) est en effet assurée.



**Figure 1.3** – Estimation du premier moment de la loi de probabilité  $P(X) = \mu/X^{1+\mu}$  définie sur l'intervalle  $[1; +\infty[$ . Pour  $1 < \mu < 2$ ,  $\mathbb{E}[X] = \mu/\mu - 1 < \infty$ , mais la variance diverge. Les résultats numériques ont été obtenus en suivant une méthodologie similaire à celle utilisée par la suite dans les calculs QMC, c'est-à-dire au travers d'une moyenne sur un nombre  $\mathcal{P}$  de « populations » indépendantes. Chacune d'entre elles correspond à un échantillonnage avec  $M = 100$  « marcheurs » associés ici simplement à des tirages selon la procédure décrite dans la référence [38]. Sans connaissance du comportement pathologique en loi de puissance de la distribution, les fluctuations statistiques seraient estimées à partir du théorème de la limite centrale. Elles sont représentées par les barres d'erreur indiquées sur la figure et conduiraient à annoncer pour  $\mathbb{E}[X]$  un résultat entaché d'erreurs systématiques tant que la limite  $\mathcal{P} \rightarrow +\infty$  n'est pas atteinte. En réalité, ces barres d'erreurs n'ont strictement aucune signification puisque la variance est infinie.

changement de variable identique, soit

$$|\Psi_\tau\rangle = \exp(-\tau\hat{H})|\Psi_0\rangle. \quad (1.11)$$

La propagation s'effectue donc au travers de l'opérateur densité (non normalisé) décrivant l'état d'équilibre statistique dans l'ensemble canonique à la température  $1/k_B\tau$ .

Décomposons à présent la solution (1.11) de l'équation de Schrödinger en temps imaginaire sur la base propre  $\{|\Psi_n\rangle\}$  du hamiltonien, les énergies associées  $\{E_n\}$  étant supposées pour simplifier non dégénérées :

$$|\Psi_\tau\rangle = \exp(-\tau\hat{H}) \sum_n \langle\Psi_n|\Psi_0\rangle |\Psi_n\rangle = \sum_n \langle\Psi_n|\Psi_0\rangle e^{-\tau E_n} |\Psi_n\rangle. \quad (1.12)$$

Parmi l'ensemble des vecteurs propres qui possèdent un recouvrement  $C_n = \langle\Psi_n|\Psi_0\rangle$  non nul avec l'état initial, désignons alors spécifiquement par  $|\Psi_G\rangle$  celui se rapportant à l'énergie propre minimale  $E_G$ . De cette manière

$$|\Psi_\tau\rangle = e^{-\tau E_G} \left( C_G |\Psi_G\rangle + \sum_{n|C_n \neq 0} C_n e^{-\tau(E_n - E_G)} |\Psi_n\rangle \right). \quad (1.13)$$

Comme par définition toutes les valeurs propres survenant dans la somme sont supérieures à  $E_G$ , leurs contributions s'annulent dans la limite  $\tau \rightarrow +\infty$ . Autrement dit, à grand temps

imaginaire seule survit la composante de  $|\Psi_\tau\rangle$  sur le vecteur propre de  $\hat{H}$  de plus basse énergie qui n'est pas orthogonal à l'état de départ  $|\Psi_0\rangle$  :

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \exp(-\tau(\hat{H} - E_G))|\Psi_0\rangle = \langle \Psi_G | \Psi_0 \rangle |\Psi_G\rangle. \quad (1.14)$$

L'opérateur d'évolution opère finalement comme un projecteur sur l'état fondamental  $|\Psi_G\rangle$  du sous-espace propre du hamiltonien ayant un recouvrement différent de zéro avec l'état initial. Ce résultat signifie qu'il est en théorie possible de retrouver n'importe quel état stationnaire en propageant pendant un temps imaginaire suffisamment long un vecteur  $|\Psi_0\rangle$  judicieusement choisi, c'est-à-dire tel que ses composantes sur les états propres non désirés soit nulles. Concrètement, le choix de l'état initial peut être guidé par des arguments de symétrie : l'évolution d'un état labellé de nombres quantiques particuliers aboutit à l'état fondamental du secteur de symétrie correspondant.

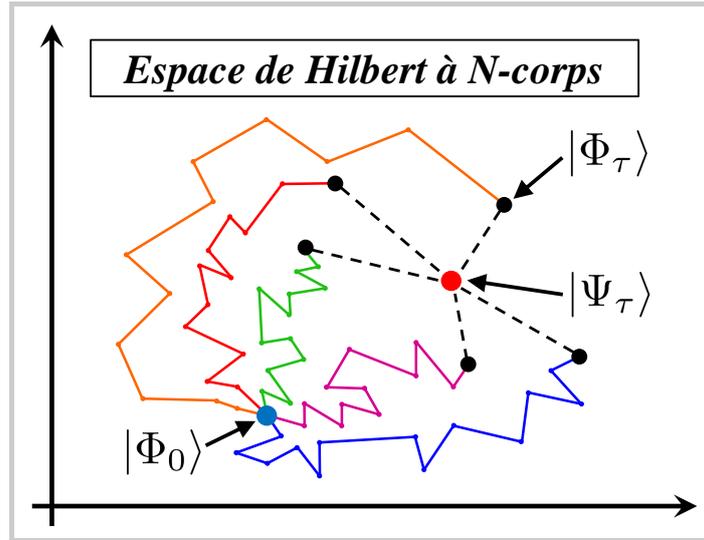
En appliquant les concepts généraux de la section précédente, nous pouvons à tout moment envisager de reconstruire un état  $|\Psi_\tau\rangle$  se propageant avec le temps imaginaire en moyennant des états stochastiques  $|\Phi\rangle$  de particules indépendantes dont la loi de probabilité  $P_\Psi(\Phi, \tau)$  varie désormais avec  $\tau$ . Nous supposons par la suite que l'état initial est également un déterminant de Slater. Dans ce cas,  $P_\Psi$  est donc une distribution de Dirac au temps<sup>3</sup>  $\tau = 0$ . Seul un hamiltonien à un corps peut conserver cette structure au cours de la propagation, un élargissement de la distribution des déterminants de Slater étant inéluctable en présence d'interactions à deux corps. Deux stratégies différentes émergent alors pour échantillonner  $|\Psi_\tau\rangle$  :

- chercher à convertir l'équation de Schrödinger (1.10) pour un hamiltonien donné en une équation aux dérivées partielles de type Fokker-Planck gouvernant l'évolution de la loi de probabilité  $P_\Psi(\Phi, \tau)$ . Nous pouvons néanmoins tout aussi bien adopter une approche similaire à celle de Langevin en animant les déterminants de Slater d'un mouvement brownien en temps imaginaire. Un tel programme n'est réalisable qu'à condition que les « termes au bord » faisant intervenir le comportement asymptotique de la loi de probabilité s'annulent collectivement. Cette hypothèse étant généralement impossible à vérifier, il subsiste un doute sur l'équivalence des méthodes QMC ainsi obtenues avec la propagation exacte. Le schéma QMC « gaussien »<sup>4</sup> basé sur des opérateurs densité Hartree-Fock [25, 39, 40], ou la représentation  $P$ -positive en termes d'états cohérents pour des bosons [41, 42], ont été construits en suivant la démarche que nous venons brièvement de décrire.
- chercher directement les termes déterministes et stochastiques, dits *termes de dérive et de diffusion*, des équations du mouvement que doivent satisfaire les états individuels formant les déterminants de Slater afin de retrouver en moyenne la dynamique exacte en temps imaginaire de  $|\Phi_0\rangle$ . Comme nous allons le voir par la suite, plusieurs équations différentielles sont en général possibles. Elles conduisent à des distributions de probabilité différant par leurs moments d'ordre supérieur à un et donc par leur efficacité à reconstruire les observables. Cette stratégie, initialement proposée pour le problème à  $N$ -bosons en interaction [43], est celle que nous emprunterons tout au long du manuscrit.

Quelle que soit la stratégie privilégiée, les états de fermions indépendants obtenus après une propagation stochastique suffisamment longue représentent un échantillonnage de l'état fonda-

3. Par souci de légèreté, il nous arrivera de désigner le temps imaginaire simplement par temps, aucune ambiguïté n'étant à craindre étant donné que nous ne traiterons pas de problème en temps réel.

4. Cette méthode sera examinée au chapitre 4 dans le cadre du modèle de Hubbard.



**Figure 1.4** – Représentation schématique des différentes réalisations de l'évolution stochastique d'un état de particules indépendantes. Quand le temps imaginaire tend vers l'infini, le barycentre du nuage de points qu'elles forment est le vecteur propre  $|\Psi_G\rangle$  du hamiltonien.

mental du hamiltonien

$$\exp(-\tau \hat{H})|\Phi_0\rangle = \mathbb{E}[|\Phi_\tau\rangle] \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\propto} |\Psi_G\rangle, \quad (1.15)$$

avec  $|\Phi_\tau\rangle$  une réalisation stochastique au temps  $\tau$  et où les facteurs de proportionnalité omis se déduisent de la relation (1.14).

Les méthodes QMC s'appuyant sur la propagation en temps imaginaire d'un état donné pour le projeter sur l'état fondamental sont communément dénommées en anglais « *Projector Quantum Monte-Carlo methods* » dans la littérature. Elles sont le plus souvent mises en œuvre pour reconstruire seulement l'état fondamental d'un système, mais peuvent également permettre d'échantillonner les états excités en choisissant convenablement le vecteur initiant le mouvement brownien. Citons par exemple l'étude des états excités de la molécule de di-carbone dans la référence [44], ou les calculs *ab initio* en physique nucléaire pour déterminer les propriétés des premiers états de noyaux légers à partir d'une interaction « nue » entre les nucléons [9–12].

Finalement, la reconstruction d'un état propre du hamiltonien est accessible par le biais d'une marche aléatoire durant un grand temps imaginaire d'une population d'états de particules indépendantes, qui sont logiquement appelés *marcheurs*. Les différentes réalisations  $|\Phi_\tau\rangle$  décrivent des trajectoires browniennes, comme schématiquement illustré par figure 1.4, et peuplent à chaque instant  $\tau$  un nuage de points dont le barycentre se confond avec l'état exact  $|\Psi_\tau\rangle$ .

## 1.2.2 La dynamique standard à champs auxiliaires

Nous l'avons déjà précisé : le mouvement brownien pour les états individuels des marcheurs qui offre une reproduction exacte en moyenne de la propagation en temps imaginaire d'un état initial donné n'est en aucun cas unique. À titre d'exemple et dans le but de disposer d'un schéma de référence, nous allons en premier lieu focaliser notre attention sur la marche

aléatoire la plus simple que l'on puisse développer au sein de la variété des déterminants de Slater. Elle correspond à la méthode QMC dite<sup>5</sup> « à champs auxiliaires », et qui est très couramment employée dans différents domaines (voir par exemple les applications des références [45] et [22] en physique de la matière condensée et en physique nucléaire respectivement).

L'implémentation de la méthode nécessite au préalable de réécrire le hamiltonien  $\hat{H}$  comme une forme quadratique d'opérateurs à un corps. Dans le langage de la seconde quantification,  $\hat{H}$  est donné par

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \sum_{i,j} K_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_l,$$

où  $\hat{c}_i^\dagger$  et  $\hat{c}_i$  sont les opérateurs de création et d'annihilation d'un fermion dans un état  $|u_i\rangle$  d'une base orthonormée à un corps de dimension  $d$  finie. Ils vérifient les relations d'anticommuation

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0 \quad ; \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad (1.16)$$

et  $K_{ij}$  et  $V_{ijkl}$  représentent respectivement les éléments de matrice des parties à un et deux corps. L'écriture de  $\hat{H}$  que nous cherchons à atteindre est

$$\hat{H} = \hat{T} - \sum_s \omega_s \hat{O}_s^2, \quad (1.17)$$

avec  $\hat{T} = \sum_{i,j} T_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$  et  $\hat{O}_s = \sum_{i,j} (O_s)_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$ . Utilisons dans un premier temps les relations d'anticommuation (1.16) afin d'avoir

$$\hat{H} = \hat{T} - \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l,$$

l'opérateur  $\hat{T}$  incluant le terme à un corps issu de l'interaction,  $T_{ij} = K_{ij} + \sum_k V_{ikkj}$ . Introduisons ensuite  $\alpha$  et  $\beta$  pour désigner respectivement les couples d'indices  $(i; k)$  et  $(j; l)$ , et la matrice  $M$  de dimension  $d^2$  d'éléments  $M_{\alpha\beta} = V_{ijkl}/4$ . Vu que  $\hat{V} = \hat{V}^\dagger$ , la matrice  $M$  est hermitique et par suite diagonalisable, nous procurant la possibilité d'user de sa décomposition spectrale pour exprimer ses éléments en fonction des vecteurs propres  $\{\mathcal{V}_s\}$  et valeurs propres réelles  $\{\omega_s\}$  comme

$$M_{\alpha\beta} = \sum_s \omega_s (\mathcal{V}_s)_\alpha (\mathcal{V}_s)_\beta^*.$$

Nous parvenons donc à la forme quadratique souhaitée (1.17) du hamiltonien en posant simplement  $(O_s)_{ij} = (\mathcal{V}_s)_{(i;j)}$ . Le nombre d'opérateurs à un corps  $\hat{O}_s$  est de ce fait généralement égal à la dimension de la matrice  $M$ , soit  $d^2$ , mais peut néanmoins être beaucoup plus faible pour certains modèles. Signalons enfin que la procédure ci-dessus pour aboutir à (1.17) n'est absolument pas unique. En d'autres termes, plusieurs décompositions peuvent être trouvées pour un même hamiltonien.

Considérons désormais l'état résultant de la propagation exacte d'un déterminant de Slater pendant une durée infiniment courte  $d\tau$ . À l'aide de la forme (1.17) du hamiltonien, l'application de l'opérateur d'évolution sur un marcheur  $|\Phi_\tau\rangle$  à la date  $\tau$  conduit, au premier ordre en  $d\tau$ , à l'état corrélé

$$\exp(-d\tau \hat{H}) |\Phi_\tau\rangle = |\Phi_\tau\rangle - d\tau \hat{H} |\Phi_\tau\rangle = |\Phi_\tau\rangle - d\tau \hat{T} |\Phi_\tau\rangle + d\tau \sum_s \omega_s \hat{O}_s^2 |\Phi_\tau\rangle. \quad (1.18)$$

D'autre part, l'exponentielle d'un opérateur à un corps  $\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$  transforme simplement un déterminant quelconque  $|\Phi\rangle$ , d'orbitales  $|\phi_n\rangle$ , en un nouveau déterminant  $\exp(\hat{A})|\Phi\rangle$

5. En anglais, « Auxiliary-Field Quantum Monte-Carlo methods ».

formé à partir des états individuels  $\exp(A)|\phi_n\rangle$ . En conséquence, l'état du marcheur à la date  $\tau + d\tau$  peut toujours s'écrire

$$|\Phi_{\tau+d\tau}\rangle = \exp(d\hat{x})|\Phi_\tau\rangle = |\Phi_\tau\rangle + d\hat{x}|\Phi_\tau\rangle + \frac{1}{2}d\hat{x}^2|\Phi_\tau\rangle + \dots, \quad (1.19)$$

avec  $d\hat{x} = \sum_{i,j} dx_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$  un opérateur à un corps. Notre objectif se résume donc maintenant à trouver la matrice  $dx$  de manière à reconstruire au premier ordre la propagation exacte en comparant les relations (1.18) et (1.19). Il apparaît immédiatement qu'une évolution purement déterministe du marcheur est impossible, hormis bien sûr pour un système de particules libres auquel cas il suffit de choisir  $dx = -d\tau K$ . Avec une interaction à deux corps, seules des contributions proportionnelle à  $\sqrt{d\tau}$  dans la matrice  $dx$  sont en mesure de retrouver *via*  $dx^2$  les termes quadratiques du développement (1.18). Ces contributions vont toutefois également se manifester par des termes à un corps parasites en  $\sqrt{d\tau}$  qui n'ont aucune contrepartie dans la dynamique exacte. L'astuce consiste alors à les rendre fluctuants avec une moyenne nulle. Mathématiquement, il s'agit de faire appel aux incréments infinitésimaux  $dW_s$  de processus stochastiques de Wiener  $\{W_s\}$  dans le calcul d'Ito [46]. Ces objets satisfont en effet

$$\forall s, s' : \mathbb{E}[dW_s] = 0 \quad ; \quad dW_s dW_{s'} = \delta_{ss'} d\tau. \quad (1.20)$$

Concrètement, leur simulation sur une petite durée  $\Delta\tau$  finie passe par l'introduction de variables aléatoires  $\{\eta_s\}$  de moyenne nulle et de variance unité qui permettent d'accéder aux incréments  $\Delta W_s = \int_\tau^{\tau+\Delta\tau} dW_s$  selon  $\Delta W_s = \eta_s \sqrt{\Delta\tau}$ . Les variables  $\{\eta_s\}$  sont communément appelées *champs auxiliaires* et souvent générées suivant une distribution normale. Finalement, en choisissant l'opérateur

$$d\hat{x} = -d\tau \hat{T} + \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s \hat{O}_s, \quad (1.21)$$

on s'assure aisément que la dynamique exacte en temps imaginaire d'un état de particules indépendantes est bien reproduite en moyenne au premier ordre en  $d\tau$  :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[|\Phi_{\tau+d\tau}\rangle] &= \mathbb{E}[\exp(d\hat{x})|\Phi_\tau\rangle] \\ &= |\Phi_\tau\rangle + \left(-d\tau \hat{T} + \sum_s \sqrt{2\omega_s} \mathbb{E}[dW_s] \hat{O}_s\right) |\Phi_\tau\rangle + \frac{1}{2} \left(\sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s \hat{O}_s\right)^2 |\Phi_\tau\rangle, \end{aligned}$$

soit

$$\mathbb{E}[|\Phi_{\tau+d\tau}\rangle] = |\Phi_\tau\rangle - d\tau \hat{H} |\Phi_\tau\rangle = \exp(-d\tau \hat{H}) |\Phi_\tau\rangle. \quad (1.22)$$

Les états individuels composant le marcheur  $|\Phi_{\tau+d\tau}\rangle$  sont ainsi donnés par

$$\exp(dx)|\phi_n\rangle = |\phi_n\rangle + dx|\phi_n\rangle + \frac{1}{2}dx^2|\phi_n\rangle = |\phi_n\rangle + d|\phi_n\rangle,$$

avec

$$d|\phi_n\rangle = \left[-d\tau \left(T - \sum_s \omega_s O_s^2\right) + \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s O_s\right] |\phi_n\rangle, \quad (1.23)$$

La dynamique que nous venons d'établir pour les états de particules indépendantes représente le cœur de la *méthode QMC standard à champs auxiliaires* [47, 48]. La démarche adoptée ici n'est cependant pas la façon traditionnelle de la présenter. Habituellement, le temps est tout d'abord discrétisé en pas  $\Delta\tau$  petits mais finis et la clé pour reformuler l'évolution exacte réside dans la *transformation de Hubbard-Stratonovich* [49, 50]. Nous démontrerons de nouveau le schéma standard à la section 3.4 en suivant ce cheminement, ce qui nous fournira une technique de résolution pratique d'équations différentielles stochastiques. En outre, nous remarquons que le nombre de termes fluctuants est égal au nombre de termes quadratiques dans la décomposition (1.17) du hamiltonien. Il s'avère par conséquent judicieux de rechercher à réécrire  $\hat{H}$  sous une forme (1.17) contenant un minimum d'opérateurs  $\hat{O}_s$  afin de réduire les fluctuations statistiques lors de la reconstruction QMC de l'état à  $N$ -corps.

### 1.2.3 La dynamique guidée par un état d'essai

En dépit de son utilisation dans la plupart des traitements QMC, la schéma à champs auxiliaires ne constitue pas la reformulation optimale de la dynamique en temps imaginaire de l'état à  $N$ -corps  $|\Psi_\tau\rangle$ . La croissance de l'erreur quadratique moyenne  $\mathbb{E}[\delta_\tau^2]$  n'y est en effet pas rendue minimale. Un schéma QMC remplissant un tel critère a été identifié en 2002. Il repose sur une dynamique à un corps pilotée par le hamiltonien de champ moyen Hartree-Fock et augmentée d'excitations stochastiques 1 particule–1 trou [51]. Chaque réalisation  $y$  est de plus séparée de l'état exact par une distance  $\delta_\tau = \|\Psi_\tau - \Phi_\tau\|$  bornée à tout instant ; la variance d'une observable quelconque est donc assurée de ne pas diverger [52]. Cette méthode a essentiellement été appliquée pour étudier le développement de corrélations d'appariement dans un système unidimensionnel d'atomes froids piégés dans un puits harmonique ou sur un tore en rotation [53].

Dans l'optique d'améliorer l'efficacité de la dynamique standard, S. Zhang et H. Krakauer ont proposé d'incorporer dans le mouvement des marcheurs une *fonction d'importance* donnée par leur recouvrement avec un *état d'essai*  $|\Psi_T\rangle$ , ou *état test*, préalablement choisi [54–56]. Cette idée est très similaire aux *méthodes d'échantillonnage préférentiel* couramment employées dans les calculs Monte-Carlo [57]. Leur principe est de modifier la loi de probabilité selon laquelle sont générées les différentes réalisations afin de réduire la variance. Dans le cadre de la reconstruction d'un état quantique  $|\Psi\rangle$ , on écrit ainsi

$$|\Psi\rangle = \mathbb{E}[|\Phi\rangle] = \mathbb{E}\left[I(\Phi)\frac{|\Phi\rangle}{I(\Phi)}\right] = \mathbb{E}_I\left[\frac{|\Phi\rangle}{I(\Phi)}\right], \quad (1.24)$$

où  $\mathbb{E}_I[\cdot]$  correspond à l'espérance mathématique de la nouvelle loi  $P_\Psi(\Phi)I(\Phi)$ . Les déterminants sont donc maintenant distribués selon l'importance de la fonction  $I(\Phi)$ . Ceci n'est évidemment valable qu'à la condition d'avoir  $I(\Phi)$  réel et positif pour tout  $|\Phi\rangle$ . Le produit scalaire entre deux états étant par essence de la mécanique quantique un nombre complexe, le recouvrement  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$  des marcheurs avec l'état d'essai ne peut jouer ce rôle. Pour contourner cette difficulté, nous allons alors chercher directement l'état exact comme une moyenne d'états de particules indépendantes pondérés par  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$ , soit

$$|\Psi_\tau\rangle = \exp(-\tau\hat{H})|\Phi_0\rangle = \mathbb{E}\left[\Pi_\tau\frac{|\Phi_\tau\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle}\right]. \quad (1.25)$$

L'ajout du facteur  $\Pi$  est nécessaire pour que le schéma stochastique soit équivalent à l'équation de Schrödinger en temps imaginaire, comme nous le verrons par la suite. En notant  $\theta_\tau$  la phase des « poids » statistiques  $\Pi_\tau$ , il est possible, comme pour  $I$  dans (1.24), d'absorber le module  $|\Pi_\tau|$  dans la distribution de probabilité  $P_\Psi$  du mouvement brownien des marcheurs

$$|\Psi_\tau\rangle = \mathbb{E}_{|\Pi|}\left[e^{i\theta_\tau}\frac{|\Phi_\tau\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle}\right],$$

avec  $\mathbb{E}_{|\Pi|}[\cdot]$  la moyenne sur la loi  $P_\Psi(\Phi, \tau)|\Pi_\tau|$ . Conformément aux conclusions de la sous-section 1.1.2, l'échantillonnage QMC exige une distance quadratique moyenne finie à tout instant entre  $|\Psi_\tau\rangle$  et une de ses réalisations stochastiques, ici l'état  $|W_\tau\rangle = e^{i\theta_\tau}|\Phi_\tau\rangle/\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$ . En d'autres termes, le second moment de la norme  $\|W_\tau\|$  doit être fini,

$$\mathbb{E}_{|\Pi|}\left[\|W_\tau\|^2\right] = \mathbb{E}\left[|\Pi_\tau|\frac{\|\Phi_\tau\|^2}{|\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle|^2}\right].$$

En conséquence, dès lors que le mouvement brownien engendre de façon significative des déterminants proches de la surface nodale  $\mathcal{N}_T$  de l'état d'essai, c'est-à-dire tels que  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle \approx 0$ ,

la variance de l'erreur sur l'état à  $N$ -corps diverge. Plus précisément,  $\Pi_\tau$  étant par construction du même ordre que le recouvrement  $\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle$ , le schéma QMC à dynamique guidée (1.25) ne pourra se traduire par un échantillonnage Monte-Carlo de l'état exact que si la distribution des marcheurs décroît plus rapidement vers zéro que  $\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle$  au voisinage de  $\mathcal{N}_T$ .

Comme précédemment, les incréments du « poids »  $\Pi_\tau$  et la forme des termes de dérive et de diffusion des équations différentielles stochastiques dictant la propagation des orbitales sont imposés par la volonté de reproduire en moyenne la dynamique exacte d'un marcheur entre deux dates infiniment proches  $\tau$  et  $\tau + d\tau$  :

$$\begin{aligned} \exp(-d\tau \hat{H}) \Pi_\tau \frac{|\Phi_\tau\rangle}{\langle \Psi_T | \Phi_t \rangle} &= \frac{\Pi_\tau}{\langle \Psi_T | \Phi_t \rangle} \left[ |\Phi_\tau\rangle - d\tau \hat{T} |\Phi_\tau\rangle + d\tau \sum_s \omega_s \hat{O}_s^2 |\Phi_\tau\rangle \right] \\ &= \mathbb{E} \left[ \Pi_{\tau+d\tau} \frac{|\Phi_{\tau+d\tau}\rangle}{\langle \Psi_T | \Phi_{\tau+d\tau} \rangle} \right]. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Par ailleurs, en représentant le mouvement infinitésimal d'un marcheur par l'exponentielle d'un opérateur à un corps  $d\hat{x}$  nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{\Pi_{\tau+d\tau}}{\langle \Psi_T | \Phi_{\tau+d\tau} \rangle} |\Phi_{\tau+d\tau}\rangle &= \frac{\Pi_\tau + d\Pi}{\langle \Psi_T | \exp(d\hat{x}) | \Phi_\tau \rangle} \exp(d\hat{x}) |\Phi_\tau\rangle \\ &= \frac{\Pi_\tau}{\langle \Psi_T | \Phi_t \rangle} \left( 1 + \frac{d\Pi}{\Pi_\tau} \right) \langle \exp(d\hat{x}) \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau}^{-1} \exp(d\hat{x}) |\Phi_\tau\rangle, \end{aligned} \quad (1.27)$$

où, pour tout opérateur  $\hat{A}$ , la quantité  $\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} = \langle \Psi_T | \hat{A} | \Phi_\tau \rangle / \langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle$  est souvent appelée *estimateur local* de l'observable. Cette terminologie est empruntée aux formalismes QMC basés sur une marche aléatoire dans l'espace des états de position parfaitement définie. Au premier ordre en  $d\tau$ , et en respectant les règles du calcul stochastique d'Ito, il vient de plus

$$\begin{aligned} \langle \exp(d\hat{x}) \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau}^{-1} &= \left( 1 + \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} + \frac{1}{2} \langle d\hat{x}^2 \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} \right)^{-1} \\ &= 1 - \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} - \frac{1}{2} \langle d\hat{x}^2 \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} + \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau}^2 + \mathcal{O}(d\tau^2). \end{aligned}$$

L'évolution élémentaire (1.27) d'une réalisation devient ainsi

$$\begin{aligned} \frac{\Pi_{\tau+d\tau}}{\langle \Psi_T | \Phi_{\tau+d\tau} \rangle} |\Phi_{\tau+d\tau}\rangle &= \frac{\Pi_\tau}{\langle \Psi_T | \Phi_t \rangle} \left( 1 + \frac{d\Pi}{\Pi_\tau} - \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} - \frac{1}{2} \langle d\hat{x}^2 \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} \right. \\ &\quad \left. + \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau}^2 - \frac{d\Pi}{\Pi_\tau} \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} \right) \left( 1 + d\hat{x} + \frac{1}{2} d\hat{x}^2 \right) |\Phi_\tau\rangle. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Il suffit alors de comparer cette expression avec la dynamique exacte (1.26) pour déterminer les conditions sous lesquelles le schéma guidé lui est en moyenne équivalent :

$$1 + \mathbb{E} \left[ \frac{d\Pi}{\Pi_\tau} - \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} \right] - \frac{1}{2} \langle d\hat{x}^2 \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} + \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau}^2 - \frac{d\Pi}{\Pi_\tau} \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} = 1 \quad (1.29a)$$

$$\mathbb{E}[d\hat{x}] + \frac{d\Pi}{\Pi_\tau} d\hat{x} - \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} d\hat{x} = -d\tau \hat{T} \quad (1.29b)$$

$$\frac{1}{2} d\hat{x}^2 = d\tau \sum_s \omega_s \hat{O}_s^2. \quad (1.29c)$$

Ces conditions ne définissent pas la dynamique des états individuels et du « poids » de façon unique. Le plus naturel concernant le terme quadratique (1.29c) est d'assigner à  $d\hat{x}$  une partie stochastique  $d\hat{x}^{(\text{stoch})}$  identique à celle du schéma standard à champs auxiliaire, à savoir

$$d\hat{x}^{(\text{stoch})} = \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s \hat{O}_s, \quad (1.30)$$

où les  $dW_s$  désignent des différentielles de processus de Wiener indépendants qui, rappelons le, vérifient

$$\forall s : \mathbb{E}[dW_s] = 0 \quad ; \quad dW_s dW_{s'} = \delta_{ss'} d\tau .$$

Par ailleurs, en considérant que la variation  $d\Pi$  du « poids » de chaque marcheur ne fait appel qu'à ces mêmes processus, nous pouvons toujours mettre sa contribution fluctuante  $d\Pi^{(\text{stoch})}$  sous la forme générale

$$d\Pi^{(\text{stoch})} = \Pi \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s g_s . \quad (1.31)$$

Schématiquement, les grandeurs  $\{g_s\}$  introduites représentent — au facteur  $\Pi\sqrt{2\omega_s}$  — les dérivées premières du « poids » par rapport à chaque processus  $W_s$ . Nous déduisons alors de (1.29b) le terme de dérive pour le mouvement des déterminants,

$$\mathbb{E}[d\hat{x}] = -d\tau \left[ \hat{T} - 2 \sum_s \omega_s \left( \langle \hat{O}_s \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} - g_s \right) \hat{O}_s \right] ,$$

puis celui pour l'évolution du « poids » au travers de la relation (1.29a),

$$\mathbb{E}[d\Pi] = -\Pi d\tau \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} .$$

Comme pour le schéma conventionnel à champs auxiliaires, il ne reste plus qu'à traduire la dynamique brownienne des marcheurs au niveau de leurs états individuels en utilisant  $|\phi_{n,\tau+d\tau}\rangle = \exp(dx)|\phi_{n,\tau}\rangle$  ou, de manière équivalente,  $d|\phi_n\rangle = (dx + \frac{1}{2}dx^2)|\phi_n\rangle$ . Nous obtenons finalement le système d'équations différentielles stochastiques suivant :

$$\begin{cases} d\Pi = \Pi \left( -d\tau \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} + \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s g_s \right) & \text{avec } \Pi_0 = \langle \Psi_T | \Phi_0 \rangle \\ d|\phi_n\rangle = \left[ -d\tau \left( T - \sum_s \omega_s [O_s^2 + 2(\langle \hat{O}_s \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} - g_s) O_s] \right) + \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s O_s \right] |\phi_n\rangle . \end{cases} \quad (1.32)$$

Les scalaires  $\{g_s\}$  restent donc indéterminés par les conditions d'exactitude en moyenne (1.29) de la dynamique, ce qui amène parfois à les qualifier de « jauges ». Par exemple, avec  $g_s = \langle \hat{O}_s \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau}$ ,  $\forall s$ , nous retrouvons le schéma standard à champs auxiliaires. Il est effectivement trivial que dans ce cas le mouvement des orbitales (1.32) est bien le même que (1.23), et que, d'autre part, l'évolution des « poids » devient

$$\begin{aligned} \frac{\Pi_{\tau+d\tau}}{\Pi_\tau} &= 1 - d\tau \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} + \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s \langle \hat{O}_s \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} \\ &= 1 + \langle d\hat{x} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} + \frac{1}{2} \langle (d\hat{x})^2 \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} \\ &= \frac{\langle \Psi_T | \exp(d\hat{x}) | \Phi_\tau \rangle}{\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle} = \frac{\langle \Psi_T | \Phi_{\tau+d\tau} \rangle}{\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle} . \end{aligned}$$

Il en résulte  $\Pi_\tau = \langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle$  et la reconstruction (1.25) de l'état exact se ramène à  $|\Psi_\tau\rangle = \mathbb{E}[|\Phi_\tau\rangle]$ . D'autres choix pour les jauges peuvent améliorer l'efficacité de l'échantillonnage dans la mesure où elles influent sur les moments d'ordres supérieurs à un, et donc sur l'erreur quadratique moyenne. Durant  $d\tau$ , la croissance de cette erreur due à une réalisation donnée au temps  $\tau$  s'obtient en effet à partir du carré de la norme de l'expression (1.28) donnant son mouvement infinitésimal. On montre alors aisément que des jauges  $\{g_s\}$  augmentent la dispersion sur l'état exact par la contribution  $|d\Pi|^2$  strictement positive et du premier ordre en  $d\tau$  auquel elles donnent naissance. Par conséquent, le choix  $g_s = 0$ ,  $\forall s$  est ici optimal. Il conduit à des « poids » statistiques ne fluctuant qu'en raison du mouvement brownien des orbitales des déterminants. De plus, l'état d'essai  $|\Psi_T\rangle$  intervient maintenant dans la dynamique *via* l'estimateur local des opérateurs  $\hat{O}_s$ . Il va ainsi *guider* les trajectoires que suivent les marcheurs,

c'est pourquoi nous avons adopté l'appellation : *schéma à dynamique guidée*. Soulignons enfin qu'aucune hypothèse n'a été faite au cours de la démonstration qui précède à propos de la forme de cet *état guide*, sa seule contrainte étant de ne pas être perpendiculaire à l'état fondamental. Il peut donc très bien s'agir d'un état corrélé et l'efficacité du schéma de reconstruction sera *a priori* d'autant meilleure que celui-ci sera proche de l'état exact.

Pour conclure, la technique d'échantillonnage préférentiel pour réduire la variance peut être implémentée dans les schéma QMC à champs auxiliaires par une modification de la dynamique des marcheurs. L'état exact est alors reconstruit comme une moyenne d'états à particules indépendantes pondérés par leur recouvrement avec un état d'essai  $|\Psi_T\rangle$  selon :

$$|\Psi_T\rangle = \exp(-\tau\hat{H})|\Phi_0\rangle = \mathbb{E}\left[\Pi_\tau \frac{|\Phi_T\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi_T\rangle}\right]. \quad (1.33)$$

Les « poids »  $\Pi_\tau$  de chaque réalisation évoluent exponentiellement avec l'énergie locale accumulée depuis le début du mouvement :

$$\Pi_\tau = \langle\Psi_T|\Phi_0\rangle \exp\left[-\int_0^\tau d\tau' \langle\hat{H}\rangle_{\Psi_T, \Phi_{\tau'}}\right], \quad (1.34)$$

Enfin, les états individuels suivent une dynamique en temps imaginaire régie par les équations différentielles stochastiques

$$d|\phi_n\rangle = \left[-d\tau\left(T - \sum_s \omega_s [O_s^2 + 2\langle\hat{O}_s\rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} O_s]\right) + \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s O_s\right] |\phi_n\rangle, \quad (1.35)$$

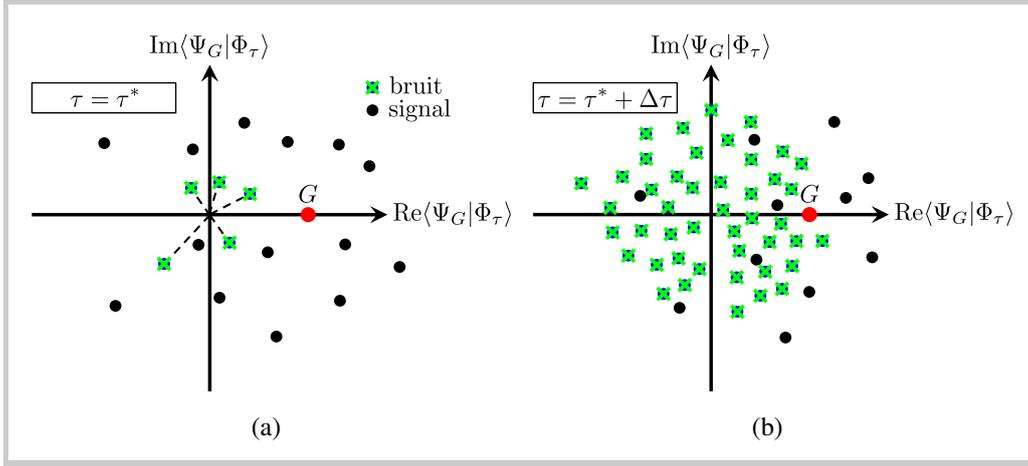
leur faisant décrire des trajectoires browniennes guidées par  $|\Psi_T\rangle$  au travers du terme de dérive.

## 1.3 Le problème de phase

La réinterprétation Monte-Carlo quantique d'un état quantique quelconque souffre généralement d'une pathologie communément appelée *problème de signe ou de phase* et qui s'avère intimement liée à la structuration de la variété des déterminants de Slater présentée en 1.1.1. Ce problème se manifeste par un rapport signal sur bruit qui tend inévitablement vers zéro avec le temps imaginaire, rendant l'échantillonnage totalement inopérant. Sauf indication contraire, nous nous placerons ici dans le cadre des méthodes QMC conventionnelles à champs auxiliaires, l'adaptation aux schémas à dynamique guidée étant immédiate.

### 1.3.1 Origine du problème

Comme nous l'avons suggéré à la section 1.1.1, le problème de phase survient dès que le mouvement brownien génère des déterminants de Slater qui se répartissent dans des domaines correspondants à différentes phases du recouvrement avec l'état fondamental  $|\Psi_G\rangle$ . Plus précisément, l'extraction de  $|\Psi_G\rangle$  devient impossible dès qu'une proportion importante des marcheurs correspond à des recouvrements  $\langle\Psi_G|\Phi_\tau\rangle$  qui se compensent quasiment parfaitement. Pour le comprendre, prenons appui sur la figure 1.5 qui représente schématiquement la répartition des points  $\langle\Psi_G|\Phi_\tau\rangle$  dans le plan complexe associé. Supposons qu'à une date  $\tau^*$  nous puissions isoler des marcheurs ayant collectivement un recouvrement moyen nul avec l'état fondamental. Du point de vue de la figure 1.5(a), ils constituent un nuage dont le barycentre est



**Figure 1.5** – Illustration de l'émergence du problème de phase dans les approches Monte-Carlo quantiques. Le point rouge représente l'état fondamental recherché  $|\Psi_G\rangle$ . Au temps  $\tau^*$  (à gauche), certains points forment un nuage dont le barycentre se confond exactement avec l'origine. Les marcheurs correspondant ne contribuant pas à la reconstruction de  $|\Psi_G\rangle$ , ils ne font que détériorer le rapport signal sur bruit. Après une propagation pendant une durée  $\Delta\tau$  (à droite), le problème a *obligatoirement* empiré et le signal se trouve complètement noyé sous le bruit. Il est dans ce cas concrètement impossible d'extraire  $|\Psi_G\rangle$  de l'échantillonnage.

centré sur l'origine. Leur moyenne, notée  $|\Psi_\perp\rangle$ , est par définition un état orthogonal à  $|\Psi_G\rangle$  et, quelle que soit la durée  $\Delta\tau$  :

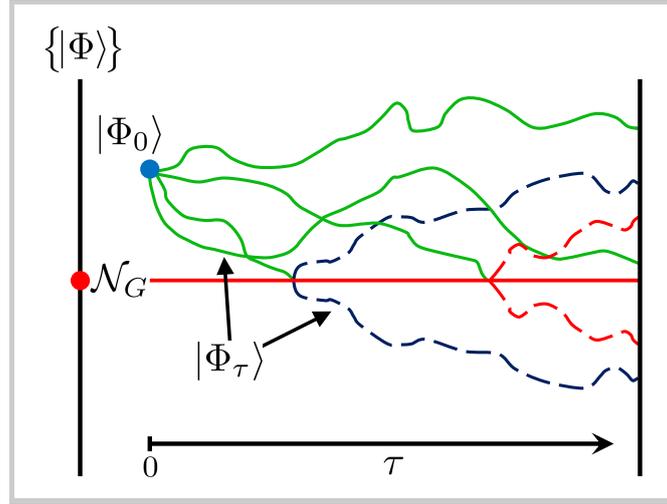
$$\begin{aligned} \langle \Psi_G | \Psi_\perp \rangle = 0 &\Rightarrow \langle \Psi_G | \exp(-\Delta\tau \hat{H}) | \Psi_\perp \rangle = \exp(-\Delta\tau E_G) \langle \Psi_G | \Psi_\perp \rangle = 0 \\ &= \mathbb{E}[\langle \Psi_G | \Phi_{\tau^* + \Delta\tau} \rangle] . \end{aligned} \quad (1.36)$$

Au temps  $\tau^* + \Delta\tau$ , les marcheurs issus des réalisations pathologiques de la date  $\tau^*$  forment donc une population possédant elle aussi un recouvrement moyen nul avec  $|\Psi_G\rangle$  (figure 1.5(b)). Par conséquent, le nombre de réalisations ne contribuant pas à l'échantillonnage augmente avec le temps imaginaire et leur présence ne fait que détériorer le rapport signal sur bruit. En parallèle, la proportion de celles participant de façon effective à la reconstruction de l'état fondamental décroît exponentiellement. Ce phénomène n'est pas incompatible avec un premier moment égal à  $|\Psi_G\rangle$  mais engendre une augmentation exponentielle de l'erreur moyenne et de l'erreur quadratique moyenne.

Une population à une date  $\tau^*$  donnant naissance au problème de phase peut *par exemple* résulter de la propagation stochastique d'un marcheur ayant antérieurement traversé la surface nodale  $\mathcal{N}_G$  de l'état fondamental puisque

$$\begin{aligned} \langle \Psi_G | \exp(-(\tau^* - \tau_G) \hat{H}) | \Phi_{\tau_G} \rangle &= \exp(-(\tau^* - \tau_G) E_G) \langle \Psi_G | \Phi_{\tau_G} \rangle = 0 \\ &= \langle \Psi_G | \mathbb{E}[|\Phi_{\tau^*}\rangle] \rangle = \langle \Psi_G | \Psi_\perp \rangle . \end{aligned}$$

où  $\tau_G$  désigne le temps de croisement de cette surface. Lorsque que le modèle considéré autorise un échantillonnage par des déterminants composés d'états individuels à composantes réelles, ce scénario est la seule possibilité pour un marcheur de voir varier la phase de son recouvrement avec  $|\Psi_G\rangle$ . Sur la figure 1.5,  $\langle \Psi_G | \Phi_\tau \rangle$  est en effet dans ce cas contraint de se déplacer le long de l'axe réel et ne peut changer de signe qu'en croisant l'origine. Comme l'illustre la figure 1.6, les trajectoires browniennes issues d'un marcheur  $|\Phi_{\tau_G}\rangle$  franchissant la surface nodale se distribuent alors symétriquement de part et d'autre de  $\mathcal{N}_G$ , et mènent à



**Figure 1.6** – Illustration de l'émergence du problème de signe dans un échantillonnage QMC. Chaque trajectoire correspond à une évolution stochastique au sein de la variété des déterminants de Slater schématiquement représentée par l'axe vertical. Les trajectoires en traits continus verts contribuent effectivement à la reconstruction de l'état fondamental, tandis que celles ayant croisé la surface nodale, en tirets rouges et bleus, mènent à des populations qui s'annihilent en moyenne parfaitement.

deux populations dont les recouvrements moyens avec  $|\Psi_G\rangle$  sont strictement opposés. Il s'agit là d'une explication du *problème de signe* analogue à celle traditionnellement invoquée dans le cadre d'une marche aléatoire dans l'espace des positions [27]. Avec des composantes complexes pour les états individuels, le changement de phase n'exige pas en revanche le passage par la surface nodale de l'état fondamental.

Même s'ils relèvent de l'exception, quelques modèles permettent un échantillonnage QMC de leur état fondamental sans exhiber de problème de phase. Nous en rencontrerons deux exemples dans ce mémoire :

- au chapitre 3, dans le cadre du modèle en couches nucléaire avec des interactions résiduelles schématiques ;
- au chapitre 4, avec le modèle de Hubbard pour des systèmes d'électrons fortement corrélés dans des régimes bien particuliers.

À ce jour, le seul critère général pour garantir l'absence de problème de signe/phase repose sur l'existence d'une transformation  $\mathcal{T}$  antilinéaire, satisfaisant  $\mathcal{T}^2 = -\mathbb{1}$ , et sous laquelle les équations du mouvement brownien des marcheurs sont invariantes<sup>6</sup> [58]. En écrivant la dynamique des états individuels sous la forme générique  $d|\phi_n\rangle = dh|\phi_n\rangle$ , on requiert précisément que  $\mathcal{T}dh\mathcal{T}^{-1} = dh$ . En conséquence, si le déterminant  $|\Phi_\tau\rangle$  est construit à partir de couples d'orbitales ( $|\phi_n\rangle; |\bar{\phi}_n\rangle = \mathcal{T}|\phi_n\rangle$ ) reliées par la transformation  $\mathcal{T}$ , il en est de même au temps  $\tau + d\tau$  puisque  $\mathcal{T}|\phi_{n,\tau+d\tau}\rangle$  correspond alors exactement à la propagation infinitésimale de  $|\bar{\phi}_{n,\tau}\rangle$  :

$$\mathcal{T}|\phi_{n,\tau+d\tau}\rangle = |\bar{\phi}_{n,\tau}\rangle + \mathcal{T}dh\mathcal{T}^{-1}|\phi_{n,\tau}\rangle = |\bar{\phi}_{n,\tau}\rangle + dh|\bar{\phi}_{n,\tau}\rangle. \quad (1.37)$$

Sous réserve d'initier le mouvement en temps imaginaire avec un déterminant de Slater  $|\Phi_0\rangle$  ayant la structure précédente, celle-ci se retrouve donc pour tous les marcheurs  $|\Phi_\tau\rangle$  générés à

6. Dans la plupart des cas,  $\mathcal{T}$  s'identifiera au renversement du temps

n'importe quel temps  $\tau$ . Ainsi

$$\begin{aligned} \langle \Psi_G | \Phi_\tau \rangle &\underset{\tau_0 \rightarrow +\infty}{=} \frac{\exp(\tau_0 E_G)}{\langle \Psi_G | \Phi_0 \rangle} \langle \Phi_0 | \exp(-\tau_0 \hat{H}) | \Phi_\tau \rangle \\ &\underset{\tau_0 \rightarrow +\infty}{=} \frac{\exp(\tau_0 E_G)}{\langle \Psi_G | \Phi_0 \rangle} \mathbb{E}[\langle \Phi_{\tau_0} | \Phi_\tau \rangle] . \end{aligned} \quad (1.38)$$

Or, si nous représentons chaque déterminant  $|\Phi\rangle$  par la matrice  $\Phi$  de dimension  $d \times N$  dont les colonnes correspondent aux composantes des états individuels occupés, nous avons [36]

$$\langle \Phi_{\tau_0} | \Phi_\tau \rangle = \det \left( \Phi_{\tau_0}^\dagger \Phi_\tau \right) .$$

Mais, dans une base à un corps dont les vecteurs peuvent également se regrouper par paires  $(|u_i\rangle; |\bar{u}_i\rangle)$  et que nous noterons donc  $\{|u_1\rangle, \dots, |u_{d/2}\rangle, |\bar{u}_1\rangle, \dots, |\bar{u}_{d/2}\rangle\}$ , chaque marcheur  $|\Phi\rangle$  est représenté par une matrice du type

$$\Phi = \begin{pmatrix} A & -B^* \\ B & A^* \end{pmatrix} . \quad (1.39)$$

En effet, si  $|\phi_n\rangle = \sum_i A_{in} |u_i\rangle + B_{in} |\bar{u}_i\rangle$ , sa  $\mathcal{T}$ -image est donnée par  $|\bar{\phi}_n\rangle = \sum_i A_{in}^* |\bar{u}_i\rangle - B_{in}^* |u_i\rangle$  vu que  $\mathcal{T}|\bar{u}_i\rangle = \mathcal{T}^2|u_i\rangle = -|u_i\rangle$ . Le produit  $\Phi_{\tau_0}^\dagger \Phi_\tau$  est alors une matrice  $N \times N$  ayant la structure (1.39) et son déterminant est de fait réel et positif<sup>7</sup>. Finalement, tous les marcheurs sont caractérisés par un recouvrement (1.38) avec l'état fondamental possédant la même phase. Seuls les systèmes avec un nombre  $N$  pair de particules entrent toutefois dans ce cadre compte-tenu de la structure que doit présenter l'état initial.

Pour conclure cette section, rappelons simplement le résultat essentiel auquel nous sommes parvenus : une dynamique stochastique en temps imaginaire pour les déterminants de Slater n'exhibe pas de problème de phase pour la reconstruction de l'état fondamental  $|\Psi_G\rangle$  si et seulement si la phase du recouvrement  $\langle \Psi_G | \Phi_\tau \rangle$  demeure constante au cours du mouvement brownien. Dans le cas contraire, la formation à un instant donné d'une famille de marcheurs possédant collectivement un recouvrement nul avec  $|\Psi_G\rangle$  contamine l'échantillonnage au point de conduire indubitablement à la destruction du rapport signal sur bruit dans la limite d'un temps imaginaire infini. À ce jour, aucun schéma QMC n'est en mesure, pour un hamiltonien général de fermions en interaction, de respecter à la fois les critères concernant la phase du recouvrement et le comportement asymptotique de la distribution de la norme des marcheurs.

### 1.3.2 Schémas de contrôle du problème

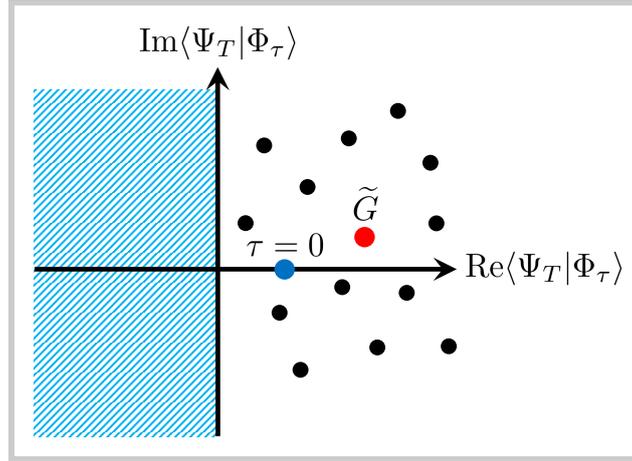
En règle générale, contrôler le problème de phase nécessite de recourir à des *approximations*, comme celle des *chemins contraints* [59–61], faisant appel à un état d'essai  $|\Psi_T\rangle$  non orthogonal à l'état fondamental exact. Dès lors,  $|\Psi_G\rangle$  pouvant être vu comme le résultat de la propagation de  $|\Psi_T\rangle$  pendant une très longue durée,

$$\langle \Psi_G | \Phi \rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\propto} \langle \Psi_T | e^{-\tau \hat{H}} | \Phi \rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \mathbb{E}[\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle] , \quad (1.40)$$

avec  $|\Phi_0\rangle = |\Phi\rangle$ . Ces méthodes profitent du lien (1.40) entre le recouvrement des marcheurs avec l'état fondamental et celui avec l'état d'essai pour éliminer les réalisations pathologiques.

L'échantillonnage s'en trouve par conséquent *biaisé*, et nous noterons  $\widetilde{e^{-\tau \hat{H}}}$  l'opérateur d'évolution approché qui en découle et  $|\tilde{\Psi}_G\rangle$  le vecteur d'état non normé ainsi obtenu au bout d'un temps imaginaire infiniment long pour approximer l'état fondamental.

7. La preuve s'avère immédiate pour une matrice diagonale, sinon elle s'appuie sur la réduction de Jordan [58].



**Figure 1.7** – Illustration du schéma de contrainte 2 permettant de contrôler le problème de phase. Le barycentre  $\tilde{G}$  des points générés dans la limite  $\tau + \infty$  en interdisant au mouvement brownien de peupler le demi-plan complexe  $\text{Re}\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle < 0$  ne peut se confondre avec l'origine. Il correspond au recouvrement entre l'état fondamental approché  $|\tilde{\Psi}_G\rangle$  et le marcheur  $|\Phi\rangle$  choisi pour initier la dynamique.

### Approximation 1

L'approche la plus intuitive est de conserver uniquement les marcheurs correspondant à une même phase pour le recouvrement  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$ . Cependant, si le mouvement brownien tend à peupler l'ensemble du plan complexe  $(\text{Re}\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle; \text{Im}\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle)$ , la quasi-totalité des déterminants de Slater vont se voir éliminés de l'échantillonnage. En procédant de cette manière, la distribution des recouvrements serait de fait fortement altérée par rapport à celle donnée par la dynamique. Le but est donc de trouver un compromis entre sa forme non contrainte et la nécessité de contrôler le problème de phase. Par contre, lorsque les marcheurs sont formés d'orbitales réelles, l'approximation simple  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle > 0$  est acceptable. Elle s'est par exemple révélée très efficace pour appréhender les systèmes d'électrons sur réseau décrits par le modèle de Hubbard (voir la section 4.2 et les références [59,60]).

### Approximation 2

Le recouvrement  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$  garde la possibilité de changer de phase, mais l'émergence de populations pathologiques est évitée en restreignant le mouvement brownien à se maintenir par exemple dans le demi-plan

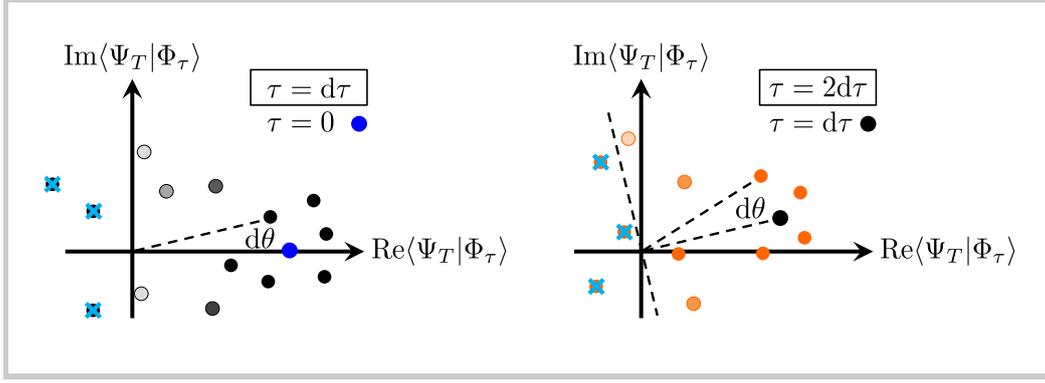
$$\text{Re}\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle > 0, \quad \forall \tau. \quad (1.41)$$

Comme le montre la figure 1.7, l'autre demi-plan étant interdit, le barycentre des points produits ne peut à aucun moment se confondre avec l'origine et ainsi  $\langle\tilde{\Psi}_G|\Phi\rangle > 0$  suite à la relation (1.40). Concrètement, cette approximation est aisément mise en œuvre par l'intermédiaire d'un échantillonnage préférentiel selon l'importance de  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$  :

$$\mathbb{E}[|\Phi_\tau\rangle] = \mathbb{E}\left[\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle \frac{|\Phi_\tau\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle}\right] \rightarrow \mathbb{E}_{\tilde{\Pi}}\left[\frac{|\Phi_\tau\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle}\right]$$

avec des réalisations  $|\Phi_\tau\rangle/\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$  distribuées selon le poids biaisé

$$\tilde{\Pi}_\tau = \max\{0; \text{Re}\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle\}.$$



**Figure 1.8** – Illustration du schéma de contrainte 3 permettant de contrôler le problème de phase. Au temps  $d\tau$  (à gauche), le point bleu associé à l'état initial arbitraire  $|\Phi\rangle$  donne naissance à un ensemble de réalisations (en noir) dont le poids statistique est indiqué par la transparence du point et dépend de la variation de phase  $d\theta$  du recouvrement avec l'état d'essai  $|\Psi_T\rangle$ . Celles subissant un déphasage supérieur à  $\pi/2$  en valeur absolue sont éliminées. Au temps  $2d\tau$  (à droite), chaque point de l'étape précédente génère un nouveau nuage (en orange) suivant le même processus, comme illustré pour un seul. Ainsi, au bout d'un temps imaginaire suffisamment long, le barycentre du nuage global appartiendra obligatoirement au demi-plan  $\text{Re}\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle > 0$ . En conséquence, le recouvrement  $\langle\tilde{\Psi}_G|\Phi\rangle$  avec le déterminant initial sera également caractérisé par  $\text{Re}\langle\tilde{\Psi}_G|\Phi\rangle > 0$ .

Le risque de variance infinie ne peut être rigoureusement écarté. Néanmoins, si le mouvement brownien tend à peupler l'ensemble du plan complexe associé à  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$ , la probabilité d'une accumulation des points autour de l'origine reste faible.

### Approximation 3 : l'approximation « cosinus »

L'idée sous-jacente à cette contrainte se rapproche de celle de l'approximation 1 en étant toutefois beaucoup moins restrictive [54–56]. Graphiquement, elle vise à engendrer un nuage de points dans le plan complexe de  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$  autour d'une phase donnée en altérant le poids statistique des marcheurs qui s'en éloignent trop et en évinçant ceux qui subissent un déphasage supérieur en valeur absolue à  $\pi/2$  à chaque étape du mouvement (voir la figure 1.8). Cette approximation est de nouveau facilement implémentée au travers d'un échantillonnage préférentiel avec des poids *biaisés*  $\tilde{\Pi}$  évoluant entre deux dates  $\tau$  et  $\tau + d\tau$  comme

$$\frac{\tilde{\Pi}_{\tau+d\tau}}{\tilde{\Pi}_\tau} = \left| \frac{\langle\Psi_T|\Phi_{\tau+d\tau}\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle} \right| \max\{0; \cos(d\theta)\}, \quad (1.42)$$

où  $d\theta$  est la phase du rapport des recouvrements entre les deux instants

$$d\theta = \arg \frac{\langle\Psi_T|\Phi_{\tau+d\tau}\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle}. \quad (1.43)$$

Ainsi, en vertu du facteur  $\cos(d\theta)$ , le poids d'un marcheur est d'autant plus réduit que la phase de son recouvrement avec l'état d'essai a varié durant  $d\tau$ , jusqu'à être rendu nul si jamais  $|d\theta| > \pi/2$ . En définitive, la population contient presque exclusivement des réalisations situées au voisinage immédiat de la phase initiale. En itérant le processus, quelques-unes vont rejoindre la région  $\text{Re}\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle < 0$  mais le barycentre du nuage de points va demeurer dans l'autre demi-plan, leurs poids ayant diminué au fil du temps imaginaire. Concernant les problèmes de variance infinie, la discussion tenue pour l'approximation 2 s'applique également ici.

Finalement, ces différentes techniques permettent un échantillonnage libre de problème de phase vis-à-vis de l'état fondamental approché  $|\tilde{\Psi}_G\rangle$  qu'elles génèrent.

Dans le cadre du schéma QMC à dynamique guidée (1.33), un calcul similaire à (1.40) montre que le problème de phase provient des « poids »  $\Pi_\tau$  des réalisations :

$$\langle \Psi_G | \Phi \rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\propto} \langle \Psi_T | e^{-\tau \hat{H}} | \Phi \rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \mathbb{E}[\Pi_\tau] ,$$

avec

$$\Pi_\tau = \langle \Psi_T | \Phi \rangle \exp \left[ - \int_0^\tau d\tau' \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T, \Phi_{\tau'}} \right] . \quad (1.44)$$

Les états individuels constituant les déterminants de Slater étant en général complexes, l'énergie locale et par suite  $\Pi_\tau$  le sont aussi. La phase du recouvrement  $\langle \Psi_G | \Phi \rangle$  n'est donc pas constante. Les méthodes de contrôle du problème de phase qui viennent d'être présentées doivent par conséquent être adaptées au niveau des « poids »  $\Pi_\tau$ . En prenant la partie réelle de l'énergie locale dans leur définition (1.44), on s'assure tout d'abord que les recouvrements  $\langle \Psi_G | \Phi \rangle$  avec l'état fondamental et  $\langle \Psi_T | \Phi \rangle$  avec l'état d'essai ont la même phase. Cette approximation n'est toutefois pas suffisante. En effet, si  $\langle \Psi_T | \Phi \rangle$  se répartit dans tout le plan complexe, elle n'évite pas le développement d'une population de réalisations  $|\Phi\rangle$  pathologiques ayant collectivement un recouvrement nul avec  $|\Psi_G\rangle$ . Il suffit alors également d'implémenter l'un des précédents schémas de contrainte qui garantissent tous de ne jamais générer de déterminants en moyenne orthogonaux à l'état test. Concrètement, à l'approximation « *cosinus* » que nous utiliserons par la suite, un état fondamental approché  $|\tilde{\Psi}_G\rangle$  sera reconstruit comme

$$|\tilde{\Psi}_G\rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\propto} \widetilde{e^{-\tau \hat{H}}} |\Phi_0\rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \frac{|\Phi_\tau\rangle}{\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle} \right] , \quad (1.45a)$$

avec une dynamique stochastique des états individuels inchangée (équation (1.35)) mais des poids biaisés  $\tilde{\Pi}_\tau$  évoluant selon

$$\frac{\tilde{\Pi}_{\tau+d\tau}}{\tilde{\Pi}_\tau} = \exp \left( -d\tau \operatorname{Re} \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} \right) \max \{ 0 ; \cos(d\theta) \} \quad ; \quad d\theta = \arg \frac{\langle \Psi_T | \Phi_{\tau+d\tau} \rangle}{\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle} . \quad (1.45b)$$

Le risque de variances infinies ne sera alors évacué qu'à la condition que la dynamique ne conduise pas à une accumulation de réalisations proche de l'origine du plan complexe associé au recouvrement  $\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle$ . Cependant, en raison de la contrainte en  $\cos(d\theta)$ , l'obtention d'un tel marcheur ne peut être qu'exceptionnelle, ce qui représente un autre avantage de cette contrainte.

L'équation (1.45) ci-dessus résume exactement le schéma Monte-Carlo quantique qui sera mis en œuvre au chapitre 3 dans le cadre du modèle en couches nucléaire après avoir construit au chapitre 2 un état d'essai adapté qui va donc à la fois guider et contraindre la dynamique en temps imaginaire des marcheurs.

## 1.4 Calcul d'observables et estimateurs

Nous avons eu l'occasion d'entrevoir à la section 1.1.2 comment sont reconstruites les valeurs moyennes d'observables dans les formalismes QMC. Nous détaillons ici cette problématique essentiellement dans le cadre du schéma standard à champs auxiliaires (1.15) pour l'état fondamental du système.

La réinterprétation directe de la valeur moyenne d'une observable  $\hat{A}$  quelconque dans l'état  $|\Psi_G\rangle$  conduit à un rapport d'espérances mathématiques dans lesquelles interviennent deux populations indépendantes de marcheurs,  $\{|\Phi_\tau^{(a)}\rangle\}$  et  $\{|\Phi_\tau^{(b)}\rangle\}$ , représentant respectivement le bra  $\langle\Psi_G|$  et le ket  $|\Psi_G\rangle$  :

$$\langle\hat{A}\rangle_{\Psi_G} = \frac{\langle\Psi_G|\hat{A}|\Psi_G\rangle}{\langle\Psi_G|\Psi_G\rangle} \stackrel{\tau\rightarrow+\infty}{=} \frac{\mathbb{E}\left[\langle\Phi_\tau^{(b)}|\hat{A}|\Phi_\tau^{(a)}\rangle\right]}{\mathbb{E}\left[\langle\Phi_\tau^{(b)}|\Phi_\tau^{(a)}\rangle\right]} \stackrel{\tau\rightarrow+\infty}{=} \frac{\mathbb{E}\left[\text{Tr}\left(\hat{A}\hat{\sigma}_\tau\right)\right]}{\mathbb{E}\left[\text{Tr}\left(\hat{\sigma}_\tau\right)\right]}, \quad (1.46)$$

avec  $\hat{\sigma}_\tau = |\Phi_\tau^{(a)}\rangle\langle\Phi_\tau^{(b)}|$  la dyade stochastique associée à une réalisation au temps  $\tau$  de chaque population. La relation (1.46) est parfois appelée dans la littérature *estimateur vrai*, ou *estimateur brut*, d'une observable. Lorsque les recouvrements  $\langle\Phi_\tau^{(a)}|\Phi_\tau^{(b)}\rangle$  sont assurés d'être réels et positifs, aucun problème de phase ne contamine l'approche QMC comme nous l'avons montré à la section 1.3.1 (équation (1.36)). Il est alors aisé d'accéder à la valeur moyenne (1.46) en échantillonnant les dyades  $\hat{\sigma}_\tau$  selon leur trace  $\langle\Phi_\tau^{(b)}|\Phi_\tau^{(a)}\rangle$ . Dans le cas contraire, seul le module ou la valeur absolue de la partie réelle de  $\langle\Phi_\tau^{(b)}|\Phi_\tau^{(a)}\rangle$  peut être incorporé dans la distribution de probabilité des dyades. Limitons-nous, par souci de simplicité, à la situation où les déterminants sont constitués d'états individuels à composantes réelles. Ainsi :

$$\langle\hat{A}\rangle_{\Psi_G} \stackrel{\tau\rightarrow+\infty}{=} \frac{\mathbb{E}\left[\langle\Phi_\tau^{(b)}|\Phi_\tau^{(a)}\rangle\langle\hat{A}\rangle_{\Phi_\tau^{(b)},\Phi_\tau^{(a)}}\right]}{\mathbb{E}\left[\langle\Phi_\tau^{(b)}|\Phi_\tau^{(a)}\rangle\right]} \stackrel{\tau\rightarrow+\infty}{=} \frac{\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\mathcal{A}_\tau^{(ba)}\right]}{\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\right]},$$

où  $s_\tau^{(ba)}$  est le signe du produit scalaire  $\langle\Phi_\tau^{(b)}|\Phi_\tau^{(a)}\rangle$  entre deux réalisations,  $\mathcal{A}_\tau^{(ba)} = \langle\hat{A}\rangle_{\Phi_\tau^{(b)},\Phi_\tau^{(a)}}$  pour alléger l'écriture, et  $\mathbb{E}_\Pi[\cdot]$  la moyenne statistique sur des dyades générées selon leurs poids  $\Pi_\tau = |\langle\Phi_\tau^{(b)}|\Phi_\tau^{(a)}\rangle|$ . En introduisant

- la variance  $\sigma_{s\mathcal{A}}^2$  sur le produit  $s_\tau^{(ba)}\mathcal{A}_\tau^{(ba)}$  ;
- celle  $\sigma_s^2$  sur le signe  $s_\tau^{(ba)}$  ;
- la covariance  $\text{Cov}[s\mathcal{A}, s]$  entre ces deux quantités définie par

$$\text{Cov}[s\mathcal{A}, s] = \mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\mathcal{A}_\tau^{(ba)}s_\tau^{(ba)}\right] - \mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\mathcal{A}_\tau^{(ba)}\right]\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\right];$$

l'erreur statistique relative sur la moyenne (1.46) s'obtient immédiatement

$$\frac{\sigma_{s\mathcal{A}}}{\langle\hat{A}\rangle_{\Psi_G}} \stackrel{\tau\rightarrow+\infty}{=} \sqrt{\frac{\sigma_{s\mathcal{A}}^2}{\left(\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\mathcal{A}_\tau^{(ba)}\right]\right)^2} + \frac{\sigma_s^2}{\left(\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\right]\right)^2} - 2\frac{\text{Cov}[s\mathcal{A}, s]}{\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\mathcal{A}_\tau^{(ba)}\right]\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\right]}}.$$

Mais le carré du signe étant évidemment égal à un, on a aussi pour le rapport signal sur bruit ci-dessus

$$\frac{\sigma_{s\mathcal{A}}}{\langle\hat{A}\rangle_{\Psi_G}} \stackrel{\tau\rightarrow+\infty}{=} \sqrt{\frac{\mathbb{E}_\Pi\left[(\mathcal{A}_\tau^{(ba)})^2\right]}{\left(\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\mathcal{A}_\tau^{(ba)}\right]\right)^2} + \frac{1}{\left(\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\right]\right)^2} - 2\frac{\mathbb{E}_\Pi\left[\mathcal{A}_\tau^{(ba)}\right]}{\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\mathcal{A}_\tau^{(ba)}\right]\mathbb{E}_\Pi\left[s_\tau^{(ba)}\right]}}.$$

Dès lors que le signe moyen  $\mathbb{E}_\Pi[s_\tau^{(ba)}]$  tend vers zéro, l'erreur relative diverge<sup>8</sup>. Il s'agit de la manifestation habituelle du problème de signe. Elle est en réalité la conséquence des marcheurs

8. Notons que ce comportement sera observé même si l'échantillonnage de l'état à  $N$ -corps est de variance finie.

ayant traversé la surface nodale au cours de leur mouvement brownien. Si  $|\Phi_{\tau_G}\rangle$  désigne une réalisation orthogonale par définition à  $|\Psi_G\rangle$  au temps  $\tau_G$  :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_G | \Phi_{\tau_G} \rangle = 0 & \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \text{Tr} \left( \exp(-\tau \hat{H}) | \Phi_0^{(a)} \rangle \langle \Phi_0^{(b)} | \exp(-\tau \hat{H}) \right) \\ & \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \text{Tr} \left( \mathbb{E} \left[ | \Phi_\tau^{(a)} \rangle \langle \Phi_\tau^{(b)} | \right] \right) = \mathbb{E}_\Pi [s_\tau^{(ba)}] , \end{aligned}$$

avec  $|\Phi_0^{(b)}\rangle$  un déterminant non orthogonal à  $|\Psi_G\rangle$  et  $|\Phi_0^{(a)}\rangle = |\Phi_{\tau_G}\rangle$ . Toutes ces considérations s'étendent sans difficulté au problème de phase. Avec les schémas de contrôle présentés à la section précédente, l'évaluation directe de la valeur moyenne (1.46) s'avère très délicate dans la mesure où les réalisations  $|\Phi_\tau^{(a)}\rangle, |\Phi_\tau^{(b)}\rangle$  se verront échantillonnées indépendamment selon une distribution biaisée par un état d'essai  $|\Psi_T\rangle$ . Il en résulte de très importantes fluctuations sur les grandeurs locales  $\mathcal{A}_\tau^{(ba)}$  et les recouvrements  $\langle \Phi_\tau^{(b)} | \Phi_\tau^{(a)} \rangle$  qui compromettent la reconstruction de (1.46).

Traditionnellement, on se restreint alors à l'évaluation d'un estimateur approché, appelé *estimateur mixte* [27], reposant sur l'élément de matrice de l'observable entre l'état fondamental et l'état test

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T, \Psi_G}^{(\text{mix})} = \frac{\text{Re} \langle \Psi_T | \hat{A} | \Psi_G \rangle}{\text{Re} \langle \Psi_T | \Psi_G \rangle} \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\mathbb{E}[\text{Re} \langle \Psi_T | \hat{A} | \Phi_\tau \rangle]}{\mathbb{E}[\text{Re} \langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle]} . \quad (1.47)$$

De cette manière, l'échantillonnage préférentiel des déterminants de Slater, au cœur des approximations à chemins contraints, se trouve également adapté à la reconstruction des observables. Par exemple, avec le schéma à dynamique guidée et biaisée dans le cadre du contrôle du problème de phase :

$$|\tilde{\Psi}_G\rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\propto} \mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \frac{|\Phi_\tau\rangle}{\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle} \right] ,$$

et

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T, \tilde{\Psi}_G}^{(\text{mix})} \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \text{Re} \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} \right]}{\mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \right]} . \quad (1.48)$$

Pour les observables commutant avec le hamiltonien, et seulement pour elles, l'estimateur mixte (1.47) est identique à la « vraie » valeur moyenne :

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T, \Psi_G}^{(\text{mix})} & \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\text{Re} \langle \Psi_T | \hat{A} \exp(-\tau \hat{H}) | \Psi_T \rangle}{\text{Re} \langle \Psi_T | \exp(-\tau \hat{H}) | \Psi_T \rangle} \\ & \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\text{Re} \langle \Psi_T | \exp(-\tau \hat{H}/2) \hat{A} \exp(-\tau \hat{H}/2) | \Psi_T \rangle}{\text{Re} \langle \Psi_T | \exp(-\tau \hat{H}/2) \exp(-\tau \hat{H}/2) | \Psi_T \rangle} = \frac{\langle \Psi_G | \hat{A} | \Psi_G \rangle}{\langle \Psi_G | \Psi_G \rangle} , \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que l'état fondamental peut être obtenu à l'issue de la propagation de  $|\Psi_T\rangle$  en temps imaginaire dans la limite  $\tau \rightarrow +\infty$ . Pour les autres observables  $\hat{A}$ , l'intérêt de l'estimateur mixte réside dans la possibilité de le corriger pour se rapprocher de la « vraie » valeur moyenne (1.46) lorsque l'état d'essai  $|\Psi_T\rangle$  est une bonne approximation de  $|\Psi_G\rangle$ . En effet, en écrivant  $|\Psi_G\rangle = |\Psi_T\rangle + |\delta\Psi\rangle$ ,  $\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_G}$  est donné au premier ordre de l'écart  $|\delta\Psi\rangle$  par

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_G} & = \frac{\langle \Psi_T | \hat{A} | \Psi_T \rangle + \langle \Psi_T | \hat{A} | \delta\Psi \rangle + \langle \delta\Psi | \hat{A} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle + \langle \Psi_T | \delta\Psi \rangle + \langle \delta\Psi | \Psi_T \rangle} \\ & = \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T} - \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T} \frac{\langle \Psi_T | \delta\Psi \rangle + \langle \delta\Psi | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} + \frac{\langle \Psi_T | \hat{A} | \delta\Psi \rangle + \langle \delta\Psi | \hat{A} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} + \mathcal{O}(\delta\Psi^2) . \end{aligned}$$

D'autre part, en effectuant une manipulation identique à partir de la définition de l'estimateur mixte, il vient

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T, \Psi_G}^{(\text{mix})} &= \frac{\langle \Psi_T | \hat{A} | \Psi_G \rangle + \langle \Psi_G | \hat{A} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_G \rangle + \langle \Psi_G | \Psi_T \rangle} \\ &= \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T} - \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T} \frac{\langle \delta \Psi | \Psi_T \rangle + \langle \Psi_T | \delta \Psi \rangle}{2 \langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} + \frac{\langle \Psi_T | \hat{A} | \delta \Psi \rangle + \langle \delta \Psi | \hat{A} | \Psi_T \rangle}{2 \langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} + \mathcal{O}(\delta \Psi^2), \end{aligned}$$

Par conséquent :

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_G} \approx 2 \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T, \Psi_G}^{(\text{mix})} - \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_T}. \quad (1.49)$$

Cette expression est appelée *estimateur extrapolé* de la valeur moyenne [27], et nous la noterons  $\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_G}^{(\text{ext})}$  dans la suite.

Enfin, signalons qu'il est tout de même possible d'aller au delà de ces schémas approximatifs pour l'évaluation des observables en conservant un échantillonnage des marcheurs guidé et contraint par un état d'essai. Supposons qu'à un temps imaginaire  $\tau_f$  suffisamment grand nous disposions d'une population équivalente à l'état approché  $|\tilde{\Psi}_G\rangle$ . Le mouvement des marcheurs est alors poursuivi jusqu'à un temps  $\tau_f + \tau_{\text{BP}}$  afin de générer une représentation stochastique du propagateur  $\widetilde{e^{-\tau_{\text{BP}} \hat{H}}}$  pendant la durée  $\tau_{\text{BP}}$ . Son application sur l'état test  $|\Psi_T\rangle$  permet alors de reconstruire l'estimateur

$$\langle \hat{A} \rangle_{\tilde{\Psi}_G}^{\text{BP}} = \frac{\langle \Psi_T | \widetilde{e^{-\tau_{\text{BP}} \hat{H}}} \hat{A} \widetilde{e^{-\tau_f \hat{H}}} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \widetilde{e^{-(\tau_{\text{BP}} + \tau_f) \hat{H}}} | \Psi_T \rangle},$$

qui tend vers la valeur moyenne de  $\hat{A}$  dans l'état  $|\tilde{\Psi}_G\rangle$  pour  $\tau_f$  et  $\tau_{\text{BP}}$  tendant vers l'infini. Cette technique dite de « *retro-propagation* » a été proposée par S. Zhang [60, 62], et elle est couramment mise en œuvre dans les calculs QMC à chemins contraints.

---

---

# CHAPITRE 2

---

---

## Un état d'essai variationnel pour le modèle en couches nucléaire

DANS ce chapitre, nous initions la mise en place d'un schéma QMC à chemins contraints pour le modèle en couches nucléaire au travers du développement d'une approximation variationnelle pour initier, guider et contraindre le mouvement brownien des marcheurs. Son principe repose sur une extension de la méthode Hartree-Fock *via* l'introduction de corrélations par restauration des nombres quantiques caractérisant les états « yrast » du noyau. Cette approche de champ moyen « enchevêtré » par les symétries du hamiltonien (SEMF<sup>1</sup>) est présentée en détails puis testée dans les espaces de valence *sd*, *fp*, et *fp<sub>g</sub>*.

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Le modèle en couches nucléaire avec mélange de configurations . . . . .</b>	<b>32</b>
<b>2.2</b>	<b>La méthode de champ moyen « enchevêtré » par les symétries . . . . .</b>	<b>36</b>
2.2.1	Principe . . . . .	36
2.2.2	Le hamiltonien SEMF . . . . .	38
2.2.3	Mise en œuvre numérique . . . . .	41
<b>2.3</b>	<b>Aspects spécifiques au modèle en couches . . . . .</b>	<b>43</b>
<b>2.4</b>	<b>Résultats pour les couches <i>sd</i> et <i>fp</i> . . . . .</b>	<b>46</b>
<b>2.5</b>	<b>Une première application à des noyaux exotiques . . . . .</b>	<b>51</b>

---

1. Il s'agit de l'acronyme pour « *Symmetry Entangled Mean-Field approach* », qui a été récemment introduit en physique de la matière condensée [63].

## 2.1 Le modèle en couches nucléaire avec mélange de configurations

Historiquement, les modèles à particules indépendantes ont été proposés pour décrire les atomes et expliquer la classification périodique des éléments. Dans leur version la plus simple, ils supposent que les électrons d'un atome occupent les états individuels associés aux états propres d'un potentiel moyen créé par l'interaction coulombienne des électrons avec le noyau atomique et avec chacun d'entre eux. La genèse d'une approche similaire pour la structure des noyaux a essentiellement été encouragée par la mise en évidence expérimentale de noyaux magiques ayant une stabilité accrue à l'instar des gaz rares. Tandis que les premiers nombres magiques de neutrons et/ou de protons (jusqu'à 20) trouvent aisément leur interprétation en adoptant un potentiel moyen en forme d'oscillateur harmonique isotrope, la reproduction de leur séquence complète nécessite l'ajout d'un fort couplage spin-orbite (voir les articles originaux de M. Goepfert Mayer [64] et de O. Haxel *et al.* [65]). Ainsi, le hamiltonien nucléaire peut s'écrire en première approximation  $\sum_{n=1}^A \hat{h}_0(n)$  où

$$h_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m_N} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2 - V_{ll}\vec{l}^2 - V_{ls}(r)\vec{l}\cdot\vec{s}. \quad (2.1)$$

avec  $m_N$  la masse d'un nucléon<sup>2</sup>,  $\vec{p}$ ,  $\vec{r}$ ,  $\vec{l}$ ,  $\vec{s}$ , les observables associées respectivement à son impulsion, sa position, son moment cinétique orbital, et son spin. La fréquence de l'oscillateur  $\omega_0$  est alors habituellement choisie afin que le rayon carré moyen du noyau soit celui d'une sphère de rayon  $R$ , ce qui conduit à  $\hbar\omega_0 \approx 41 A^{-1/3}$  MeV. L'introduction du terme orbite-orbite  $V_{ll}$  apporte une correction de surface pour que le spectre du hamiltonien de champ moyen (2.1) se rapproche de celui obtenu pour un potentiel central plus réaliste de type Wood-Saxon. La dépendance radiale  $V_{ls}(r)$  du couplage spin-orbite peut par exemple être extraite d'un traitement Hartree-Fock relativiste du potentiel d'échange à un boson [66], le point important étant qu'il s'agit d'une fonction positive piquée à la surface du noyau.

Dans ce contexte, les états stationnaires du noyau sont simplement des déterminants de Slater dans lesquels chaque nucléon occupe un état propre<sup>3</sup>  $|nljm\rangle$  du hamiltonien à une particule (2.1).  $n = 0, 1, \dots$  est le nombre quantique radial,  $l = 0, 1, \dots$  celui de moment cinétique orbital,  $j = l \pm 1/2$  correspond au moment cinétique total et  $m$  à sa projection suivant un axe de quantification. La fonction d'onde associée, pour un état de spin  $m_s = \pm 1/2$  donné, s'obtient à partir des fonctions radiales  $R_{nl}(r)$  reliées aux polynômes de Laguerre, des harmoniques sphériques  $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$  où  $m_l$  représente la projection du moment orbital, et des coefficients de Clebsch-Gordan  $\langle l, m_l, s, m_s | j, m \rangle$  réalisant le couplage des moments cinétiques orbital et de spin :

$$\langle \vec{r} m_s | nljm \rangle = R_{nl}(r) \sum_{m_l} \langle l, m_l, s, m_s | j, m \rangle Y_{lm_l}(\theta, \varphi). \quad (2.2)$$

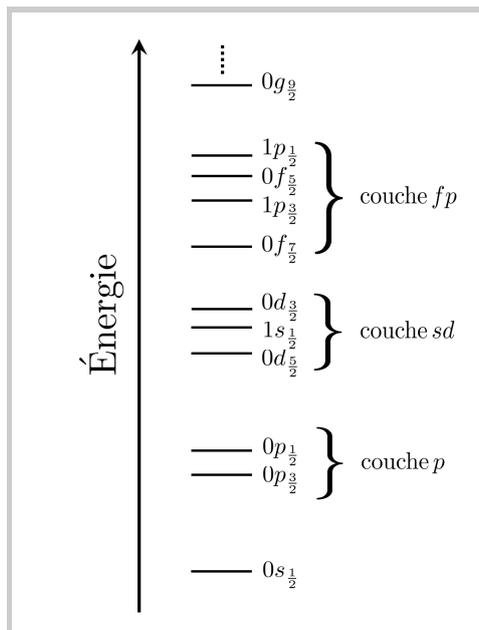
L'énergie du noyau est simplement la somme des énergies  $\varepsilon_{nlj}$  des états individuels occupés par les nucléons et données en fonction des différents nombres quantiques par

$$\varepsilon_{nlj} = \hbar\omega_0 \left( N_q + \frac{3}{2} \right) - V_{ll}\hbar^2 l(l+1) + \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2}(l+1)\langle V_{ls} \rangle_{nl} & \text{si } j = l - \frac{1}{2} \\ -\frac{\hbar^2}{2}l\langle V_{ls} \rangle_{nl} & \text{si } j = l + \frac{1}{2} \end{cases}, \quad (2.3)$$

avec  $N_q = 2(n-1) + l$  le nombre de quanta d'énergie  $\hbar\omega_0$ . Chacune de ses valeurs ( $N_q = 0, 1, \dots$ ) définit une *couche majeure* de l'oscillateur, les orbitales  $l$  qu'elle contient se déduisant de sa définition ( $N_q$  étant un entier positif ou nul,  $l = N_q, N_q - 2, \dots, 0$  ou 1). Le spectre à une

2. Supposée égale pour les neutrons et les protons.

3. Afin d'alléger au maximum les notations, nous omettons volontairement le nombre quantique de spin  $s$  qui vaut toujours 1/2.



**Figure 2.1** – Exemple de spectre des énergies  $\varepsilon_{nlj}$  pour un hamiltonien de champ moyen comprenant un potentiel harmonique et un couplage spin-orbite. Les niveaux sont labellés par les nombres quantiques  $n$ ,  $l$ , et  $j$ , soit en notation spectroscopique  $nl_j$  où  $s$ ,  $p$ ,  $d$ , etc. signifie  $l = 0, 1, 2$  et ainsi de suite. Les principales couches majeures qui seront considérées par la suite sont également indiquées.

particule correspondant est schématiquement représenté sur la figure 2.1 et permet d'associer chaque nombre magique (2, 8, 20, 28, etc.) à une fermeture de couche.

Outre l'explication de la magie de certains noyaux, ce modèle en couches à nucléons indépendants offre également la description d'autres propriétés. Il peut par exemple prédire les spins et parités de noyaux de  $A$  impairs proches des noyaux magiques. Néanmoins, l'obtention d'une spectroscopie nucléaire détaillée exige la prise en compte de corrélations au delà du champ moyen, ce qui peut être fait de deux manières. La première consiste à garder l'image de fermions indépendants mais en brisant des symétries. Dans le modèle de Nilsson par exemple [67], les effets de déformations de la surface du noyau sont décrits dans un tel cadre en considérant un potentiel harmonique anisotrope. De même, l'appariement est fréquemment pris en compte en adoptant une approche à quasi-particules indépendantes comme la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov. Alternativement, le modèle en couches dépasse la vision de champ moyen en superposant ses solutions par l'introduction d'une *interaction résiduelle* entre les nucléons, le hamiltonien nucléaire devenant donc

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^A \hat{h}_0(n) + \sum_{\substack{n=1 \\ p=n+1}}^A \hat{V}_{\text{res}}(n, p).$$

La force coulombienne à laquelle sont normalement soumis les protons est alors prise en compte de manière effective par le biais d'une formule empirique, dérivée de la formule de masse de Bethe-Weizsäcker, modifiant les niveaux d'énergie acquis par la résolution de l'équation de Schrödinger (voir par exemple [68–70]).

Le modèle en couches constitue ainsi la méthode de référence pour prendre en compte, au travers de l'interaction résiduelle, l'ensemble des corrélations au-delà du champ moyen. L'approche standard repose sur la diagonalisation la matrice hamiltonienne dans la base orthonor-

mée des déterminants de Slater à  $A$ -corps associés à l'ensemble des excitations particules-trous possibles (on parle de *mélange de configurations*). Schématiquement, chacun des états de base correspond à une façon différente de « ranger » les nucléons sur le spectre à une particule de la figure 2.1 en respectant le principe d'exclusion de Pauli. Les états de base à un corps (2.2) étant toutefois en nombre infini, une troncation des excitations particules-trous doit être imposée en limitant le nombre maximal  $N_{q,max}$  de quanta d'énergie, et il est ensuite nécessaire d'étudier la convergence des résultats avec  $N_{q,max}$ . En dépit de cette restriction, la dimension de la base à  $A$ -corps affiche tout de même une croissance exponentielle avec le nombre de particules. En effet, en la notant  $D$ , elle est donnée en fonction des nombres de neutrons  $N$ , de protons  $Z$  et de la dimension de l'espace à un corps  $d = \sum_j (2j + 1)$  par

$$D \sim \frac{d!}{N!(d-N)!} \frac{d!}{Z!(d-Z)!} .$$

Cette stratégie s'avère finalement seulement applicable aux noyaux légers, typiquement jusqu'à  $A \sim 13$ . Il s'agit de l'approche du *modèle en couches sans cœur*, dans laquelle les valeurs propres du hamiltonien à  $A$ -corps sont déterminées par diagonalisation à partir potentiels nucléon-nucléon « nus » à deux, et éventuellement trois corps [13–15].

En général, la stratégie suivie est de restreindre le nombre d'excitations particules-trous, et par suite la dimension de la matrice hamiltonienne, en limitant d'un côté le nombre de nucléons actifs, et de l'autre les états individuels qui leur sont accessibles (voir les ouvrages [17, 18], consacré au modèle en couches nucléaire standard). Pour cela, les nucléons formant un *cœur magique* sont tout d'abord supposés inertes. De plus, on considère que l'interaction résiduelle ne peut induire d'excitations des nucléons restants, appelés *nucléons de valence*, en dehors d'un ensemble défini de niveaux. En somme, seuls les déterminants de Slater issus des excitations particules-trous des nucléons de valence sur la couche active génèrent la base orthonormée dans laquelle l'équation de Schrödinger est résolue. Les résultats obtenus et leur capacité à reproduire les observations expérimentales dépendent alors évidemment de la troncation de l'espace des configurations, c'est-à-dire des nucléons de valence et de la couche active choisis. Il est toutefois habituellement admis que les déterminants construits à partir d'une unique couche majeure au dessus d'un cœur magique suffisent pour décrire convenablement l'essentiel des corrélations au delà du champs moyen des états de basse énergie d'un noyau donné.

Le fait d'isoler des nucléons de valence et de restreindre leurs excitations à l'intérieur d'une couche active entraîne qu'une redéfinition de l'interaction résiduelle est nécessaire. En effet, afin de limiter les conséquences de la troncation de l'espace des états à  $A$ -corps, une interaction *effective* tenant compte indirectement de la présence des nucléons inertes du cœur et des états négligés doit être construite. L'obtention de telles interactions est cependant rendue difficile par le fait qu'elles dépendent de la couche active et du nombre de nucléons de valences considérés. On distingue généralement deux catégories d'interactions effectives :

- les interactions effectives dites *schématiques* ou *phénoménologiques*. Elles possèdent une forme analytique simple comme l'interaction quadrupolaire et l'appariement. Elles dépendent généralement de seulement quelques paramètres ajustables aux données expérimentales.
- les interactions effectives dites *réalistes*. Deux types d'approches sont utilisées pour les déterminer. Certaines sont déduites d'une paramétrisation de l'interaction nucléon-nucléon « nue » par une renormalisation à l'espace de Hilbert tronqué *via* la méthode de la matrice  $G$ , originellement imaginée par K. A. Brueckner *et al.* [71], et développée plus avant par J. Goldstone [72]<sup>4</sup>. D'autres, les interactions effectives *empiriques*, sont

4. Le lecteur intéressé par le sujet des interactions effectives réalistes pour le modèle en couches trouvera en [73]

construites par ajustement à certaines données spectroscopiques d'une région donnée de la carte des noyaux. C'est de cette manière que fut dérivée l'interaction USD par B. H. Wildenthal [74], reconnue aujourd'hui comme celle de référence pour les noyaux de la couche *sd*. Plus récemment, M. Homma *et al.* ont proposé l'interaction réaliste GXPF1A pour les noyaux de la couche *fp* [75,76]. Un calcul microscopique faisant appel à la théorie de la matrice  $G$  a permis d'obtenir une première valeur des éléments à deux corps de l'interaction effective à partir de l'interaction « nue » Bonn-C [77]. Certaines combinaisons linéaires de ces éléments ont par la suite été affinées par un ajustement systématique à la spectroscopie des noyaux de la gamme de masses  $A = 47$  à  $A = 66$ . Les deux interactions effectives citées ici, USD et GXPF1A, sont celles qui seront principalement employées dans ce mémoire.

Plus généralement, pour toute interaction effective dérivée d'un potentiel nucléon – nucléon « nu », le hamiltonien du modèle en couche se décompose en une partie monopolaire  $\hat{H}_m$  et une partie multipolaire  $\hat{H}_M$ , soit  $\hat{H} = \hat{H}_m + \hat{H}_M$ . Il s'agit du théorème de séparation de M. Dufour et A. Zuker [78].  $\hat{H}_m$  contient tous les termes présents dans une description Hartree-Fock sphérique. Il dicte en particulier la position relative des niveaux d'énergie labélés par différentes valeurs du nombre quantique d'isospin au sein du spectre d'un noyau. Quelle que soit l'interaction nucléon–nucléon considérée, la partie monopolaire est en réalité incorrecte et doit être phénoménologiquement corrigée. Elle est habituellement ajustée à la spectroscopie des noyaux au voisinage immédiat d'une fermeture de couche. À l'opposé, la partie multipolaire est correcte, et même universelle [79], au sens où toutes les interactions conduisent aux mêmes éléments de matrice. Ses contributions principales sont les termes d'appariement isoscalaire et isovectoriel dans le canal de moment cinétique total nul, un terme quadrupolaire similaire à celui du modèle d'Elliott [1], un terme de type Gamow-Teller couplant les degrés de liberté de spin et d'isospin, et des termes octupolaire et hexadecapolaire.

Enfin, pour les mêmes raisons que l'interaction résiduelle, les opérateurs associés aux observables physiques doivent également être redéfinis. Par exemple, les neutrons de valence se voient ainsi attribuer une charge électrique effective liée à la polarisation du cœur et qui intervient dans les calculs de moments multipolaires électriques ou de probabilités de transitions électromagnétiques.

Une fois un espace modèle et une interaction effective choisis, le hamiltonien est finalement diagonalisé dans la base des déterminants de Slater correspondante. En pratique, les codes de modèle en couches avec mélange de configurations font pour cela appel à l'algorithme de Lanczos particulièrement performant pour les matrices de dimensions élevées. De plus, les invariances du hamiltonien à  $A$ -corps — par rotation, de charge, et par réflexion d'espace — font qu'il est possible de segmenter le problème en cherchant séparément les valeurs propres de chaque représentation irréductible du groupe de symétrie qui lui est associé, en d'autres termes les valeurs et vecteurs propres caractérisés par les mêmes nombres quantiques de moment cinétique ( $J, M$ ), d'isospin ( $T, M_T$ ), et de parité ( $\varpi$ ). Il existe par ailleurs différentes manières d'implémenter numériquement le modèle en couches avec mélange de configurations (voir [80]). Tous les résultats provenant de la diagonalisation de la matrice hamiltonienne de ce mémoire seront issus du code ANTOINE écrit par E. Caurier [80–82], dans lequel les déterminants de Slater sont tous caractérisés par une même valeurs propres de la projection du moment cinétique total. On parle alors de *schéma*  $M$ . Il fournit de fait toutes les solutions de l'équation de Schrödinger de spin  $J \geq |M|$ . Signalons que d'autres codes tel que NATHAN [83, 84], recourent, à l'inverse, à une base de vecteurs propres du carré du moment cinétique total (schéma  $J$ ). Cependant, même dans cette approche standard, l'applicabilité du modèle en couches reste

fortement limitée par la croissance exponentielle de la dimension de l'espace de Hilbert à  $A$ -corps avec le nombre de couches et avec le nombre de nucléons de valence. Actuellement les moyens numériques permettent de traiter des problèmes dont la dimension du hamiltonien est de l'ordre de quelques milliards (typiquement de  $10^{10}$ ), soit globalement des noyaux de masse  $A \sim 60$  sur la couche  $fp$ . Bien que des schémas de troncation supplémentaires puissent être mis en place, en forçant par exemple certains des nucléons de valence à occuper les états d'un niveau d'énergie donné de la couche active ou en restreignant leurs excitations particules-trous, ils offrent des résultats qui doivent être interprétés avec précaution. En définitive, étendre l'applicabilité du modèle en couches nécessite de trouver une alternative à la diagonalisation directe de la matrice hamiltonienne. Dans ce contexte, les méthodes QMC décrites au chapitre précédent semblent des candidates *a priori* attrayantes afin de disposer à terme d'une telle alternative.

## 2.2 La méthode de champ moyen « enchevêtré » par les symétries

### 2.2.1 Principe

Les approches variationnelles sont essentielles dans la description théorique des systèmes de fermions en interaction. Elles reposent sur l'équivalence entre l'équation de Schrödinger indépendante du temps et la stationnarité de l'énergie moyenne  $\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T} = \langle \Psi_T | \hat{H} | \Psi_T \rangle$  dans un état d'essai  $|\Psi_T\rangle$  normé de l'espace de Hilbert du système. Ainsi, la minimisation de  $\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T}$  sur cet espace conduit à l'état fondamental exact. Cependant, une telle procédure s'avère d'une complexité équivalente à la diagonalisation de la matrice hamiltonienne. Une approximation naturelle consiste alors à restreindre la minimisation à un sous-espace de vecteurs d'essai ayant tous une même forme simple fixée par des considérations physiques et dépendant seulement d'un nombre limité de paramètres.

L'archétype des approches variationnelles pour un système fermionique est la méthode Hartree-Fock dans laquelle l'état exact est approximé par un état à particules indépendantes  $|\Psi_T\rangle = |\Phi\rangle = \prod_{n=1}^N \hat{c}_{\phi_n}^\dagger |-\rangle$ . Les états individuels orthonormés  $\{|\phi_n\rangle\}$  qu'occupent les particules dans  $|\Phi\rangle$  sont alors optimisés afin de minimiser l'énergie moyenne. Celle-ci ne dépend, en conséquence du *théorème de Wick*, que de la *matrice densité à un corps*  $\rho$  définie par

$$\rho_{ij} = \langle \Phi | \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i | \Phi \rangle \quad \Leftrightarrow \quad \rho = \sum_{n=1}^N |\phi_n\rangle \langle \phi_n|. \quad (2.4)$$

Ainsi,  $\rho$  projette tout état à une particule sur la mer de Fermi du déterminant  $|\Phi\rangle$ . Il s'agit d'une matrice hermitique ( $\rho^\dagger = \rho$ ), idempotente ( $\rho^2 = \rho$ ), et dont la trace est égale au nombre de particules. En notant  $\mathcal{E}[\rho]$  la fonctionnelle de  $\rho$  qu'est l'énergie moyenne dans l'état  $|\Phi\rangle$ , la condition de stationnarité  $\delta \langle \hat{H} \rangle_\Phi = \delta \mathcal{E}[\rho] = 0$  entraîne immédiatement que les orbitales optimales sont solutions de [36]

$$\left[ h[\rho], \rho \right] = 0, \quad (2.5)$$

où  $h[\rho]$  est le *hamiltonien Hartree-Fock*, défini comme le gradient de l'énergie par rapport à la densité  $\rho$  :

$$h_{ij} = \frac{\partial \mathcal{E}[\rho]}{\partial \rho_{ji}}.$$

L'équation (2.5) est communément appelée *forme de Liouville des équations Hartree-Fock*. Elle met en évidence que la matrice densité et  $h$  partagent une base de vecteurs propres qui ne

sont autres que les orbitales de  $|\Phi\rangle$  minimisant l'énergie :

$$h[\rho]|\phi_n\rangle = e_n|\phi_n\rangle. \quad (2.6)$$

En physique nucléaire,  $h$  découle traditionnellement d'une paramétrisation de la fonctionnelle d'énergie faisant intervenir des interactions effectives phénoménologiques, telles les forces de Skyrme [85], dont les termes sont ajustés de manière à reproduire certaines données expérimentales comme la densité de saturation de la matière nucléaire ou les rayons de noyaux sphériques. Dans le cadre du modèle en couches,  $h$  est relié à la partie monopolaire du hamiltonien.

La solution Hartree-Fock peut *a priori* être utilisée pour déterminer une spectroscopie approchée par projection sur les nombres quantiques ( $J$ ,  $M$ , etc.) associés à chaque état stationnaire : on parle de *projection après variation*. Le risque encouru est toutefois que le déterminant Hartree-Fock possède un recouvrement quasiment nul avec certains sous-espaces irréductibles. De plus, même en dehors de ces cas pathologiques, la solution ainsi obtenue pour chaque sous-espace n'est aucunement optimale. Une stratégie alternative consiste alors à rendre minimale l'énergie moyenne directement dans un état dont les symétries ont été restaurées par projection : on parle dans ce cas de *variation après projection*. La restauration des symétries du hamiltonien est un thème relativement récurrent en physique nucléaire. La première application au modèle en couches nucléaire d'une telle approche a donné naissance à la méthode VAMPIR<sup>5</sup>, dans laquelle l'état de référence est un vide de quasi-particules Hartree-Fock-Bogoliubov [86–88]. Nous allons ici développer une méthode similaire en optimisant les orbitales d'un déterminant de Slater projeté sur les nombres quantiques qui caractérisent les états stationnaires.

D'après le théorème de Wigner, à toute opération de symétrie est associé en mécanique quantique un opérateur de transformation linéaire et unitaire<sup>6</sup>  $\hat{U}_g$  agissant dans l'espace des états et qui commute avec le hamiltonien du système. L'indice  $g$  désigne un paramètre, ou un ensemble de paramètres, caractérisant la transformation. La généralisation étant immédiate, nous nous limiterons dans ce qui suit au cas où  $g$  est un paramètre unique pour simplifier. La forme générique du projecteur sur une représentation irréductible labélée par  $\Gamma$  et de dimension  $d^\Gamma$  du groupe de symétrie  $\mathcal{G}$  correspondant est [89]

$$\hat{P}^\Gamma = \frac{d^\Gamma}{V_g} \sum_{g \in \mathcal{G}} (\chi_g^\Gamma)^* \hat{U}_g, \quad (2.7)$$

où  $\chi^\Gamma$  est le caractère de la représentation et  $V_g = \sum_{g \in \mathcal{G}} (1)$  l'ordre du groupe, c'est-à-dire le nombre d'éléments qu'il contient. Dans le cas d'une symétrie continue, la somme doit être remplacée par une intégration  $\int d\mu(g)$  sur le paramètre  $g$  avec la mesure invariante de Haar. En notant  $\hat{G}$  le générateur associé, les transformations de symétrie s'écrivent

$$\hat{U}_g = \exp(-ig\hat{G}). \quad (2.8)$$

Dans les cas considérés par la suite,  $\hat{G}$  est un opérateur à un corps : par exemple, pour la restauration de l'invariance par rotation,  $\hat{G}$  s'identifie à une composante du moment cinétique total. En conséquence,  $\hat{U}_g$  transforme tout déterminant de Slater  $|\Phi\rangle$  en un autre  $|\Phi_g\rangle$  dont les états individuels occupés  $\{|\phi_{n,g}\rangle\}$  s'obtiennent immédiatement par application de la matrice  $U_g = \exp(-igG)$  réalisant l'opération de symétrie dans l'espace à un corps, soit  $|\phi_{n,g}\rangle = U_g|\phi_n\rangle$ . L'état projeté  $\hat{P}^\Gamma|\Phi\rangle$  est donc une combinaison linéaire d'états factorisés : c'est en ce sens que l'on peut parler d'un enchevêtrement par les symétries du hamiltonien. Comme

5. Il s'agit de l'acronyme pour « *Variation After Mean field Projection In Realistic model space* ».

6. Ou antilinéaire et unitaire (antiunitaire), comme dans le cas de la symétrie de renversement du temps, mais nous nous intéresserons ici exclusivement aux transformations associées à un opérateur unitaire.

indiqué précédemment, notre objectif est de trouver le déterminant optimal pour la description des états stationnaires labellés par les nombres quantiques de la représentation  $\Gamma$ . Nous devons donc chercher  $|\Phi\rangle$  de façon à minimiser l'énergie moyenne  $E^\Gamma$  dans l'état projeté  $|\Psi_T\rangle \propto \hat{P}^\Gamma|\Phi\rangle$ ,

$$E^\Gamma = \frac{\langle \Phi | \hat{H} \hat{P}^\Gamma | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \hat{P}^\Gamma | \Phi \rangle} = \frac{\sum_{g \in \mathcal{G}} (\chi_g^\Gamma)^* \langle \Phi | \hat{H} \hat{U}_g | \Phi \rangle}{\sum_{g \in \mathcal{G}} (\chi_g^\Gamma)^* \langle \Phi | \hat{U}_g | \Phi \rangle} = \frac{\sum_{g \in \mathcal{G}} (\chi_g^\Gamma)^* \langle \Phi | \hat{H} | \Phi_g \rangle}{\sum_{g \in \mathcal{G}} (\chi_g^\Gamma)^* \langle \Phi | \Phi_g \rangle}, \quad (2.9)$$

puisque  $\hat{H}$  et  $\hat{P}^\Gamma$  commutent par construction. Notons que les propriétés  $(P^\Gamma)^\dagger = \hat{P}^\Gamma$  et  $(\hat{P}^\Gamma)^2 = \hat{P}^\Gamma$  du projecteur (2.7) ont également été utilisées pour aboutir à l'expression ci-dessus. En définitive,  $E^\Gamma$  est une fonctionnelle de la matrice densité à un corps correspondant à l'état de particules indépendantes  $|\Phi\rangle$  : le numérateur et le dénominateur dans (2.9) sont en effet les valeurs moyennes d'opérateurs à  $N$ -corps  $\hat{H}\hat{U}_g$  et  $\hat{U}_g$  dans un déterminant de Slater et elles s'expriment uniquement en fonction des éléments de matrice de  $\rho$  en vertu du théorème de Wick. Nous pouvons ainsi introduire le *hamiltonien de champ moyen intriqué par les symétries* défini par le gradient de l'énergie projetée (2.9) par rapport à la densité,

$$\left( h^\Gamma[\rho] \right)_{ij} = \frac{\partial E^\Gamma}{\partial \rho_{ji}}. \quad (2.10)$$

Dès lors, comme pour l'approximation Hartree-Fock usuelle, la stationnarité de l'énergie  $\delta E^\Gamma = 0$  sous la contrainte que les états individuels constituant le déterminant soient orthonormés conduit immédiatement à une relation analogue à (2.5) :

$$\left[ h^\Gamma[\rho], \rho \right] = 0. \quad (2.11)$$

Ce résultat a déjà été établi par le passé pour la restauration du nombre de particules d'un état de référence Hartree-Fock-Bogoliubov [90]. Il a également été exporté récemment en physique de la matière condensée [63], et en chimie quantique aussi bien pour un état de quasi-particules [91] que pour un déterminant de Slater [92].

### 2.2.2 Le hamiltonien SEMF

Le calcul du gradient (2.10) repose à nouveau sur le théorème de Wick, mais dans sa formulation étendue aux éléments de matrice d'observables entre deux déterminants de Slater [36]. Plus précisément, l'élément  $\langle \Phi | \hat{H} | \Phi_g \rangle / \langle \Phi | \Phi_g \rangle$  apparaissant dans l'énergie projetée (2.9) s'exprime à l'aide de la même fonctionnelle  $\mathcal{E}$  que pour les valeurs moyennes mais dans laquelle la densité  $\rho$  est remplacée par une *matrice densité de transition*  $\mathcal{R}_g$ , *non hermitique*, et définie de façon similaire à  $\rho$  (voir l'équation (2.4)) :

$$(\mathcal{R}_g)_{ij} = \frac{\langle \Phi | \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i | \Phi_g \rangle}{\langle \Phi | \Phi_g \rangle} \Leftrightarrow \mathcal{R}_g = \sum_{n,p=1}^N |\phi_{n,g}\rangle \left( f_g^{-1} \right)_{np} \langle \phi_p|. \quad (2.12)$$

$f_g$  est la matrice de recouvrement des orbitales respectives des deux déterminants,  $(f_g)_{np} = \langle \phi_n | \phi_{p,g} \rangle = \langle \phi_n | U_g | \phi_p \rangle$ . De plus, son déterminant correspond au produit scalaire  $\mathcal{N}_g$  entre le déterminant  $|\Phi\rangle$  et son transformé :

$$\mathcal{N}_g = \langle \Phi | \Phi_g \rangle = \langle \Phi | \hat{U}_g | \Phi \rangle = \det(f_g).$$

Grâce aux notations qui viennent d'être introduites et en posant

$$X_g^\Gamma = \frac{(\chi_g^\Gamma)^* \mathcal{N}_g}{\sum_{g \in \mathcal{G}} (\chi_g^\Gamma)^* \mathcal{N}_g}, \quad (2.13)$$

l'énergie dans l'état projeté revêt la forme plus compacte suivante :

$$E^\Gamma = \sum_{g \in \mathcal{G}} X_g^\Gamma \mathcal{E}[\mathcal{R}_g] . \quad (2.14)$$

Dans l'optique de spécifier l'expression du hamiltonien SEMF (2.10), nous sommes finalement amenés à devoir évaluer les dérivées des quantités  $\mathcal{E}[\mathcal{R}_g]$  et  $X_g^\Gamma$  par rapport aux éléments de la matrice densité  $\rho$ .

Concentrons nous tout d'abord sur le calcul du gradient de l'énergie locale entre le déterminant de référence et son image :

$$\frac{\partial \mathcal{E}[\mathcal{R}_g]}{\partial \rho_{ji}} = \sum_{k,l=1}^d \frac{\partial \mathcal{E}[\mathcal{R}_g]}{\partial (\mathcal{R}_g)_{lk}} \frac{\partial (\mathcal{R}_g)_{lk}}{\partial \rho_{ji}} = \sum_{k,l=1}^d \left( h[\mathcal{R}_g] \right)_{kl} \frac{\partial (\mathcal{R}_g)_{lk}}{\partial \rho_{ji}} ,$$

où l'on rappelle que  $d$  est la dimension de l'espace de Hilbert à un corps. Dans cette relation,  $h[\mathcal{R}_g]$  symbolise la fonctionnelle Hartree-Fock habituelle mais dans laquelle  $\mathcal{R}_g$  est substitué à  $\rho$ . Notons que contrairement à  $h[\rho]$ ,  $h[\mathcal{R}_g]$  n'est pas hermitique étant donné que  $\mathcal{R}_g$  ne l'est pas. Par ailleurs, il résulte immédiatement de l'expression (2.12) de la matrice densité de transition les relations

$$\mathcal{R}_g U_g \rho = \sum_{n,p,q} |\phi_{g,n}\rangle \left( f_g^{-1} \right)_{np} \langle \phi_p | U_g | \phi_q \rangle \langle \phi_q | = \sum_n |\phi_{g,n}\rangle \langle \phi_n | = U_g \rho , \quad (2.15a)$$

et

$$\mathcal{R}_g \rho = \mathcal{R}_g . \quad (2.15b)$$

Par conséquent  $U_g \rho = \mathcal{R}_g [U_g \rho - \rho + \mathbb{1}]$  et donc

$$\mathcal{R}_g = U_g \rho A_g^{-1} \quad \text{avec} \quad A_g = \mathbb{1} + (U_g - \mathbb{1}) \rho . \quad (2.16)$$

Ceci nous permet d'accéder sans difficulté à  $\partial (\mathcal{R}_g)_{lk} / \partial \rho_{ji}$ , mais également à la dérivée de  $X_g^\Gamma$ . Nous en déduisons en effet :

$$\frac{\partial (\mathcal{R}_g)_{lk}}{\partial \rho_{ji}} = (U_g)_{lj} (A_g^{-1})_{ik} + \sum_{p,q=1}^d \rho_{qp} \frac{\partial (A_g^{-1})_{pk}}{\partial \rho_{ji}} = \left[ U_g \left( \mathbb{1} - \rho A_g^{-1} (U_g - \mathbb{1}) \right) \right]_{lj} (A_g^{-1})_{ik} ,$$

où la seconde égalité provient de la dérivée de l'inverse d'une matrice,  $\partial A_g^{-1} / \partial \rho_{ji} = -A_g^{-1} (\partial A_g / \partial \rho_{ji}) A_g^{-1}$ , et de l'équation (2.16). Introduisons alors une matrice  $B_g$  dont l'inverse est défini par :

$$B_g^{-1} = \mathbb{1} - U_g^\dagger \mathcal{R}_g (U_g - \mathbb{1}) . \quad (2.17)$$

Ainsi, d'après (2.15),

$$B_g^{-1} \rho = \rho - U_g^\dagger \mathcal{R}_g U_g \rho + U_g^\dagger \mathcal{R}_g \rho = \rho - \rho + U_g^\dagger \mathcal{R}_g ,$$

d'où  $\rho = B_g U_g^\dagger \mathcal{R}_g$ . En d'autres termes, en extrayant le produit  $U_g^\dagger \mathcal{R}_g$  de (2.17),  $\rho = B_g [B_g^{-1} - \mathbb{1} + U_g^\dagger \mathcal{R}_g U_g] = \mathbb{1} - B_g + \rho U_g$ , soit  $B_g = \mathbb{1} + \rho (U_g - \mathbb{1})$ . Comme  $U_g^\dagger \mathcal{R}_g = \rho A_g^{-1}$  selon (2.16), et grâce à l'unitarité de  $U_g$ , nous arrivons en fin de compte à l'identité

$$\frac{\partial \mathcal{E}[\mathcal{R}_g]}{\partial \rho_{ji}} = \left[ A_g^{-1} h[\mathcal{R}_g] U_g B_g^{-1} \right]_{ij} , \quad (2.18)$$

pour la première quantité que nous cherchions.

La seconde dérivée nécessaire à l'élaboration de la forme du hamiltonien (2.10) est celle des facteurs  $X_g^\Gamma$ . Un calcul direct,

$$\frac{\partial X_g^\Gamma}{\partial \rho_{ji}} = \frac{X_g^\Gamma}{\mathcal{N}_g} \frac{\partial \mathcal{N}_g}{\partial \rho_{ji}} - X_g^\Gamma \sum_{g' \in \mathcal{G}} \frac{(\chi_g^\Gamma)^*}{\mathcal{N}_{g'}} \frac{\partial \mathcal{N}_{g'}}{\partial \rho_{ji}}, \quad (2.19)$$

révèle qu'il nous suffit de déterminer la dérivée du produit scalaire  $\mathcal{N}_g$  entre le déterminant  $|\Phi\rangle$  et son transformé  $|\Phi_g\rangle$  par l'opération de symétrie. Afin d'atteindre ce but, nous allons dans un premier temps montrer que  $\mathcal{N}_g$  peut s'écrire en fonction de la matrice  $A_g$  introduite à l'équation (2.16). Considérons la dérivée logarithmique de  $\mathcal{N}_g$  par rapport au paramètre  $g$  de la transformation

$$\frac{d}{dg} \ln(\mathcal{N}_g) = -i \frac{\langle \Phi | \hat{G} | \Phi_g \rangle}{\langle \Phi | \Phi_g \rangle} = -\text{tr}(iG\mathcal{R}_g) = \text{tr}\left(\frac{dU_g}{dg} \rho A_g^{-1}\right) = \text{tr}\left(\frac{dA_g}{dg} A_g^{-1}\right),$$

où nous avons utilisé la définition (2.12) de la matrice densité de transition ainsi que (2.16). Or,

$$\det(A_{g+dg}) = \det(A_g) \det\left(\mathbb{1} + dg \frac{dA_g}{dg} A_g^{-1}\right) = \det(A_g) \left[1 + dg \text{tr}\left(\frac{dA_g}{dg} A_g^{-1}\right)\right].$$

Compte tenu que par définition  $U_{g=0} = \mathbb{1}$ , l'intégration de l'équation différentielle obtenue de cette manière donne

$$\mathcal{N}_g = \det(A_g).$$

En définitive, cette relation rend aisée la détermination du gradient du recouvrement par rapport aux éléments la matrice densité :

$$\frac{\partial \mathcal{N}_g}{\partial \rho_{ji}} = \mathcal{N}_g \text{tr}\left(\frac{\partial A_g}{\partial \rho_{ji}} A_g^{-1}\right) = \mathcal{N}_g \left[A_g^{-1} (U_g - \mathbb{1})\right]_{ij},$$

d'où il vient

$$\frac{\partial X_g^\Gamma}{\partial \rho_{ji}} = X_g^\Gamma \left\{ \left[A_g^{-1} (U_g - \mathbb{1})\right]_{ij} - \sum_{g' \in \mathcal{G}} X_{g'}^\Gamma \left[A_{g'}^{-1} (U_{g'} - \mathbb{1})\right]_{ij} \right\}, \quad (2.20)$$

une fois insérée dans l'équation (2.19).

En conclusion, nous sommes en mesure en regroupant (2.18) et (2.20) d'établir la forme analytique du hamiltonien effectif à un corps régissant l'approche de champ moyen enchevêtré par les symétries

$$h^\Gamma[\rho] = \sum_{g \in \mathcal{G}} X_g^\Gamma A_g^{-1} \left[ (U_g - \mathbb{1}) (\mathcal{E}[\mathcal{R}_g] - E^\Gamma) + h[\mathcal{R}(g)] U_g B_g^{-1} \right], \quad (2.21)$$

dans laquelle les matrices  $A_g^{-1}$  et  $B_g^{-1}$  sont respectivement définies par (2.16) et (2.17). La dépendance fonctionnelle de  $h^\Gamma$  vis-à-vis de la densité à un corps ne figure dans cette définition que de manière implicite à travers la densité de transition  $\mathcal{R}_g$ , les matrices  $A_g^{-1}$ ,  $B_g^{-1}$ , et également l'énergie  $E^\Gamma$ . Notons que ce résultat se généralise sans difficulté à la situation où  $g$  représente un ensemble de paramètres, situation se produisant automatiquement lorsque plusieurs symétries sont restaurées.

### 2.2.3 Mise en œuvre numérique

La méthode SEMF peut être mise en œuvre suivant les algorithmes traditionnellement employés pour la méthode Hartree-Fock usuelle en raison de la similarité entre les équations (2.5) et (2.11) qui les caractérisent respectivement. Il suffit alors de simplement remplacer le calcul de l'énergie et du hamiltonien à une particule par leurs équivalents incluant la projection. On peut ainsi procéder par diagonalisation itérative, comme dans les références [91, 92], avec toutefois une complication liée au manque de signification physique des valeurs propres de  $h^\Gamma$ . En effet, en l'absence de restauration des symétries, ces valeurs sont simplement reliées à l'énergie variationnelle et on peut donc construire le déterminant de Slater à l'itération suivante en sélectionnant les vecteurs propres de  $h[\rho]$  associés aux énergie effectives individuelles  $e_n$  les plus faibles (voir l'équation (2.6)).

Alternativement, il est possible de minimiser directement l'énergie projetée (2.14) en paramétrisant le déterminant de Slater recherché à partir du *théorème de Thouless* [36]. Il s'agit d'ailleurs de la démarche adoptée dans les calculs VAMPIR avec un vide de quasi-particules Hartree-Fock-Bogoliubov [87]. Nous l'utiliserons également ici mais en y incorporant le hamiltonien (2.21) au cœur de la restauration des symétries avant variation dans l'approche de champ moyen Hartree-Fock. Le théorème de Thouless stipule que tout déterminant de Slater peut s'écrire comme l'exponentielle d'excitations 1 particule–1 trou de la mer de Fermi d'un déterminant fixé auquel il n'est pas orthogonal. Formellement, en dénotant ce déterminant  $|\bar{\Phi}\rangle$ , ses  $N$  orbitales orthonormées  $\{|\bar{\phi}_t\rangle\}$  (états « trous »), et ses  $d - N$  états « particules »  $\{|\bar{\phi}_p\rangle\}$ ,  $|\Phi\rangle$  est donné par

$$|\Phi\rangle = \mathcal{M} \exp(\hat{Z}) |\bar{\Phi}\rangle \quad \text{avec} \quad \hat{Z} = \sum_{p,t} Z_{pt} \hat{c}_{\bar{\phi}_p}^\dagger \hat{c}_{\bar{\phi}_t}. \quad (2.22)$$

Ici  $\hat{c}_{\bar{\phi}_p}^\dagger$  (resp.  $\hat{c}_{\bar{\phi}_t}$ ) est l'opérateur de création (resp. destruction) d'un fermion dans l'état « particule »  $|\bar{\phi}_p\rangle$  (resp. l'état « trou »  $|\bar{\phi}_t\rangle$ ), l'ensemble  $\{|\bar{\phi}_t\rangle; |\bar{\phi}_p\rangle\}$  formant une base orthonormée de l'espace de Hilbert à une particule. L'intérêt de paramétrer  $|\Phi\rangle$  suivant (2.22) réside dans le fait que l'énergie est ainsi une fonction à variables complexes ordinaires des amplitudes  $\{Z_{pt}\}$  des excitations particule-trou. Les orbitales du déterminant  $\exp(\hat{Z})|\bar{\Phi}\rangle$  sont données par  $\{|\bar{\phi}_t\rangle + \sum_{p=1}^{d-N} Z_{pt} |\bar{\phi}_p\rangle\}$ . Comme elles ne sont pas orthonormées, le facteur de normalisation  $\mathcal{M}$  dans (2.22) doit refléter un processus de ré-orthonormalisation afin que les définitions introduites jusqu'ici, et spécialement celle de la matrice densité à un corps associée à  $|\Phi\rangle$ , demeurent valables. Nous allons tout de suite préciser ce processus en considérant qu'il s'agit d'une transformation représentée par une matrice  $M$  de dimension  $N \times N$  mélangeant les états individuels occupés du déterminant  $\exp(\hat{Z})|\bar{\Phi}\rangle$  de sorte que

$$\langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle = \sum_{t,t'=1}^N M_{nt}^* M_{n't'} \left( \delta_{tt'} + \sum_{p=1}^{d-N} Z_{pt}^* Z_{pt'} \right) = \delta_{nn'},$$

ou bien, sous forme matricielle,  $M[\mathbb{1}_N + Z^T Z^*] M^\dagger = \mathbb{1}_N$ ,  $Z$  désignant la matrice  $(d - N) \times N$  d'éléments  $Z_{pt}$ .  $Z^T Z^*$  étant symétrique et définie positive,  $\mathbb{1}_N + Z^T Z^*$  admet une décomposition de Cholesky, c'est-à-dire qu'il existe une matrice triangulaire inférieure  $L$  telle que  $\mathbb{1}_N + Z^T Z^* = LL^\dagger$ . Un choix possible pour la transformation est ainsi  $M = L^{-1}$ . Finalement, les orbitales orthonormées du déterminant  $|\Phi\rangle$  sont déterminées à partir de celles de  $|\bar{\Phi}\rangle$  comme

$$|\phi_n\rangle = \sum_{t=1}^N (L^{-1})_{nt} \left[ |\bar{\phi}_t\rangle + \sum_{p=1}^{d-N} Z_{pt} |\bar{\phi}_p\rangle \right], \quad (2.23)$$

et le facteur de normalisation n'est autre que le déterminant de  $L^{-1}$ . Toutefois, ce facteur peut tout simplement être omis,  $|\Phi\rangle$  survenant toujours à la fois aux numérateurs et aux dénominateurs de quotients.

Par l'intermédiaire de la paramétrisation de Thouless l'énergie dans l'état projeté  $\hat{P}_\Gamma|\Phi\rangle$  devient une fonction des  $\{Z_{pt}\}$ . Sa minimisation se traduit donc par l'annulation de son gradient par rapport à leurs parties réelles et imaginaires :

$$\forall t, p \quad : \quad \left\{ \frac{\partial E^\Gamma}{\partial Z_{pt}^*} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial E^\Gamma}{\partial Z_{pt}} = 0 \right\} .$$

Cherchons dans un premier temps les composantes du gradient de l'énergie selon  $Z_{pt}^*$  :

$$\frac{\partial E^\Gamma}{\partial Z_{pt}^*} = \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial E^\Gamma}{\partial \rho_{ji}} \frac{\partial \rho_{ji}}{\partial Z_{pt}^*} = \sum_{i,j=1}^d \left( h^\Gamma[\rho] \right)_{ij} \frac{\partial \rho_{ji}}{\partial Z_{pt}^*} . \quad (2.24)$$

Afin d'évaluer la dérivée de la matrice densité à un corps associée au déterminant de référence, réécrivons sa définition (2.4) sous une forme laissant apparaître les variables  $Z_{pt}^*$ , soit

$$\rho_{ij} = \frac{\langle \Phi | \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \frac{\langle \bar{\Phi} | \exp(\hat{Z}^\dagger) \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i \exp(\hat{Z}) | \bar{\Phi} \rangle}{\langle \bar{\Phi} | \exp(\hat{Z}^\dagger) \exp(\hat{Z}) | \bar{\Phi} \rangle} .$$

Il en résulte directement que

$$\frac{\partial \rho_{ji}}{\partial Z_{pt}^*} = \langle \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_{\bar{p}} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle_\Phi - \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle_\Phi \langle \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_{\bar{p}} \rangle_\Phi .$$

Le théorème de Wick nous permet alors d'exprimer la quantité obtenue en termes des éléments de matrice de  $\rho$ . Finalement, la relation (2.24) devient simplement

$$\frac{\partial E^\Gamma}{\partial Z_{pt}^*} = \langle \bar{\phi}_p | (\mathbb{1} - \rho) h^\Gamma[\rho] \rho | \bar{\phi}_t \rangle . \quad (2.25)$$

D'autre part, le calcul des composantes du gradient par rapport aux  $Z_{pt}$  est tout-à-fait analogue et conduit évidemment à la relation complexe conjuguée de (2.25). En définitive, le déterminant de Slater optimal est celui construit selon (2.22) à partir des variables  $\{Z_{pt}\}$  satisfaisant le jeu fermé d'équations

$$\forall t, p \quad : \quad \begin{cases} \langle \bar{\phi}_p | (\mathbb{1} - \rho) h^\Gamma[\rho] \rho | \bar{\phi}_t \rangle = 0 \\ \langle \bar{\phi}_t | \rho h^\Gamma[\rho] (\mathbb{1} - \rho) | \bar{\phi}_p \rangle = 0 , \end{cases} \quad (2.26)$$

le hamiltonien SEMF à une particule étant donné par (2.21).

D'un point de vue programmation, le problème de la minimisation de l'énergie dans l'état projeté se ramène désormais à la résolution du système non linéaire (2.26) et peut donc être menée à bien *via* la méthode de Newton-Raphson. Cet algorithme permet la détermination de la solution recherchée par une approximation linéaire du gradient selon la formule itérative

$$\vec{Z}^{(i+1)} = \vec{Z}^{(i)} - \mathcal{H}^{-1}(\vec{Z}^{(i)}) \cdot \vec{\nabla}^{(i)} ,$$

dans laquelle  $\vec{Z}^{(i)}$  est un vecteur contenant de façon ordonnée les parties réelles et imaginaires des variables  $\{Z_{pt}\}$  à l'itération numéro  $i$ .  $\vec{\nabla}^{(i)}$  qualifie le gradient de l'énergie par rapport à ces dernières sachant que

$$\frac{\partial E^\Gamma(\vec{Z})}{\partial \text{Re} Z_{pt}} = 2\text{Re} \left( \frac{\partial E^\Gamma(\vec{Z})}{\partial Z_{pt}^*} \right) \quad ; \quad \frac{\partial E^\Gamma(\vec{Z})}{\partial \text{Im} Z_{pt}} = 2\text{Im} \left( \frac{\partial E^\Gamma(\vec{Z})}{\partial Z_{pt}^*} \right) ,$$

les dérivées par rapport à  $Z_{pt}^*$  correspondant aux membres de gauche de la première équation du système (2.26) à résoudre.  $\mathcal{H}$  est ici la matrice hessienne, d'éléments  $\partial^2 E^\Gamma / \partial Z_{pt} \partial Z_{p't'}$ , dont le calcul et l'inversion s'avèrent extrêmement coûteux numériquement. Cette difficulté est contournée en se tournant vers les algorithmes de *Quasi-Newton* [93] pour lesquels

$$\vec{Z}^{(i+1)} = \vec{Z}^{(i)} + \eta^{(i)} \vec{p}^{(i)} .$$

$\vec{p}^{(i)}$  désigne la *direction de descente* à l'itération  $i$ , c'est-à-dire la direction dans laquelle doit varier  $\vec{Z}^{(i)}$  pour que  $E^\Gamma(\vec{Z}^{(i+1)}) < E^\Gamma(\vec{Z}^{(i)})$ ;  $\eta^{(i)}$  est le pas de descente optimal déterminé par une recherche linéaire [93], en minimisant la fonction  $\tilde{E}^\Gamma(\eta) = E^\Gamma(\vec{Z} + \eta \vec{p})$ . Le vecteur  $\vec{p}^{(i)}$  est estimé grâce à une approximation  $\mathcal{B}^{(i)}$  de l'inverse de la Hessienne  $\mathcal{H}^{(i)}$  comme

$$\vec{p}^{(i)} = -\mathcal{B}^{(i)} \cdot \vec{\nabla}^{(i)} . \quad (2.27)$$

La matrice  $\mathcal{B}^{(i)}$  est mise à jour à chaque incrémentation par une formule de récurrence n'exigeant nulle autre quantité que celle déjà en mémoire, ni d'inversion de matrice. Il est de ce fait évident qu'une méthode de Quasi-Newton est plus avantageuse, vis-à-vis du temps de calcul, que la méthode de Newton-Raphson. Parmi plusieurs disponibles dans la littérature, nous avons opté pour la mise à jour du second ordre *BFGS*<sup>7</sup>, qui constitue un compromis acceptable entre temps de calcul, précision, et stabilité [93] :

$$\mathcal{B}^{(i+1)} = \left( \mathbb{1} - \frac{\Delta \vec{g}^{(i)} \otimes \Delta \vec{Z}^{(i)}}{\Delta \vec{g}^{(i)} \cdot \Delta \vec{Z}^{(i)}} \right)^T \mathcal{B}^{(i)} \left( \mathbb{1} - \frac{\Delta \vec{g}^{(i)} \otimes \Delta \vec{Z}^{(i)}}{\Delta \vec{g}^{(i)} \cdot \Delta \vec{Z}^{(i)}} \right) + \frac{\Delta \vec{Z}^{(i)} \otimes \Delta \vec{Z}^{(i)}}{\Delta \vec{g}^{(i)} \cdot \Delta \vec{Z}^{(i)}} , \quad (2.28)$$

avec  $\Delta \vec{Z}^{(i)} = \vec{Z}^{(i+1)} - \vec{Z}^{(i)} = \eta^{(i)} \vec{p}^{(i)}$  et  $\Delta \vec{g}^{(i)} = \vec{\nabla}^{(i+1)} - \vec{\nabla}^{(i)}$ .

## 2.3 Aspects spécifiques au modèle en couches

Les états stationnaires du noyau dans le cadre du modèle en couches sont labélés par les nombres quantiques de moment cinétique total ( $J$ ;  $M$ ), d'isospin total ( $T$ ;  $M_T$ ), et de parité  $\varpi$ . La méthode SEMF se doit donc en toute rigueur de restaurer les invariances correspondantes.

Toutefois, dans le cadre du modèle avec cœur, la couche active que les nucléons de valence sont astreints à occuper est généralement choisie comme une unique couche majeure de l'oscillateur harmonique, regroupant des orbites  $nlj$  de parités  $\varpi_l = (-1)^l$  identiques. Tout état à  $A$ -corps appartenant à l'espace de Hilbert correspondant possède alors une parité totale bien définie,  $\varpi = 1$  pour des orbites  $\varpi_l = 1$  et  $\varpi = (-1)^A$  si  $\varpi_l = -1$ . La projection sur la parité s'avère par conséquent superflue tant que de telles couches actives sont prises en compte. Dans le cas contraire, l'invariance par réflexion d'espace peut être restaurée par l'intermédiaire du projecteur

$$\hat{P}^\varpi = \frac{1}{2} \left( 1 + \varpi_A \hat{U} \right) , \quad (2.29)$$

l'opérateur parité  $\hat{U}$  exhibant bien la forme requise (2.8) d'une exponentielle d'opérateur à un corps puisqu'il s'écrit, dans le langage de la seconde quantification,

$$\hat{U} = \exp \left( i\pi \sum_{n,l,j,m,m_t} l \hat{c}_{nljmm_t}^\dagger \hat{c}_{nljmm_t} \right) . \quad (2.30)$$

7. Pour Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno.

On s'assure que  $\hat{U}$  caractérise bien l'opération de parité dans l'espace des états en effectuant un développement en série de (2.30),

$$\hat{U} = \prod_{\substack{n,l,j \\ m,m_t}} \left[ \hat{1} + (\varpi_l - 1) \hat{c}_{nljmm_t}^\dagger \hat{c}_{nljmm_t} \right]. \quad (2.31)$$

Cette expression montre effectivement que l'application de  $\hat{U}$  sur tout vecteur de la représentation nombre d'occupation revient à multiplier celui-ci par le produit des parités  $\varpi_l$  des états individuels  $|nljmm_t\rangle$  peuplés. L'action de  $\hat{U}$  sur un déterminant de Slater se traduit par ailleurs d'après (2.30) par la multiplication de chaque composante de ses orbitales par le facteur  $(-1)^l$  correspondant.

La restauration de l'invariance par rotation peut *a priori* être réalisée en appliquant un opérateur de projection  $\hat{P}_M^J$  sur les nombres quantiques de moment cinétique total  $(J; M)$ . Ce projecteur peut être obtenu à partir de l'expression générale (2.7) au travers d'une paramétrisation des rotations *via* les angles d'Euler  $\Omega \equiv (\alpha; \beta; \gamma)$  :

$$\hat{P}_M^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MM}^{J*}(\Omega) \hat{R}_\Omega, \quad (2.32)$$

où  $\hat{R}_\Omega = \exp(-i\frac{\alpha}{\hbar}\hat{J}_z) \exp(-i\frac{\beta}{\hbar}\hat{J}_y) \exp(-i\frac{\gamma}{\hbar}\hat{J}_z)$  désigne l'opérateur d'une rotation des angles  $\Omega$ . La fonction de Wigner  $D_{MK}^J(\Omega)$  est l'élément de matrice de  $\hat{R}_\Omega$  entre deux états  $|\mu JM\rangle$  et  $|\mu JK\rangle$  d'une base standard<sup>8</sup> et la mesure d'intégration<sup>9</sup> est donnée par  $d\Omega = d\alpha \sin(\beta) d\beta d\gamma$ . On vérifie aisément en utilisant les propriétés des fonctions  $D_{MK}^J$  que l'expression (2.32) se réduit à la forme attendue  $\hat{P}_M^J = \sum_\mu |\mu JM\rangle \langle \mu JM|$  du projecteur sur le sous-espace associé aux valeurs propres  $\hbar^2 J(J+1)$  et  $\hbar M$  du carré du moment cinétique  $\hat{J}^2$  et de sa projection  $\hat{J}_z$ . Pour un déterminant de Slater  $|\Phi\rangle$  donné, les vecteurs  $\{\hat{P}_M^J |\Phi\rangle; M = -J \rightarrow J\}$  ne se déduisent cependant pas les uns des autres par les relations habituelles en termes des opérateurs d'échelle  $\hat{J}_\pm$  :

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm \hat{P}_M^J |\Phi\rangle &= \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} \sum_\mu |\mu JM \pm 1\rangle \langle \mu JM | \Phi\rangle \\ &\neq \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} \hat{P}_{M \pm 1}^J |\Phi\rangle. \end{aligned}$$

Autrement dit, les déterminants de Slater projetés avec (2.32) ne constituent pas une représentation standard pour le moment cinétique. De fait, le théorème de Wigner-Eckart ne pourra pas être appliqué avec de tels vecteurs. Outre les complications que ce résultat entraîne pour l'estimation des observables physiques communément analysées dans les études spectroscopiques (moments quadripolaires, probabilités de transition, etc.), il n'est surtout plus possible de garantir l'indépendance des énergies variationnelles vis-à-vis du nombre quantique  $M$  :  $\hat{P}_M^J |\Phi\rangle$  ne peut donc en aucun cas être considéré comme un *ansatz* satisfaisant pour le modèle en couches.

Il est néanmoins possible de remédier à cette difficulté en faisant appel aux opérateurs  $\hat{P}_{MK}^J = \sum_\mu |\mu JM\rangle \langle \mu JK|$  connectant des sous-espace propres de  $\hat{J}_z$  correspondant à des

8.  $\mu$  rassemble tous les nombres quantiques associés aux opérateurs qui avec  $\hat{J}^2$  et  $\hat{J}_z$  forment un ensemble complet d'observables compatibles.

9.  $\alpha$  et  $\beta$  appartiennent respectivement aux intervalles  $[0; 2\pi]$  et  $[0; \pi]$ . Le choix de la borne d'intégration supérieure sur l'angle  $\gamma$  dépend quant à elle du caractère entier ou demi-entier des nombres quantiques de moment cinétique. Pour  $J$  entier elle est égale à  $2\pi$ , tandis que pour  $J$  demi-entier elle vaut  $4\pi$  et le facteur  $8\pi^2$  est remplacé par  $16\pi^2$  dans (2.32).

valeurs propres  $M$  et  $K$  distinctes pour un moment cinétique total  $J$  donné. En effet, quelles que soient les amplitudes  $\{C_K^J\}$ , les combinaisons linéaires

$$|\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}\rangle = \sum_{K=-J}^J C_K^J \hat{P}_{MK}^J |\Phi\rangle = \sum_{\mu, K} C_K^J |\mu JM\rangle \langle \mu JK | \Phi \rangle, \quad (2.33)$$

forment une base standard :  $\hat{J}_{\pm} |\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}\rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} |\Psi_{\text{SEMF}}^{JM \pm 1}\rangle$ . D'ailleurs, on se convainc immédiatement que l'énergie moyenne est bien maintenant indépendante de  $M$  et elle sera logiquement notée  $E^J$ ,

$$E^J = \frac{\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} | \hat{H} | \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} \rangle}{\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} | \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} \rangle} = \frac{\sum_{K, K'} C_K^{J*} C_{K'}^J \langle \Phi | \hat{H} \hat{P}_{KK'}^J | \Phi \rangle}{\sum_{K, K'} C_K^{J*} C_{K'}^J \langle \Phi | \hat{P}_{KK'}^J | \Phi \rangle}, \quad (2.34)$$

où nous avons utilisé les propriétés triviales suivantes des opérateurs de « passage »  $\hat{P}_{MK}^J$ ,

$$(\hat{P}_{MK}^J)^\dagger = \hat{P}_{KM}^J \quad ; \quad P_{MK}^J \hat{P}_{K'M'}^J = \delta_{JJ'} \delta_{KK'} \hat{P}_{MM'}^J. \quad (2.35)$$

Dans le cadre du modèle en couches, la méthode de champ moyen intriqué par les symétries doit donc être adaptée pour approximer les états stationnaires par les superpositions  $|\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}\rangle$  définies par (2.33). Naturellement, les amplitudes  $\{C_K^J\}$  seront considérées comme de nouveaux paramètres variationnels. En conséquence, elles apparaissent comme les solutions de l'équation aux valeurs propres généralisée

$$\forall K \quad : \quad \sum_{K'=-J}^J C_{K'}^J \langle \Phi | \hat{H} \hat{P}_{KK'}^J | \Phi \rangle = E^J \sum_{K'=-J}^J C_{K'}^J \langle \Phi | \hat{P}_{KK'}^J | \Phi \rangle, \quad (2.36)$$

qui découlent directement de l'annulation du gradient de l'énergie moyenne (2.34) par rapport à  $C_K^{J*}$ . Enfin, l'optimisation du déterminant peut être menée par une démarche similaire à celle initialement développée à la section 2.2 dans la mesure où les opérateurs  $\hat{P}_{MK}^J$  s'écrivent en fonction des rotations  $\hat{R}_\Omega$  sous une forme analogue à (2.8) connue sous le nom de *représentation de Villars* [?]:

$$\hat{P}_{MK}^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MK}^{J*}(\Omega) \hat{R}_\Omega. \quad (2.37)$$

Il en résulte ainsi que la matrice densité  $\rho$  du déterminant  $|\Phi\rangle$  doit vérifier une équation de type Hartree-Fock (2.11) avec un hamiltonien effectif SEMF (2.21) dans lequel :

- les transformations de symétrie  $\hat{U}_g$  sont les rotations  $\hat{R}_\Omega$  ;
- l'énergie variationnelle  $E^\Gamma$  est ici la valeur propre  $E^J$  la plus basse obtenue en résolvant (2.36) ;
- les coefficients  $X_g^\Gamma \equiv X_\Omega^J$  sont donnés par

$$X_\Omega^J = \frac{\sum_{KK'} C_K^{J*} C_{K'}^J D_{KK'}^{J*}(\Omega) \langle \Phi | \Phi_\Omega \rangle}{\int d\Omega \sum_{KK'} C_K^{J*} C_{K'}^J D_{KK'}^{J*}(\Omega) \langle \Phi | \Phi_\Omega \rangle},$$

où  $|\Phi_\Omega\rangle = \hat{R}_\Omega |\Phi\rangle$ .

En pratique, les intégrales portant sur les angles d'Euler  $\alpha$  et  $\gamma$  sont simplement discrétisées en  $n_\alpha$  et  $n_\gamma$  points équidistants et celle sur  $\beta$  est évaluée par la méthode Gauss-Legendre après le changement de variable  $x = \cos(\beta)$ . Cette dernière est ainsi approximée par une somme des valeurs de la fonction à intégrer aux  $n_\beta$  points  $\beta_i = \arccos(x_i)$  où les  $x_i$  sont les zéros du polynôme de Legendre  $L_{n_\beta}(\beta)$  de degrés  $n_\beta$  et avec des poids  $p_{\beta_i}$  donnés par

$$p_{\beta_i} = \frac{-2}{(n_\beta + 1) L'_{n_\beta}(x_i) L_{n_\beta+1}(x_i)}.$$

De cette manière

$$\hat{F}_{MK}^J \approx \frac{1}{n_\alpha n_\gamma} \sum_{\alpha_i, \beta_i, \gamma_i=1}^{n_\alpha, n_\beta, n_\gamma} p_{\beta_i} D_{MK}^J(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i) \hat{R}(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i), \quad (2.38)$$

avec, pour  $i = 1 \rightarrow n_\alpha$  entier,  $\alpha_i = 2\pi(i-1)/n_\alpha$  et de même pour l'angle  $\gamma$ . Les nombres de points sont choisis afin que le moment cinétique total ait la valeur moyenne souhaitée à une erreur relative près d'environ  $10^{-4}$ . ils dépendent du nombre de particules et de la dimension de l'espace à un corps, et nous avons trouvé qu'entre 15 et 35 points par angle suffisent.

Précisons enfin que tous ces développements sont également valables pour la restauration des nombres quantiques d'isospin ( $T; M_T$ ) reflétant l'invariance de charge du hamiltonien nucléaire. Dans ce travail, nous nous sommes limités à la prise en compte avant variation de l'invariance par rotation et de la parité lorsque plusieurs couches majeures interviennent dans l'espace de valence. De plus, la projection  $M_T = (N - Z)/2$  de l'isospin est également *strictement respectée* en contraignant le déterminant de référence à ne pas mélanger neutrons et protons. En termes formels,  $|\Phi\rangle$  est supposé factorisé en un produit de deux déterminants de Slater,

$$|\Phi\rangle = |\Phi^n\rangle |\Phi^p\rangle,$$

décrivant chacun une espèce de nucléon. Les noyaux  $N = Z$  impair-impair réclament toutefois une attention particulière car leur spectre contient à basse énergie à la fois des états  $T = 0$  et  $T = 1$ . Leur compétition fait d'ailleurs toujours l'objet de nombreux travaux tant expérimentaux [94] que théoriques [95, 96] dans l'optique d'étudier le rôle de l'appariement proton-neutron dans le canal isoscalaire, c'est-à-dire à spins parallèles. Dans le cadre de nos calculs variationnels pour de tels noyaux, deux cas peuvent se présenter :

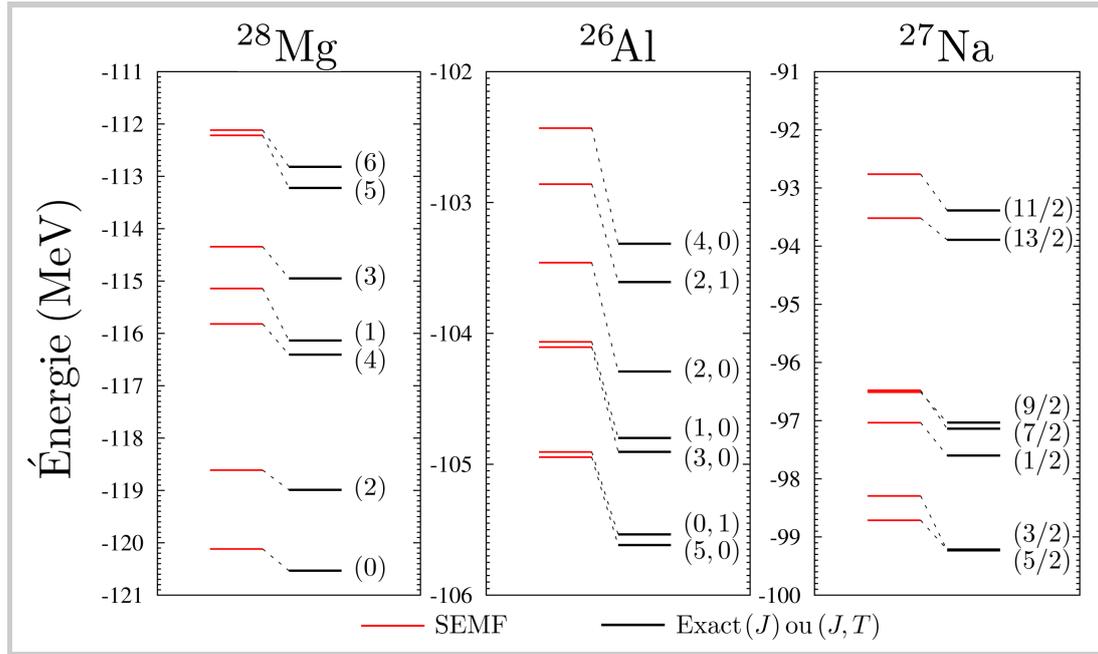
- si pour un moment cinétique  $J$  donné l'état de plus basse énergie est isoscalaire, l'approche SEMF avec seulement la restauration de l'invariance par rotation devrait conduire à un vecteur ayant un fort recouvrement avec cet état. Son partenaire isosvectoriel pour la même valeur de  $J$  pourra alors être obtenue au travers du noyau isobarique analogue ;
- en revanche, si l'état de plus basse énergie dans le canal  $J$  est associé à  $T = 1$ , la solution SEMF tendra naturellement vers celui-ci et l'état  $T = 0$  de même  $J$  ne pourra être déterminé par le biais du schéma actuellement mis en place ;

Il apparaît ainsi clairement qu'une extension du travail présenté est nécessaire pour les noyaux  $N = Z$  impair-impair afin de restaurer simultanément l'invariance par rotation et l'invariance de charge avant variation.

## 2.4 Résultats pour les couches *sd* et *fp*

Afin d'éprouver la méthode de champ moyen Hartree-Fock enchevêtré par les symétries, nous allons dans cette section confronter les résultats qu'elle fournit aux résultats exacts issus de la diagonalisation de la matrice hamiltonienne par le code de modèle en couches ANTOINE [80–82], pour différents types de noyaux, pour différentes couches actives, et pour différentes observables.

Examinons dans un premier temps la précision avec laquelle l'approche SEMF reproduit le spectre « yrast » de basse énergie de trois types de noyaux de la couche *sd*, à savoir le noyau pair-pair  $^{28}\text{Mg}$ , le noyau  $N = Z$  impair-impair  $^{26}\text{Al}$ , et le noyau impair  $^{27}\text{Na}$ , avec pour interaction résiduelle l'interaction empirique USD [74]. Pour les états  $T = 1$  du  $^{26}\text{Al}$ ,



**Figure 2.2** – Spectres « yrast » de basse énergie des noyaux  $^{28}\text{Mg}$ ,  $^{26}\text{Al}$ , et  $^{27}\text{Na}$  de la couche  $sd$  avec l'interaction USD. En rouge à gauche les énergies SEMF et en noir à droite les énergies exactes.

la méthode est appliquée au noyau isobarique analogue  $^{26}\text{Mg}$ . Les résultats sont présentés sur la figure 2.2 sur laquelle on observe que l'écart entre les énergies de liaison exactes et SEMF varie entre 0.4 MeV et 1 MeV pour l'ensemble des niveaux de ces trois noyaux, soit un écart relatif maximum en dessous du pour-cent quel que soit le moment cinétique sur lequel l'état variationnel est projeté, et même pour le noyau  $N = Z$ . De plus, la séquence de niveau obtenue étant identique à la séquence exacte, les énergies d'excitation se trouvent particulièrement bien reproduites.

La valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{T}^2$  apporte une indication sur la pureté en isospin de la solution SEMF, et permet de vérifier si le fait de ne pas avoir restaurer la symétrie associée est pertinent. Son calcul est similaire à celui de l'énergie par la relation (2.34) dans la mesure où  $\hat{T}^2$  est scalaire. Le tableau 2.1 nous montre alors que la déviation par rapport à la valeur exacte est faible, et ce même pour l'état  $J = 2$  et  $T = 0$  du  $^{26}\text{Al}$  pour lequel nous aurions pu nous attendre à une contamination par l'état  $T = 1$  qui est immédiatement supérieur en énergie.

La stratégie consistant à prendre, pour un état  $T = 1$  d'un noyau  $N = Z$ , le résultat de la méthode SEMF appliquée à son isobarique analogue  $M_T = 1$  complique toutefois l'estimation d'une observable non scalaire en isospin. Elle demeure néanmoins accessible à partir de la solution  $M_T = 1$  dès lors que l'observable  $\hat{A}$  en question peut se décomposer en la somme d'un opérateur isoscalaire  $\hat{S}_{00}$  et de la composante sphérique  $\hat{V}_{10}$  d'un opérateur isovectoriel. Notons  $\{|\sigma T M_T\rangle\}$  la base standard des vecteurs propres du hamiltonien du modèle en couches écrits de manière à ne laisser apparaître que les nombres quantiques qui vont jouer un rôle dans le raisonnement qui suit,  $\sigma$  se référant ainsi à l'ensemble des nombres quantiques restant ( $J$ ,  $M$ , etc.). Par l'intermédiaire du théorème de Wigner-Eckart, la valeur moyenne de  $\hat{A}$  dans l'un de ces états s'exprime comme

$$\langle \sigma T M_T | \hat{A} | \sigma T M_T \rangle = \langle \sigma T M_T | \hat{S}_{00} | \sigma T M_T \rangle + \frac{M_T}{\sqrt{T(T+1)(2T+1)}} \langle \sigma T | \hat{V}_1 | \sigma T \rangle ,$$

$^{28}\text{Mg}$	$T = 2 ; M_T = 2$						
	$J = 0$	$J = 2$	$J = 4$	$J = 1$	$J = 3$	$J = 5$	$J = 6$
$\langle \hat{T}^2 \rangle - T(T+1)$	0.0020	0.0027	0.0025	0.0041	0.0014	0.0045	0.0021
$^{26}\text{Al}$	$T = 0 ; M_T = 0$					$T = 1 ; M_T = 0$	
	$J = 5$	$J = 3$	$J = 1$	$J = 2$	$J = 4$	$J = 0$	$J = 2$
$\langle \hat{T}^2 \rangle - T(T+1)$	$3.10^{-7}$	$4.10^{-6}$	$2.10^{-7}$	$5.10^{-8}$	$3.10^{-7}$	0.0033	0.0035
$^{27}\text{Na}$	$T = 5/2 ; M_T = 5/2$						
	$2J=5$	$2J=3$	$2J=1$	$2J=7$	$2J=9$	$2J=13$	$2J=11$
$\langle \hat{T}^2 \rangle - T(T+1)$	0.0075	0.0034	0.0045	0.0028	0.0015	0.0031	0.0040

**Tableau 2.1** – Compilation des déviations des isospins carrés moyens  $\langle \hat{T}^2 \rangle$  des états SEMF par rapport aux valeurs exactes  $T(T+1)$  caractérisant les états de basses énergies des noyaux  $^{28}\text{Mg}$ ,  $^{26}\text{Al}$ , et  $^{27}\text{Na}$ .

le facteur devant l'élément réduit du terme vectoriel provenant du coefficient de Clebsch-Gordan  $\langle T, M_T, 1, 0 | T, M_T \rangle$ . Pour les états qui nous intéressent, à savoir  $T = 1$  et  $M_T = 0, 1$ , il en résulte que

$$\langle \sigma, T=1, M_T=0 | \hat{A} | \sigma, T=1, M_T=0 \rangle = \langle \sigma, T=1, M_T=1 | \hat{S}_{00} | \sigma, T=1, M_T=1 \rangle, \quad (2.39)$$

puisque la valeur moyenne de la contribution scalaire est indépendante de  $M_T$ . À condition que la pureté en isospin de la solution SEMF de l'isobarique analogue soit satisfaisante, il est alors raisonnable de la considérer comme un état  $|\sigma, T=1, M_T=1\rangle$ , et ainsi d'en extraire les valeurs moyennes d'observables pour l'état isovectoriel du noyau  $N = Z$  en recourant à la relation (2.39). Au regard des résultats du tableau 2.1, cette technique semble pertinente pour le noyau  $^{26}\text{Al}$ .

Pour chacun des noyaux étudiés, nous avons tout d'abord évalué les nombres d'occupation en neutrons et protons de chaque orbite  $\Gamma \equiv (n; l; j)$  par la moyenne

$$N_{\Gamma m_t} = \sum_{m=-j}^j \langle \hat{c}_{\Gamma m m_t}^\dagger \hat{c}_{\Gamma m m_t} \rangle,$$

où, pour  $m_t = 1/2$  (resp.  $-1/2$ ), les opérateurs fermioniques sont ceux associés aux neutrons (resp. protons). D'autre part, afin de tester plus en détails la structure de la fonction d'onde Hartree-Fock projeté nous avons également effectué le calcul des moments électrique quadrupolaire  $Q_2(J)$ ,

$$Q_2(J) = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \langle \Psi_{\text{SEMF}}^{JJ} | \hat{A}_{20} | \Psi_{\text{SEMF}}^{JJ} \rangle = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \frac{\langle J, J, 2, 0 | J, J \rangle}{\sqrt{2J+1}} \langle \Psi_{\text{SEMF}}^J | \hat{A}_2 | \Psi_{\text{SEMF}}^J \rangle, \quad (2.40)$$

et magnétique dipolaire  $\mu_1(J)$ ,

$$\mu_1(J) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle \Psi_{\text{SEMF}}^{JJ} | \hat{A}_{10} | \Psi_{\text{SEMF}}^{JJ} \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{\langle J, J, 1, 0 | J, J \rangle}{\sqrt{2J+1}} \langle \Psi_{\text{SEMF}}^J | \hat{A}_1 | \Psi_{\text{SEMF}}^J \rangle; \quad (2.41)$$

ainsi que des probabilités réduites de transition électromagnétiques du même ordre  $B_{E2}(J_i \rightarrow J_f)$  et  $B_{M1}(J_i \rightarrow J_f)$ ,

$$B_{E2}(J_i \rightarrow J_f) = \frac{|\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{J_f} | \hat{A}_2 | \Psi_{\text{SEMF}}^{J_i} \rangle|^2}{\sqrt{2J_i+1}}; \quad B_{M1}(J_i \rightarrow J_f) = \frac{|\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{J_f} | \hat{A}_1 | \Psi_{\text{SEMF}}^{J_i} \rangle|^2}{\sqrt{2J_i+1}}.$$

Les composantes des opérateurs quadrupolaire  $\hat{A}_{2q}$  et dipolaire  $\hat{A}_{1q}$  sont respectivement définies comme

$$\hat{A}_{2q} = \sum_{n=1}^{A_v} e_n^{\text{eff}} \hat{r}_n^2 Y_{2q}(\hat{r}_n) \quad ; \quad \hat{A}_{1q} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum_{n=1}^{A_v} (g_n^l \hat{l}_q + g_n^s \hat{s}_q) \mu_N ,$$

où  $e_n^{\text{eff}}$ ,  $\hat{r}_n$ ,  $g_n^l$ ,  $g_n^s$ ,  $\hat{l}_q$ ,  $\hat{s}_q$  sont la charge effective, l'opérateur position, les facteurs- $g$  effectifs orbital et de spin, et les opérateurs de moment cinétique orbital et de spin du nucléon  $n$ , tandis que  $Y_{2q}$  est la composante  $q$  de l'harmonique sphérique d'ordre 2 et  $\mu_N$  le magnéton nucléaire. En tant que composantes d'opérateurs tensoriels de rang 2 et 1,  $\hat{A}_{2q}$  et  $\hat{A}_{1q}$  ne commutent pas avec les opérateurs de rotation. L'estimation de ces observables nécessiterait par conséquent une double intégration sur les angles d'Euler, afin de faire figurer les états SEMF en bra et en ket. Il est néanmoins possible de se ramener à une seule intégration, nettement plus accessible numériquement. D'après le théorème de Wigner-Eckart, l'élément réduit  $\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{J_1} \| \hat{A}_k \| \Psi_{\text{SEMF}}^{J_2} \rangle$  d'un opérateur tensoriel quelconque  $\hat{A}_k$  de rang  $k$  entre deux vecteurs d'une base standard peut s'écrire

$$\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{J_1} \| \hat{A}_k \| \Psi_{\text{SEMF}}^{J_2} \rangle = \sum_{M_1, M_2, q} \frac{\langle J_2, M_2, k, q | J_1, M_1 \rangle}{\sqrt{2J_1 + 1}} \langle \Psi_{J_1 M_1} | \hat{A}_{kq} | \Psi_{J_2 M_2} \rangle .$$

Commençons par insérer la définition (2.33) des états SEMF dans l'équation ci-dessus,

$$\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{J_1} \| \hat{A}_k \| \Psi_{\text{SEMF}}^{J_2} \rangle = \sum_{K_1, K_2} C_{K_1}^{J_1*} C_{K_2}^{J_2} \sum_{M_1, M_2, q} \frac{\langle J_2, M_2, k, q | J_1, M_1 \rangle}{\sqrt{2J_1 + 1}} \times \langle \Phi_1 | \hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{A}_{kq} \hat{P}_{M_2 K_2}^{J_2} | \Phi_2 \rangle , \quad (2.42)$$

où nous avons utilisé (2.35) et avec  $|\Phi_1\rangle$  (resp.  $|\Phi_2\rangle$ ) le déterminant de Slater associé à  $|\Psi_{\text{SEMF}}^{J_1}\rangle$  (resp.  $|\Psi_{\text{SEMF}}^{J_2}\rangle$ ). En faisant maintenant appel au comportement des opérateurs tensoriels sous rotation,

$$\hat{R}_\Omega \hat{A}_{kq} \hat{R}_\Omega^\dagger = \sum_{q'} D_{q'q}^k(\Omega) \hat{A}_{kq'} ,$$

puis en remarquant que

$$D_{K_1 M_1}^{J_1*} = (-1)^{K_1 - M_1} D_{-K_1 - M_1}^{J_1} ,$$

nous faisons apparaître le produit de deux matrices de Wigner qui peut être réduit par la propriété générale

$$D_{-K_1 - M_1}^{J_1} D_{q'q}^k = \sum_I \sum_{M, M' = -I}^I \langle J_1, -K_1, k, q' | I, M \rangle \langle J_1, -M_1, k, q | I, M' \rangle D_{M M'}^I .$$

Ainsi, le terme  $\hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{A}_{kq}$  intervenant dans (2.42) prend la forme

$$\hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{A}_{kq} = \frac{2J_1 + 1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{M M'}^I(\Omega) \sum_{q', I, M, M'} (-1)^{K_1 - M_1} \langle J_1, -K_1, k, q' | I, M \rangle \times \langle J_1, -M_1, k, q | I, M' \rangle \hat{A}_{kq'} \hat{R}_\Omega ,$$

dans laquelle nous reconnaissons, à un facteur près, l'opérateur  $\hat{P}_{-M - M'}^I$ . En multipliant ce résultat à droite par  $\hat{P}_{M_2 K_2}^{J_2}$ , nous trouvons, une nouvelle fois grâce à (2.35),

$$\hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{A}_{kq} \hat{P}_{M_2 K_2}^{J_2} = \frac{2J_1 + 1}{2J_2 + 1} \sum_{q', M} (-1)^{K_1 - M_1 + M + M_2} \langle J_1, -K_1, k, q' | J_2, M \rangle \times \langle J_1, -M_1, k, q | J_2, -M_2 \rangle \hat{A}_{kq'} \hat{P}_{-M, M_2}^{J_2} . \quad (2.43)$$

$^{10}\text{B}$	$J = 3$	$J = 1$	$J = 0$	$J = 2$
<i>Energie</i> (MeV)	-41.0521 -41.0521	-40.2843 -40.2810	-39.4534 -39.4534	-37.6757 -37.6757
$\langle N_{1p_{3/2}} \rangle$	2.6353 2.6354	2.1833 2.1824	2.5097 2.5098	2.1888 2.1889
$\langle N_{1p_{1/2}} \rangle$	0.3647 0.3646	0.8168 0.8177	0.4903 0.4902	0.8112 0.8111
$Q_2$ ( $e \cdot \text{fm}^2$ )	8.3042 8.3056	0.3654 0.3817	0.0000 0.0000	-1.6598 -1.6603
$\mu_1$ ( $\mu_N$ )	1.8676 1.8677	0.8085 0.8071	0.0000 0.0000	1.1661 1.1660
Probabilités de transition	$2 \rightarrow 0$	$3 \rightarrow 1$	$1 \rightarrow 2$	$3 \rightarrow 4$
$B_{E2}$ ( $e^2 \cdot \text{fm}^4$ )	0.0366 0.0366	2.6236 2.6356	— —	— —
$B_{M1}$ ( $\mu_N^2$ )	— —	— —	0.0009 0.0009	0.0000 0.0000

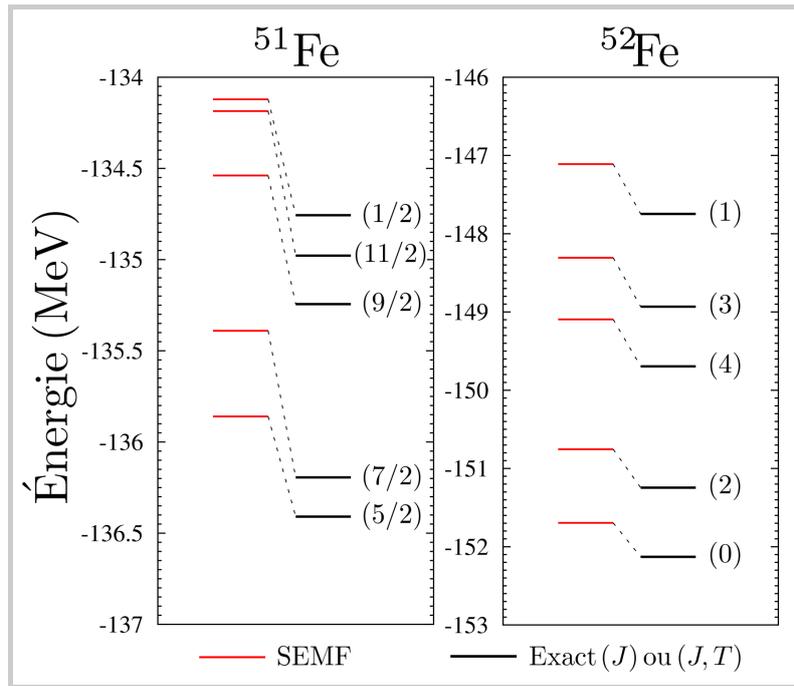
**Tableau 2.2** – Comparaison des valeurs exactes (au dessus) et SEMF (en dessous) des énergies, nombres d’occupation, moments quadrupolaire et dipolaires, et probabilités réduites de transition pour les quelques premiers états du noyau  $^{10}\text{B}$  de la couche *p* avec l’interaction de Cohen-Curath.

Bien qu’à ce stade l’objectif visé se trouve d’ores et déjà atteint, il est possible d’alléger cette relation une fois celle-ci injectée dans (2.42). En effet, en usant des propriétés de symétrie des coefficients de Clebsch-Gordan, les sommes portant sur les indices  $M_1$ ,  $M_2$ , et  $q$  qui y sont présentes se factorisent et se voient même simplifiées par le facteur  $2J_2 + 1$  de (2.43). Ensuite, après avoir légitimement changer  $M$  en  $-M$  et  $q'$  en  $q$ , la somme sur  $M$  s’élimine car l’élément  $\langle J_2, M, k, q | J_1, K_1 \rangle$  alors obtenu n’est non nul que si  $M = K_1 - q$ . Nous arrivons finalement à une expression de l’élément réduit dans laquelle ne subsiste qu’un seul opérateur de projection :

$$\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{J_1} | \hat{A}_k | \Psi_{\text{SEMF}}^{J_2} \rangle = \sqrt{2J_1 + 1} \sum_{K_1, K_2, q} C_{K_1}^{J_1*} C_{K_2}^{J_2} \langle J_2, K_1 - q, k, q | J_1, K_1 \rangle \times \langle \Phi_1 | \hat{A}_{kq} \hat{P}_{K_1 - q, K_2}^{J_2} | \Phi_2 \rangle .$$

Les observables citées plus haut ont été calculées par cette identité, les résultats étant compilés sur les figures 2.4, 2.5, et 2.6 pour chacun des trois noyaux respectivement. Les charges effectives et facteurs- $g$  choisis sont signalés dans les légendes. Enfin, la paramétrisation de la longueur caractéristique de l’oscillateur harmonique en fonction du nombre de nucléons est celle du code ANTOINE. On constate que la méthode fournit une bonne approximation des nombres d’occupation. De plus, les moments et probabilités de transition sont eux aussi globalement corrects, leurs ordres de grandeur et signes étant bien reproduits pour chaque valeur du spin et pour les trois types de noyaux considérés.

Dans le but d’étudier l’influence de la taille de l’espace à un corps sur la qualité des résultats de la méthode SEMF, toutes les grandeurs précédentes ont été évaluées pour le noyau  $^{10}\text{B}$  de la couche *p* avec l’interaction de Cohen-Kurath [97, 98], et pour les isotopes  $^{51}\text{Fe}$  et  $^{52}\text{Fe}$  de la couche *fp* avec l’interaction GXPF1A [75, 76]. Signalons que le  $^{52}\text{Fe}$  est le dernier noyau  $N = Z$  de cette couche dont le nombre de nucléons de valence nous autorise encore la diagonalisation de la matrice hamiltonienne au regard des moyens numériques du laboratoire.



**Figure 2.3** – Spectres « yrast » de basse énergie des noyaux de la couche  $fp$   $^{51}\text{Fe}$  et  $^{52}\text{Fe}$  avec l'interaction GXPFI1A. En rouge à gauche les énergies SEMF et à droite en noir les énergies exactes.

Le tableau 2.2 récapitule alors les résultats obtenus pour le  $^{10}\text{B}$  en omettant les nombres d'occupation des protons qui sont égaux à ceux des neutrons, ainsi que l'isospin carré moyen qui est parfaitement égal à  $T(T + 1)$  pour tous les états traités. Pour ce noyau, la méthode SEMF est essentiellement exacte, aux erreurs numériques liées à la discrétisation des intégrales assurant la projection sur les nombres quantiques du moment cinétique près. Cette conclusion s'est en réalité avérée valable de façon générale pour la couche  $p$ . Dans l'espace  $fp$ , les résultats concernant les isotopes de fer sont répertoriés sur la figure 2.3 pour les spectres, et sur les figures 2.7 et 2.8 pour les autres observables. De nouveaux, on observe que la méthode permet d'obtenir des approximations convaincantes des observables considérées, et notamment du spectre de basse énergie.

En conclusion, tous les résultats présentés laissent penser que l'approche de champs moyen enchevêtré par les symétries est à même d'offrir un état d'essai convenable, et ce pour chaque moment cinétique  $J$ , chaque type de noyau et dans différents espace de valence, en vue de la mise en place d'un échantillonnage Monte-Carlo quantique au chapitre suivant.

## 2.5 Une première application à des noyaux exotiques

L'évolution des nombres magiques lorsque  $N$  et/ou  $Z$  s'éloignent de la vallée de stabilité constitue actuellement un important axe de recherche. Très récemment, une étude expérimentale menée au GANIL<sup>10</sup> a permis d'accéder à la spectroscopie d'isotopes impairs de Cobalt se situant aux alentours du noyau  $^{68}\text{Ni}$  [99, 100]. Celui-ci est considéré comme un bon candidat pour présenter une double magicité :  $N = 40$  correspondrait alors à une fermeture

<sup>10</sup>. Grand Accélérateur National d'Ions Lourds.

de couche exotique interprétée par un affaiblissement du potentiel spin-orbite dans le champ moyen. Afin d'interpréter les résultats obtenus, des calculs de type modèle en couches avec mélange de configurations ont été effectués. Ils ont visé à apporter une explication aux systématiques observées dans l'évolution avec le nombre de neutrons de l'énergie d'excitation entre l'état fondamental  $J^\pi = 7/2^-$  et le premier état  $J^\pi = 3/2^-$  et dans la probabilité réduite de transition  $E2$  entre ces états. Avec la couche  $fp$  pour espace de valence et l'interaction effective GXPF1A, la diagonalisation complète du hamiltonien a conduit à un spectre s'accordant relativement bien avec l'expérience. En revanche, la probabilité de transition électromagnétiques  $B_{E2}(3/2^- \rightarrow 7/2^-)$  s'est avérée largement surestimée. L'influence de l'orbitale  $0g_{9/2}$  n'a par ailleurs pu être que partiellement étudiée en raison de la dimension de la matrice hamiltonienne. Des troncations ont ainsi dû être imposées en ne retenant que les configurations répondant aux critères suivants :

- l'orbitale  $0f_{7/2}$  est supposée remplie pour les neutrons ;
- la promotion de protons sur le niveau individuel  $0g_{9/2}$  est interdite ;
- seules sont retenues les excitations faisant intervenir au maximum 4 particules-4 trous.

Avec l'interaction résiduelle FPG [101], ces calculs ont finalement amené à des conclusions quasiment similaires concernant l'accord aux données expérimentales. L'ensemble des valeurs sont compilées dans le tableau 2.3 suivant :

$^{63}\text{Co}$	$E_x(3/2^-)$ (MeV)	$B_{E2}(3/2^- \rightarrow 7/2^-)$ ( $e^2 \cdot \text{fm}^4$ )	$E_x(9/2^-)$ (MeV)	$B_{E2}(9/2^- \rightarrow 7/2^-)$ ( $e^2 \cdot \text{fm}^4$ )
Expérience	0.995	$55.24 \pm 6.40$	1.384	$181.66 \pm 8.04^*$
$fp$	0.871	140.15	1.149	165.17
$fp_{g_{9/2}}$	0.744	199.22	1.714	168.69

\*valeur obtenue en supposant une transition purement  $E2$ .

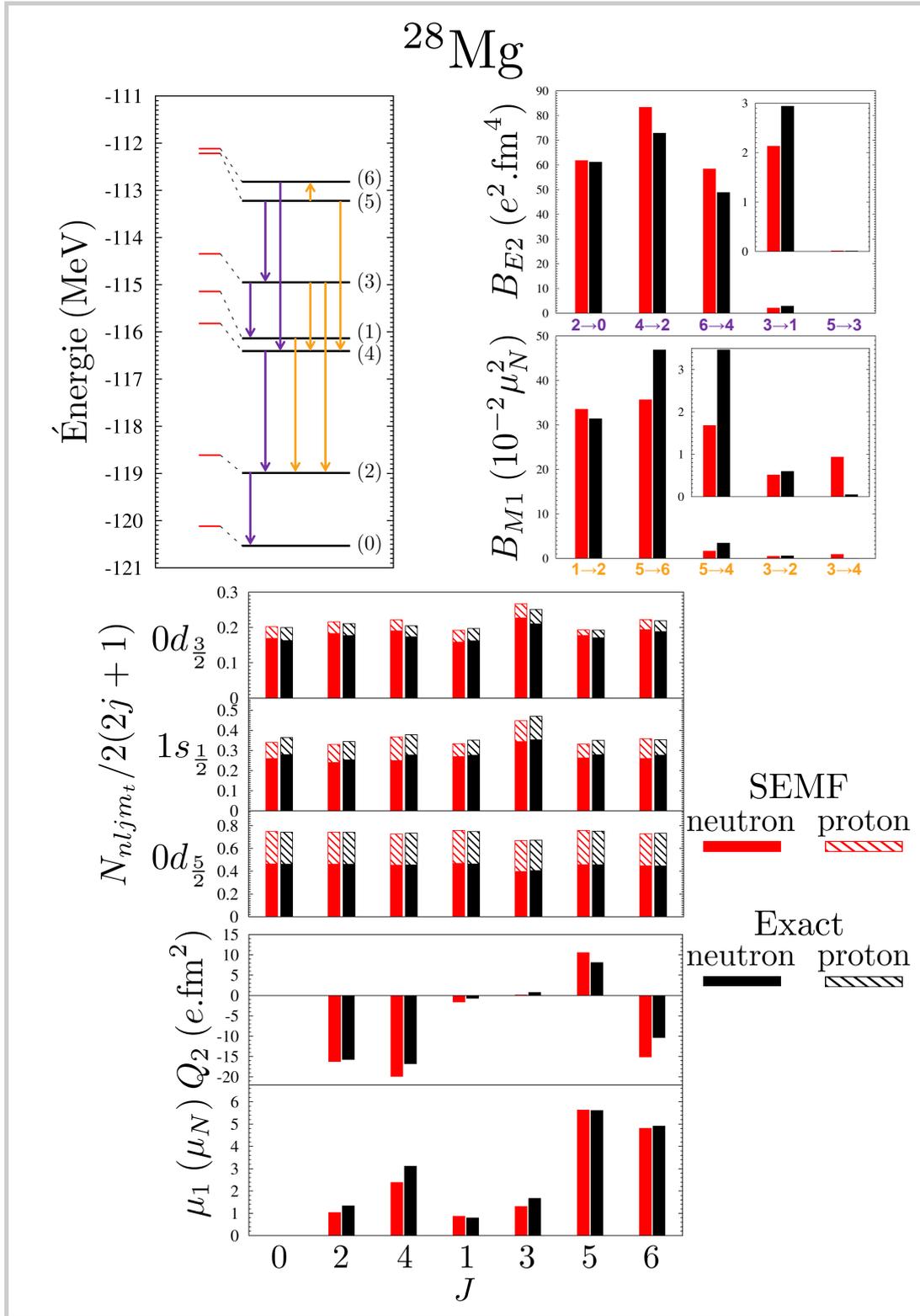
**Tableau 2.3** – Résultats expérimentaux [99,100] et des calculs de type modèle en couches (avec les espaces de valence  $fp$  et  $fp_{g_{9/2}}$ ) pour les énergies d'excitations des états  $3/2^-$  et  $9/2^-$  du noyau  $^{63}\text{Co}$ , ainsi que pour les probabilités réduites de transition vers l'état fondamental  $7/2^-$  correspondantes.

En collaboration avec A. Dijon et P. Van Isacker du GANIL, nous avons donc entrepris d'évaluer l'impact de la troncation de l'espace des configurations en confrontant les résultats avec ceux fournis par la méthode de champ moyen enchevêtré par les symétries. Nous nous sommes pour le moment limités au noyau  $^{63}\text{Co}$ . Afin de tester la pertinence de l'approche pour de tels nombres de nucléons de valence ( $N_v = 16$  et  $Z_v = 7$ ), une première comparaison a été effectuée pour la couche  $fp$  (figure 2.9). Il en résulte que la méthode SEMF offre de nouveau une approximation très convenable aux différentes observables considérées, la déviation par rapport aux valeurs exactes étant du même ordre que pour les noyaux précédemment traités. Dans l'espace  $fp_{g_{9/2}}$ , les orbites  $nlj$  mises en jeu ne possèdent pas toutes la même parité et la restauration de l'invariance par inversion d'espace a dû être implémentée<sup>11</sup> conformément à la discussion de la section 2.3. Nos premiers résultats, représentés sur la figure 2.9, conduisent à des énergies considérablement plus basses (environ 15 MeV) que celles issues de la diagonalisation dans l'espace tronqué. Un tel écart peut se comprendre en examinant les nombres d'occupation : à l'approximation SEMF, l'occupation en proton de l'orbitale  $0g_{9/2}$  n'est pas du tout négligeable et permet ainsi une interaction quadrupolaire attractive entre les neutrons et

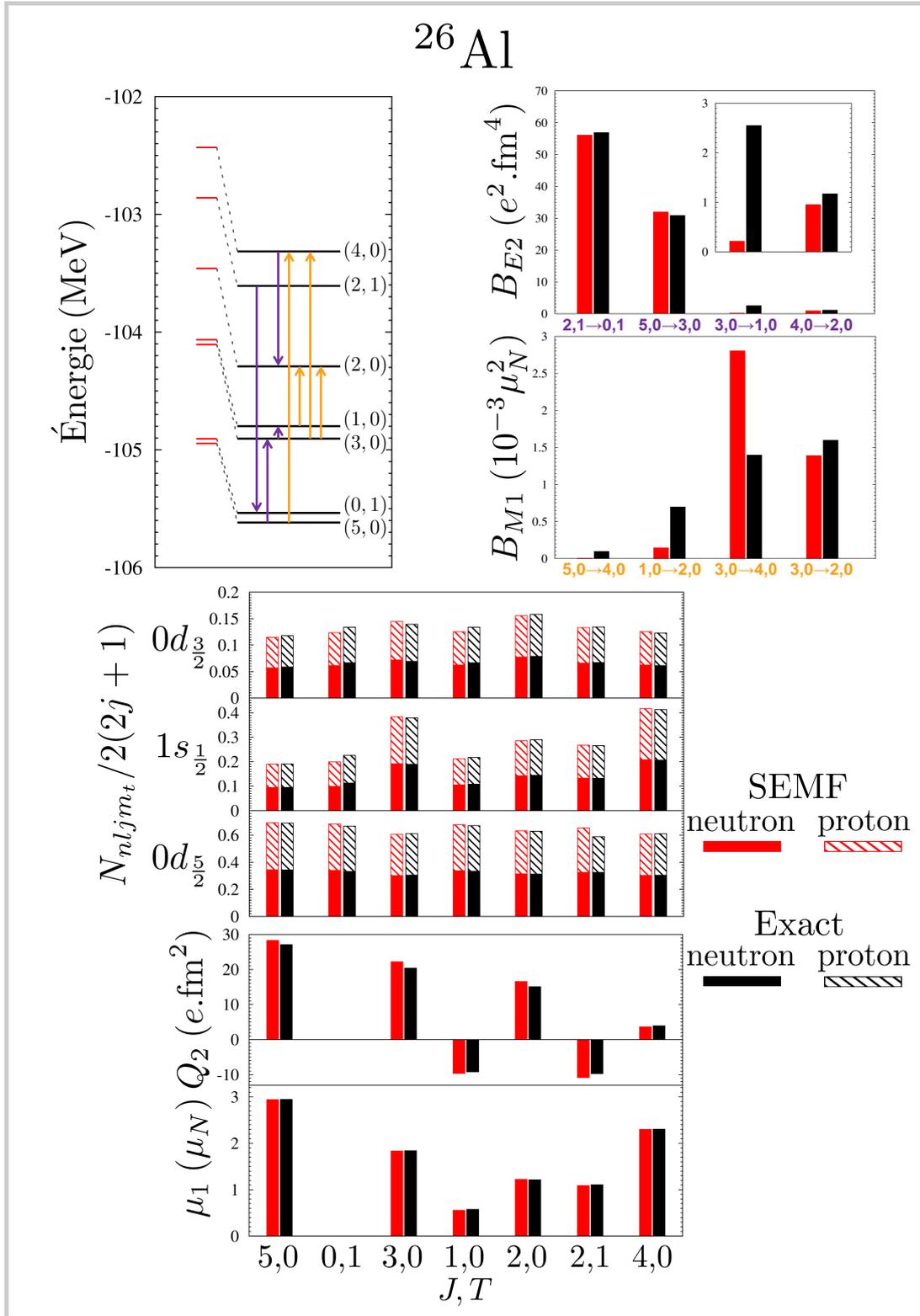
11. Notons que la projection sur la parité est numériquement exacte au sens où elle ne demande pas de discrétiser d'intégrales.

les protons. D'autre part, la méthode SEMF se rapproche de la valeur expérimentale concernant la probabilité réduite de transition  $E2$  de l'état  $J^\pi = 3/2^-$  vers l'état  $J^\pi = 7/2^-$  :  $B_{E2} = 44.85 e^2 \cdot \text{fm}^4$ .

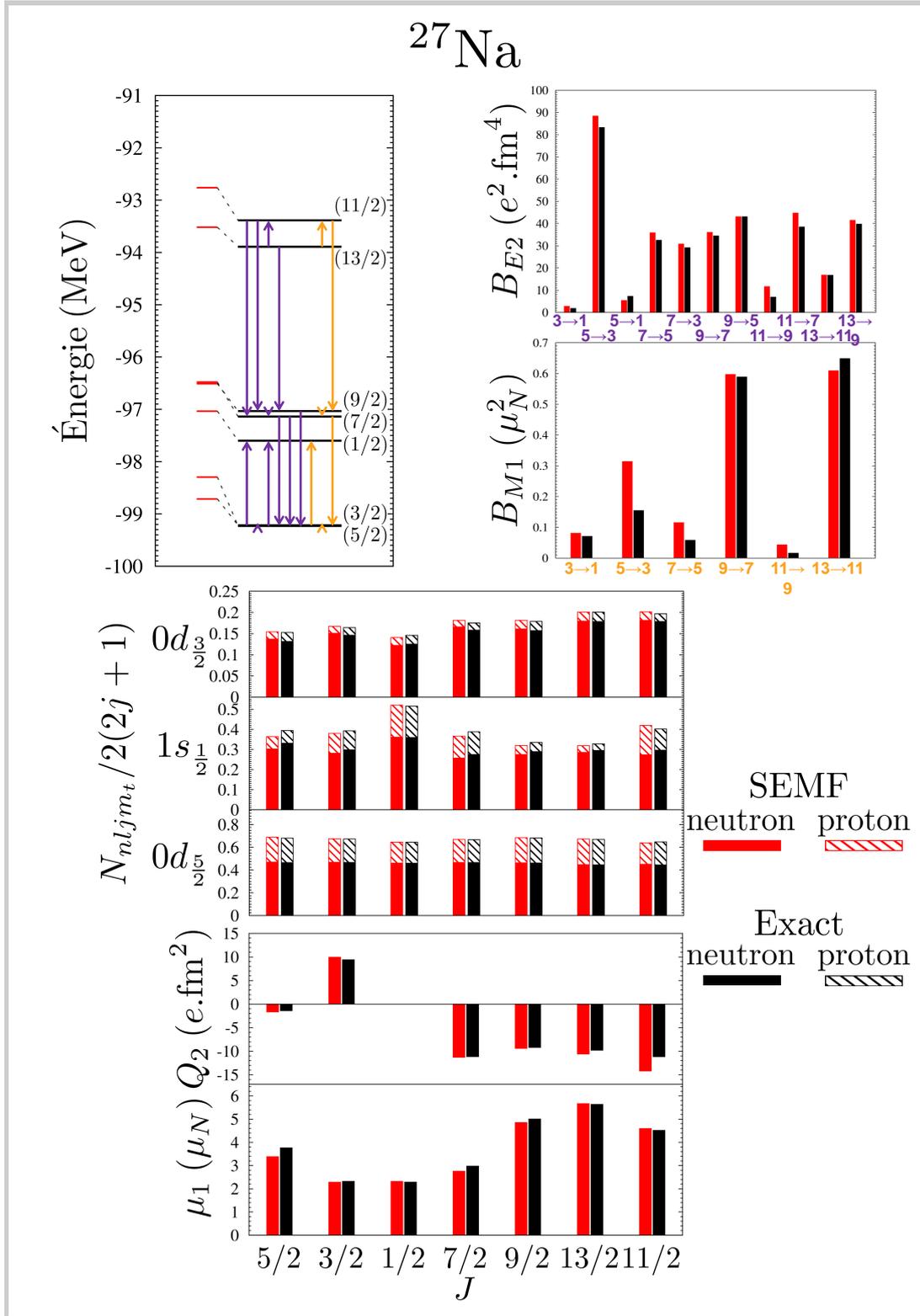
En définitive, les résultats préliminaires de l'approche SEMF sur l'étude du  $^{63}\text{Co}$  se révèlent très encourageants et montrent les limitations des approches tronquées couramment utilisées. Des calculs similaires pour les autres isotopes impairs de la chaîne de Cobalt et pour le second état excité,  $J^\pi = 9/2^-$ , mesuré expérimentalement sont actuellement en cours.



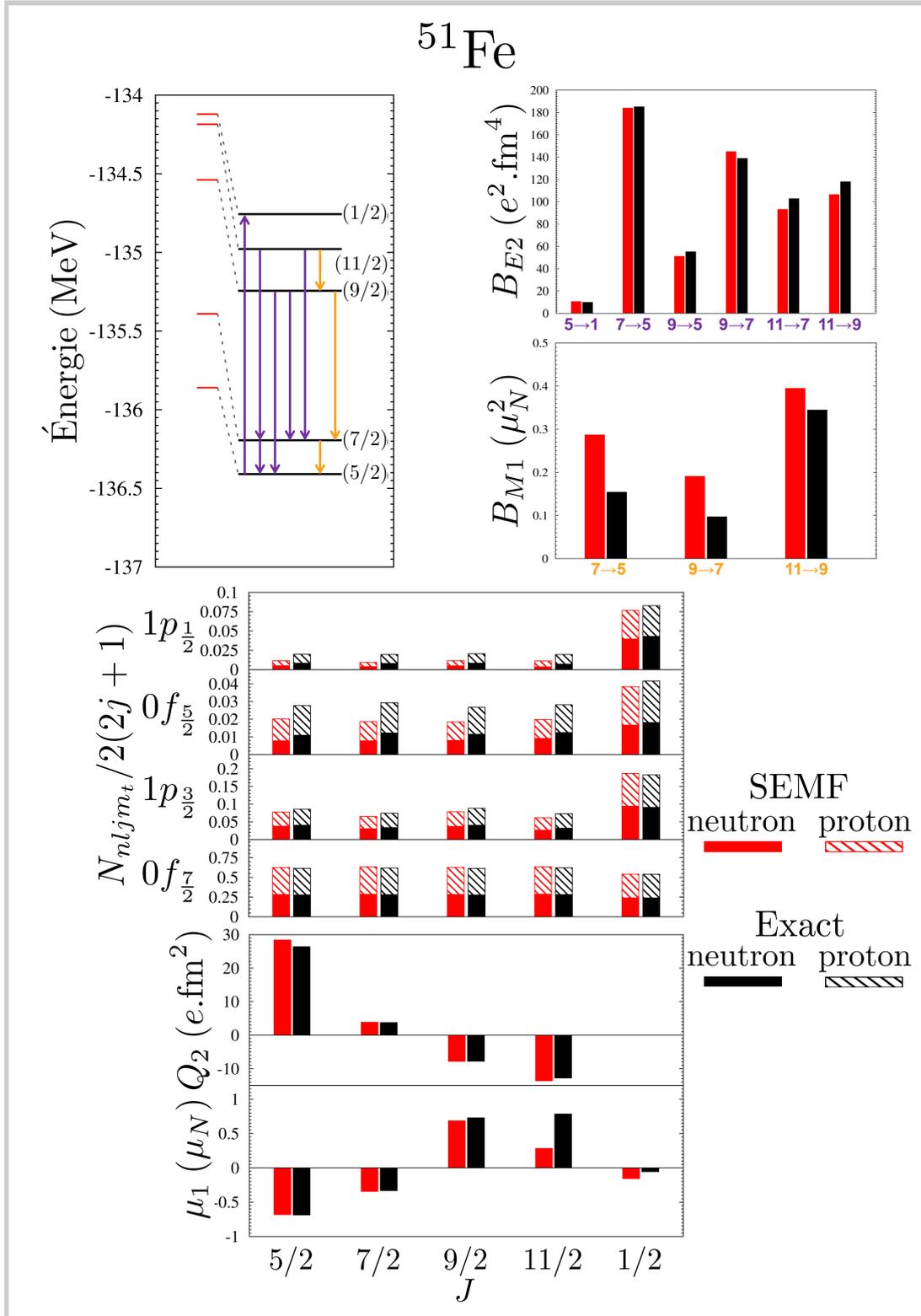
**Figure 2.4** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{28}\text{Mg}$  de la couche  $sd$ . En rouge (à gauche), les résultats de la méthode SEMF et en noir (à droite) les valeurs exactes. Le spectre en énergie est reproduit pour illustrer les transitions permises entre les états traités. Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les calculs de moments et de probabilités de transition multipolaires sont :  $e^{\text{eff}} = 0.49e$ ,  $g^l = 0.036$ ,  $g^s = -3.875$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.29e$ ,  $g^l = 1.03$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons. Les encadrés présents dans le panneau donnant les probabilités réduites de transition sont des agrandissements pour les transitions associées.



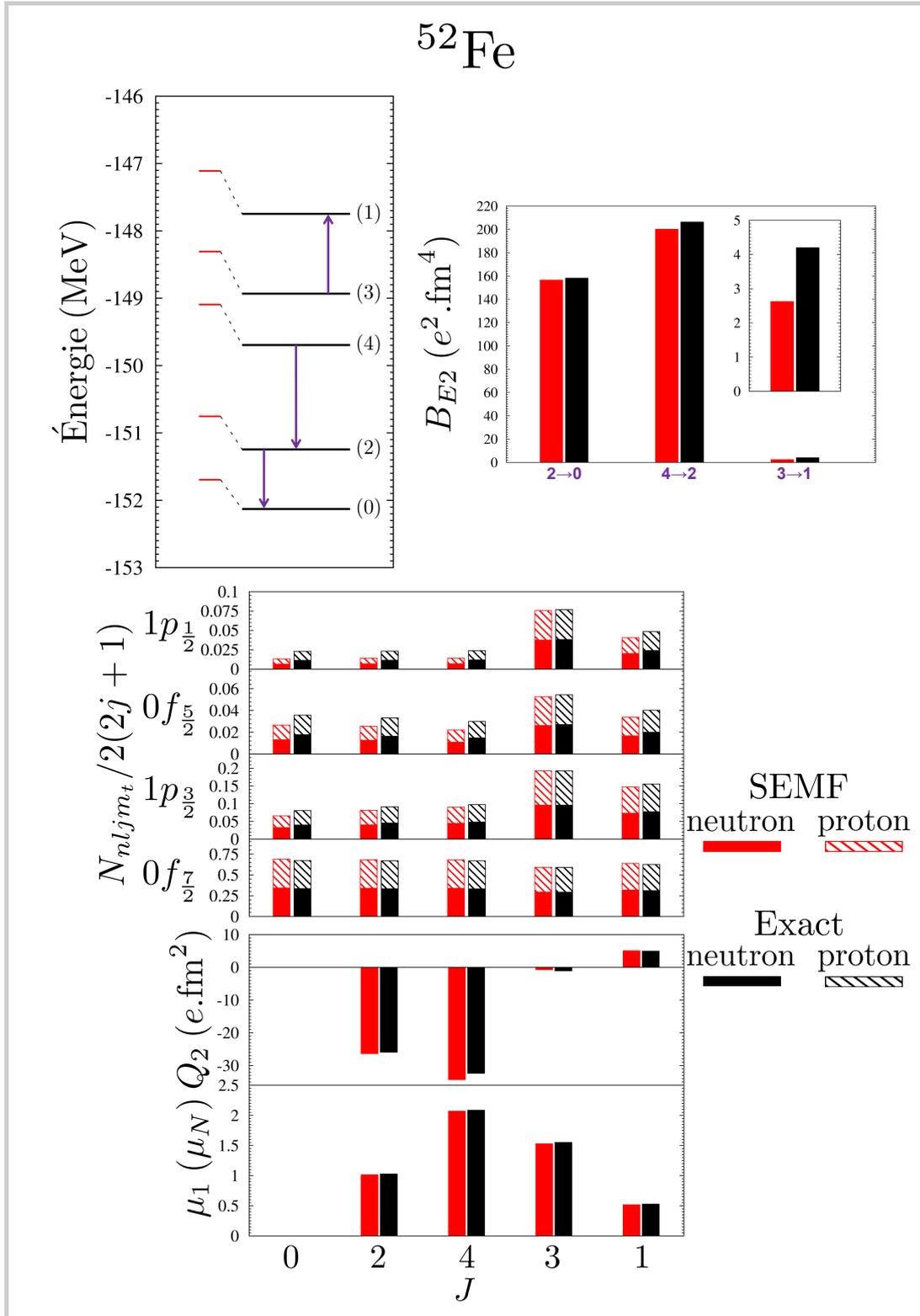
**Figure 2.5** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{26}\text{Al}$  de la couche  $sd$ . En rouge (à gauche), les résultats de la méthode SEMF et en noir (à droite) les valeurs exactes. Le spectre en énergie est reproduit pour illustrer les transitions permises entre les états traités. Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les calculs de moments et de probabilités de transition multipolaires sont :  $e^{\text{eff}} = 0.49e$ ,  $g^l = 0.036$ ,  $g^s = -3.875$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.29e$ ,  $g^l = 1.03$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons. L'encadré présent dans le panneau donnant les probabilités réduites de transition  $B_{E2}$  est un agrandissement pour les transitions associées.



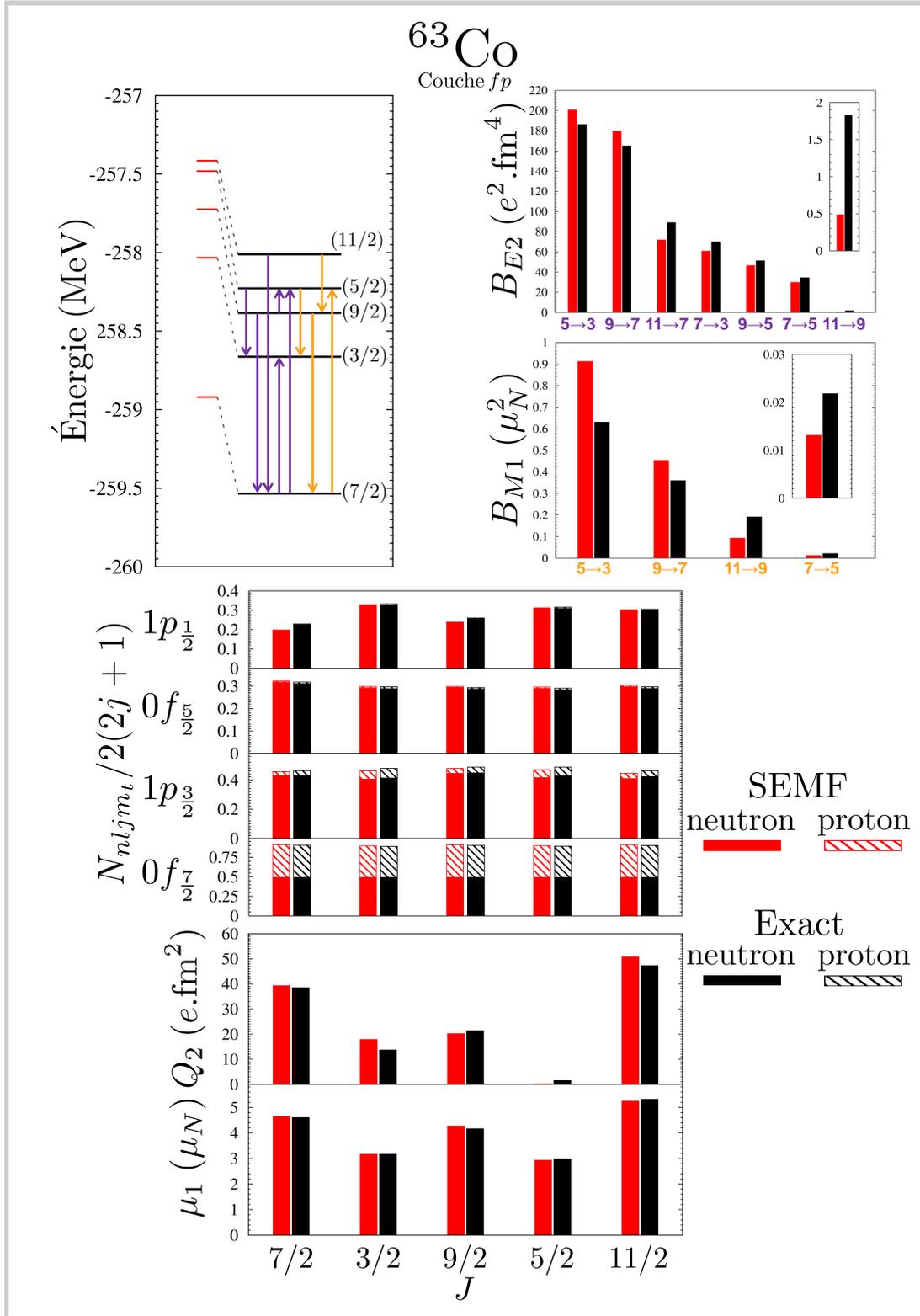
**Figure 2.6** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{27}\text{Na}$  de la couche  $sd$ . En rouge (à gauche), les résultats de la méthode SEMF et en noir (à droite) les valeurs exactes. Le spectre en énergie est reproduit pour illustrer les transitions permises entre les états traités. Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les calculs de moments et de probabilités de transition multipolaires sont :  $e^{\text{eff}} = 0.49e$ ,  $g^l = 0.036$ ,  $g^s = -3.875$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.29e$ ,  $g^l = 1.03$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons.



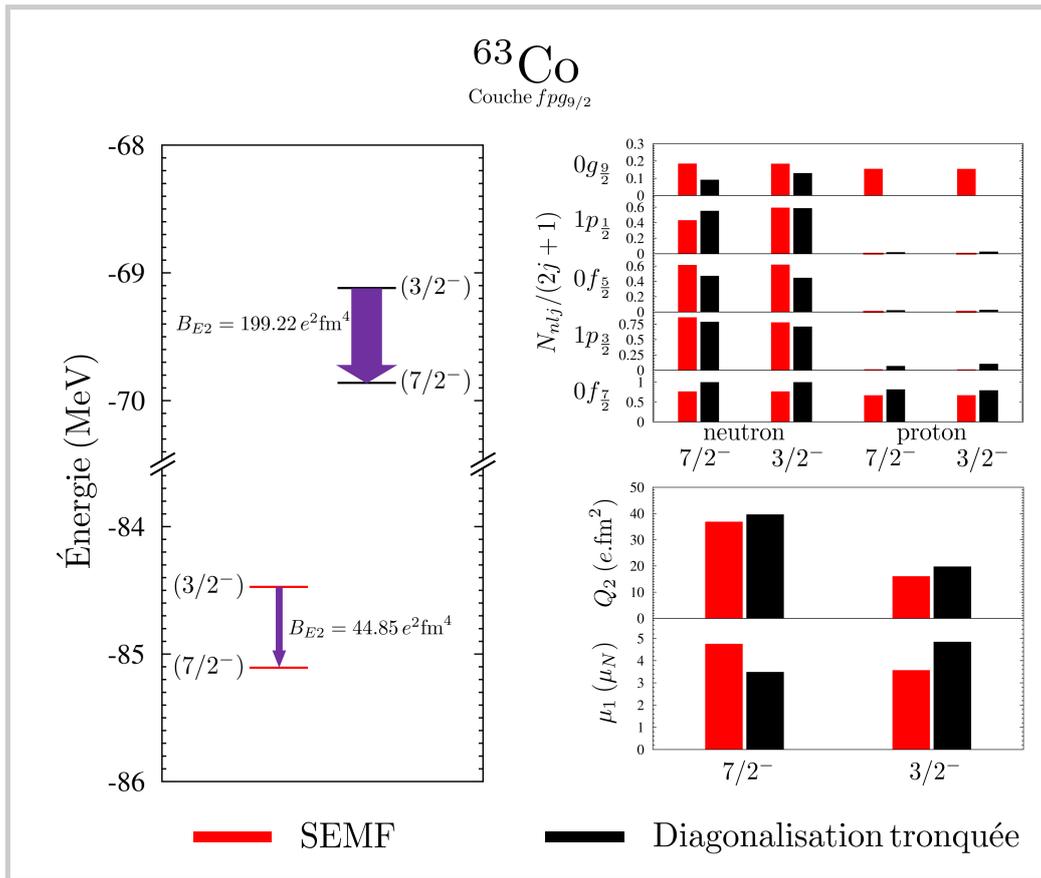
**Figure 2.7** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{51}\text{Fe}$  de la couche  $fp$ . En rouge (à gauche), les résultats de la méthode SEMF et en noir (à droite) les valeurs exactes. Le spectre en énergie est reproduit pour illustrer les transitions permises entre les états traités. Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les calculs de moments et de probabilités de transition multipolaires sont :  $e^{\text{eff}} = 0.5e$ ,  $g^l = 0$ ,  $g^s = -3.826$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.5e$ ,  $g^l = 1$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons.



**Figure 2.8** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{52}\text{Fe}$  de la couche  $fp$ . En rouge (à gauche), les résultats de la méthode SEMF et en noir (à droite) les valeurs exactes. Le spectre en énergie est reproduit pour illustrer les transitions permises entre les états traités. Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les calculs de moments et de probabilités de transition multipolaires sont :  $e^{\text{eff}} = 0.5e$ ,  $g^l = 0$ ,  $g^s = -3.826$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.5e$ ,  $g^l = 1$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons. L'encadré présent dans le panneau donnant les probabilités réduites  $B_{E2}$  sont des agrandissements pour les transitions associées. Pour ce noyau, les probabilités  $B_{M1}$  ne sont pas représentées car elles sont nulles pour toutes les transitions de cet ordre permises entre les niveaux d'énergie considérés.



**Figure 2.9** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{63}\text{Co}$  en prenant la couche  $fp$  pour couche active. En rouge (à gauche), les résultats de la méthode SEMF et en noir (à droite) les valeurs exactes. Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les calculs de moments et de probabilités de transition multipolaires sont :  $e^{\text{eff}} = 0.5e$ ,  $g^l = 0$ ,  $g^s = -3.826$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.5e$ ,  $g^l = 1$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons. Les encadrés présents dans le panneau donnant les probabilités réduites de transition sont des agrandissements pour les transitions associées.



**Figure 2.10** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{63}\text{Co}$  en prenant la couche  $fp$  et le niveau  $0g_{9/2}$  pour couche active. En rouge (à gauche), les résultats de la méthode SEMF et en noir (à droite) les valeurs issues de la diagonalisation du hamiltonien avec la troncation de l'espace des configurations décrite dans le texte. Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les calculs de moments et de probabilités de transition multipolaires sont :  $e^{\text{eff}} = 0.5e$ ,  $g^l = 0$ ,  $g^s = -3.826$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.5e$ ,  $g^l = 1$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons. La taille des flèches présentes sur le spectre représentent la probabilité réduite  $B_{E2}$  associée.

---

---

# CHAPITRE 3

---

---

## Reformulations stochastiques du modèle en couches nucléaire

Ce chapitre vise à présenter un nouveau schéma QMC dédié à la reconstruction de la spectroscopie des noyaux dans le cadre du modèle en couches en se basant sur l'approximation de champ moyen enchevêtré par les symétries décrite précédemment.

Nous montrerons tout d'abord comment le hamiltonien peut être ramené à une forme quadratique d'opérateurs à un corps. Les approches QMC existantes pour le modèle en couches seront ensuite décrites puis étendues pour implémenter un schéma de contrôle du problème de phase *via* une contrainte sur les trajectoires browniennes.

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Forme quadratique du hamiltonien</b>	<b>62</b>
<b>3.2</b>	<b>Schémas QMC à champs auxiliaires pour le modèle en couches</b>	<b>65</b>
<b>3.3</b>	<b>Approximation des chemins contraints</b>	<b>69</b>
<b>3.4</b>	<b>Mise en œuvre numérique</b>	<b>72</b>
3.4.1	Discrétisation des équations différentielles stochastiques	72
3.4.2	Simulation de la distribution des marcheurs selon leur poids et estimation des observables	74
3.4.3	Influence des différents paramètres de simulation	76
<b>3.5</b>	<b>Premiers résultats dans les couches <i>sd</i> et <i>fp</i></b>	<b>78</b>

---

## 3.1 Forme quadratique du hamiltonien

Nous allons dans cette section montrer comment le hamiltonien du modèle en couche peut être mis sous une forme quadratique  $\hat{H} = \hat{T} - \sum_s \omega_s \hat{O}_s^2$  nécessaire à l'implémentation des schémas QMC du chapitre 1. Introduisons pour cela quelques notations. Soient  $\hat{n}_{nljm}$  et  $\hat{p}_{nljm}$  (resp.  $\hat{n}_{nljm}^\dagger$  et  $\hat{p}_{nljm}^\dagger$ ) les opérateurs de destruction (resp. de création) d'un neutron et d'un proton dans un état  $|nljm\rangle$  solution (2.2) de l'approximation à particules indépendantes. Dans le formalisme de l'isospin, nous écrivons respectivement ces opérateurs<sup>1</sup>  $\hat{c}_{\Gamma mm_t = \frac{1}{2}}$  et  $\hat{c}_{\Gamma mm_t = -\frac{1}{2}}$  où  $\Gamma$  rassemble les nombres quantiques  $n, l$ , et  $j$ . De cette manière, l'interaction résiduelle à deux corps s'écrit

$$\hat{V}_{\text{res}}^{\text{eff}} = -\frac{1}{4} \sum_{\substack{\Gamma_a \rightarrow \Gamma_d \\ J, M, T, M_T}} N_{ab} N_{cd} V_{abcd}^{JT} (-1)^{J+T-M-M_T} \left[ \hat{c}_{\Gamma_a}^\dagger \otimes \hat{c}_{\Gamma_b}^\dagger \right]_{MM_T}^{JT} \left[ \hat{\tilde{c}}_{\Gamma_c} \otimes \hat{\tilde{c}}_{\Gamma_d} \right]_{-M-M_T}^{JT}, \quad (3.1)$$

où  $N_{ab} = (1 + \delta_{\Gamma_a \Gamma_b})^{1/2}$ . Au vu de leurs relations de commutation avec le moment cinétique total et l'isospin total, les opérateurs de création se comportent comme les composantes d'un opérateur tensoriel irréductible. Il en est de même pour leurs adjoints dès lors qu'ils sont multipliés par des facteurs de phase adéquats, ce qui correspond aux opérateurs  $\hat{\tilde{c}}_{\Gamma mm_t}$  figurant dans (3.1), soit

$$\hat{\tilde{c}}_{\Gamma mm_t} = (-1)^{j+\frac{1}{2}-m-m_t} \hat{c}_{\Gamma -m-m_t} \iff \hat{c}_{\Gamma mm_t} = (-1)^{j+\frac{1}{2}+m+m_t} \hat{\tilde{c}}_{\Gamma -m-m_t}. \quad (3.2)$$

D'autre part,  $V_{abcd}^{JT}$  désigne l'élément de matrice de l'interaction effective dans une base ortho-normée d'états antisymétriques à deux nucléons couplés à un moment cinétique total  $J$  et à un isospin  $T$  :

$$\begin{aligned} |\Gamma_a \Gamma_b J M T M_T\rangle &= N_{ab}^{-1} \left[ \hat{c}_{\Gamma_a}^\dagger \otimes \hat{c}_{\Gamma_b}^\dagger \right]_{MM_T}^{JT} |-\rangle \\ &= N_{ab}^{-1} \sum_{\substack{m_a, m_b \\ m_{t_a}, m_{t_b}}} \langle j_a, m_a, j_b, m_b | J, M \rangle \langle \frac{1}{2}, m_{t_a}, \frac{1}{2}, m_{t_b} | T, M_T \rangle \\ &\quad \times \hat{c}_{\Gamma_a m_a m_{t_a}}^\dagger \hat{c}_{\Gamma_b m_b m_{t_b}}^\dagger |-\rangle, \end{aligned} \quad (3.3)$$

le vecteur  $|-\rangle$  représentant le vide de particules. Ces états couplés vérifient

$$|\Gamma_a \Gamma_b J M T M_T\rangle = (-1)^{j_a + j_b - J - T} |\Gamma_b \Gamma_a J M T M_T\rangle, \quad (3.4)$$

en conséquence de leur antisymétrisation et des propriétés des coefficients de Clebsch-Gordan. Ils ne sont ainsi définis que si  $J + T$  est impair lorsque les deux nucléons occupent la même orbite ( $\Gamma_a = \Gamma_b$ ). En vertu de l'invariance par rotation et de l'invariance de charge de l'interaction, celle-ci ne couple que des états de moments cinétiques et d'isospins identiques. De plus, ses éléments de matrice ne dépendent pas de  $M$  ni de  $M_T$  :

$$\langle \Gamma_a \Gamma_b J M T M_T | \hat{V}_{\text{res}}^{\text{eff}} | \Gamma_c \Gamma_d J' M' T' M'_T \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \delta_{TT'} \delta_{M_T M'_T} V_{abcd}^{JT}, \quad (3.5)$$

avec

$$V_{bacd}^{JT} = (-1)^{j_a + j_b - J - T} V_{abcd}^{JT} \quad ; \quad V_{abdc}^{JT} = (-1)^{j_c + j_d - J - T} V_{abcd}^{JT}, \quad (3.6)$$

en raison des propriétés (3.4) précédentes des états couplés.

1. De même que pour le spin, nous omettons le nombre quantique d'isospin d'un nucléon  $t$  toujours égal à  $1/2$ .

Dans le but de déterminer la forme souhaitée du hamiltonien, nous suivons ici la démarche adoptée pour les schémas QMC traditionnels [102], et dont le principe a été brièvement décrit au début de la section 1.2.2. Commençons ainsi par décomposer l'interaction résiduelle effective en deux parties respectivement à un et à deux corps. En découplant tout d'abord les moments cinétiques et les isospins, puis à l'aide de l'identité triviale  $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_l = \delta_{jk} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_l - \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l$ , nous parvenons aisément à  $\hat{V}_{\text{res}}^{\text{eff}} = \hat{V}^{(1)} + \hat{V}^{(2)}$  où  $\hat{V}^{(1)}$  et  $\hat{V}^{(2)}$  sont donnés par les expressions suivantes :

$$\hat{V}^{(1)} = -\frac{1}{4} \sum_{\substack{\Gamma_a, \Gamma_b, \Gamma_c \\ j_a=j_c}} \sum_{\substack{J, T \\ m, m_t}} N_{ab} N_{bc} V_{abc}^{JT} (-1)^{J+T+j_b+\frac{1}{2}-m-m_t} \times \frac{(2J+1)(2T+1)}{2(2j_a+1)} \hat{c}_{\Gamma_a m m_t}^\dagger \hat{\tilde{c}}_{\Gamma_c -m -m_t} , \quad (3.7a)$$

$$\hat{V}^{(2)} = -\frac{1}{4} \sum_{\substack{\Gamma_a \rightarrow \Gamma_d \\ J, T}} \sum_{\substack{K, M_K \\ U, M_U}} N_{ab} N_{cd} V_{abcd}^{JT} (-1)^{J+T-M_K-M_U+j_b+j_c} (2J+1) \begin{Bmatrix} j_a & j_b & J \\ j_d & j_c & K \end{Bmatrix} \times (2T+1) \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & U \end{Bmatrix} \left[ \hat{c}_{\Gamma_a}^\dagger \otimes \hat{\tilde{c}}_{\Gamma_c} \right]_{M_K M_U}^{KU} \left[ \hat{c}_{\Gamma_b}^\dagger \otimes \hat{\tilde{c}}_{\Gamma_d} \right]_{-M_K -M_U}^{KU} . \quad (3.7b)$$

Les symboles  $\{:::\}$  se rapportent à des coefficients « 6j's » issus du recouplage des termes  $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k$  et  $\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l$  par une transformation de Pandya [103]. Définissons alors de nouveaux opérateurs tensoriels d'annihilation de neutrons et de protons par une relation similaire à (3.2)

$$\hat{n}_{\Gamma m} = (-1)^{j-m} \hat{n}_{\Gamma -m} \quad ; \quad \hat{p}_{\Gamma m} = (-1)^{j-m} \hat{p}_{\Gamma -m} .$$

En posant aussi

$$\hat{\mathcal{O}}_{M_K}^K(\Gamma_a, \Gamma_b) = \left[ \hat{n}_{\Gamma_a}^\dagger \otimes \hat{n}_{\Gamma_b} + \hat{p}_{\Gamma_a}^\dagger \otimes \hat{p}_{\Gamma_b} \right]_{M_K}^K ,$$

les contributions à un corps  $\hat{V}^{(1)}$  et deux corps  $\hat{V}^{(2)}$  deviennent immédiatement :

$$\hat{V}^{(1)} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{\Gamma_a, \Gamma_b, \Gamma_c \\ j_a=j_c, J}} N_{ab} N_{bc} (-1)^{J-j_a-j_b} \frac{2J+1}{\sqrt{2j_a+1}} \left( \frac{1}{2} V_{abc}^{JT=0} - \frac{3}{2} V_{abc}^{JT=1} \right) \hat{\mathcal{O}}_0^0(\Gamma_a, \Gamma_c) , \quad (3.8a)$$

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{\Gamma_a \rightarrow \Gamma_d \\ J, K, M_K}} \mathcal{N}_{abcd}^{JK} (-1)^{M_K} \left\{ \left( \frac{1}{4} V_{abcd}^{JT=0} + \frac{3}{4} V_{abcd}^{JT=1} \right) \hat{\mathcal{O}}_{M_K}^K(\Gamma_a, \Gamma_c) \hat{\mathcal{O}}_{-M_K}^K(\Gamma_b, \Gamma_d) + \frac{1}{2} \sum_{M_U=-1}^1 (-1)^{M_U} \left( V_{abcd}^{JT=1} - V_{abcd}^{JT=0} \right) \left[ \hat{c}_{\Gamma_a}^\dagger \otimes \hat{\tilde{c}}_{\Gamma_c} \right]_{M_K M_U}^{KU=1} \left[ \hat{c}_{\Gamma_b}^\dagger \otimes \hat{\tilde{c}}_{\Gamma_d} \right]_{-M_K -M_U}^{KU=1} \right\} , \quad (3.8b)$$

avec

$$\mathcal{N}_{abcd}^{JK} = N_{ab} N_{cd} (-1)^{J+j_b+j_c} (2J+1) \begin{Bmatrix} j_a & j_b & J \\ j_d & j_c & K \end{Bmatrix} .$$

Précisons que les facteurs devant les éléments de matrice sont issus des valeurs des coefficients de couplage en isospin.

L'interaction nucléaire est complètement spécifiée par l'ensemble des éléments de matrice antisymétriques  $V_{abcd}^{JT}$ , utilisés comme données d'entrée de tous codes de modèle en couches

avec mélange de configurations. Nous sommes néanmoins toujours en droit d'introduire une interaction fictive supplémentaire à deux corps  $\hat{W}$  s'exprimant sous une forme identique (3.1), à l'exception près que ses éléments de matrice  $W_{abcd}^{JT}$  sont symétriques :

$$W_{bacd}^{JT} = -(-1)^{j_a+j_b-J-T} W_{abcd}^{JT} \quad ; \quad W_{abcd}^{JT} = -(-1)^{j_c+j_d-J-T} W_{abcd}^{JT} . \quad (3.9)$$

En effet, cette condition étant incompatible avec une statistique fermionique, elle entraîne  $\hat{W} = 0$ , ce que l'on prouve d'ailleurs directement sans difficulté. *Quels que soient les éléments  $W_{abcd}^{JT}$  vérifiant (3.9), les valeurs propres et vecteurs propres du hamiltonien se trouvent donc inchangés.* Les développements permettant d'aboutir à la réécriture (3.8) dans le canal particule-trou s'appliquent par ailleurs également à  $\hat{W}$ . Il est de fait possible de remplacer simplement dans ces équations  $V_{abcd}^{JT}$  par  $V_{abcd}^{JT} + W_{abcd}^{JT}$ . En choisissant alors

$$W_{abcd}^{JT=0} = V_{abcd}^{JT=1} \quad ; \quad W_{abcd}^{JT=1} = V_{abcd}^{JT=0} ,$$

ce qui est parfaitement autorisé d'après (3.6), les contributions isovectorielles ( $U = 1$ ) de la relation (3.8b) s'annulent. Finalement :

$$\hat{V}^{(1)} = \sum_{\Gamma_a, \Gamma_c} \mathcal{V}_{\Gamma_a \Gamma_c}^{(1)} \hat{\mathcal{O}}_0^0(\Gamma_a, \Gamma_c) , \quad (3.10a)$$

$$\hat{V}^{(2)} = \sum_{\substack{\Gamma_a \rightarrow \Gamma_d \\ K, M_K}} \sum_J X_{abcd}^{JK} (-1)^{M_K} \hat{\mathcal{O}}_{M_K}^K(\Gamma_a, \Gamma_b) \hat{\mathcal{O}}_{-M_K}^K(\Gamma_b, \Gamma_d) ; \quad (3.10b)$$

avec

$$\mathcal{V}_{\Gamma_a \Gamma_c}^{(1)} = \frac{\delta_{j_a j_c}}{4} \sum_{\Gamma_b} \sqrt{\frac{(1 + \delta_{\Gamma_a \Gamma_b})(1 + \delta_{\Gamma_b \Gamma_c})}{2j_a + 1}} \sum_J (-1)^{j_a+j_b+J} (2J+1) (V_{abbc}^{JT=0} + V_{abbc}^{JT=1}) , \quad (3.11)$$

et

$$X_{abcd}^K = \frac{1}{4} \sum_J \mathcal{N}_{abcd}^{JK} (V_{abcd}^{JT=0} + V_{abcd}^{JT=1}) . \quad (3.12)$$

En utilisant les propriétés des coefficients « 6j's » ainsi que (3.6), on montre aisément que les matrices  $X^K$  d'éléments  $X_{\mu\nu}^K$ , où  $\mu \equiv (\Gamma_a; \Gamma_c)$  et  $\nu \equiv (\Gamma_b; \Gamma_d)$ , sont réelles et symétriques. Elle sont en outre diagonales par bloc en conséquence de l'invariance sous une réflexion d'espace  $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$  de l'interaction résiduelle. Chaque bloc correspond à une même parité  $\varpi = (-1)^{l_a+l_c} = (-1)^{l_b+l_d}$  et sera donc logiquement noté  $X^{K\varpi}$ . Dans l'esprit de la démarche présentée à la section 1.2.2, nous introduisons alors leur décomposition spectrale

$$X_{abcd}^{K\varpi} = \sum_r \lambda_r^{K\varpi} \chi_r^{K\varpi}(\Gamma_a; \Gamma_c) \chi_r^{K\varpi}(\Gamma_b; \Gamma_d) ,$$

$\{\lambda_r^{K\varpi}\}$  et  $\{\chi_r^{K\varpi}\}$  étant respectivement leurs valeurs et vecteurs propres. En posant

$$\hat{\mathcal{O}}_{M_K r \sigma}^{K\varpi} = \frac{1}{\sqrt{2(1 + \delta_{M_K 0})}} \sum_{\substack{\Gamma_a, \Gamma_b \\ (-1)^{l_a+l_b}=\varpi}} \chi_r^{K\varpi}(\Gamma_a; \Gamma_b) \left\{ \hat{\mathcal{O}}_{M_K}^K(\Gamma_a, \Gamma_b) + \sigma (-1)^{M_K} \hat{\mathcal{O}}_{-M_K}^K(\Gamma_a, \Gamma_b) \right\} , \quad (3.13)$$

avec  $\sigma = \pm 1$ , nous aboutissons au final à la réécriture désirée du hamiltonien en termes d'une forme quadratique d'opérateurs à un corps  $\hat{H} = \hat{T} - \sum_s \omega_s \hat{\mathcal{O}}_s^2$  dans laquelle :

- $\hat{T} = \sum_{\Gamma, m} \varepsilon_{\Gamma} (\hat{n}_{\Gamma m}^{\dagger} \hat{n}_{\Gamma m} + \hat{p}_{\Gamma m}^{\dagger} \hat{p}_{\Gamma m}) + \hat{V}^{(1)} ; \quad (3.14)$

- l'indice  $s$  regroupe l'ensemble des nombres quantiques  $\{K, M_K \geq 0, \varpi, r, \sigma\}$  ;

- $\hat{\mathcal{O}}_s = \hat{\mathcal{O}}_{M_K r \sigma}^{K\varpi}$  et  $\omega_s = -\sigma \lambda_r^{K\varpi} . \quad (3.15)$

où l'on rappelle que  $\varepsilon_\Gamma$  désigne l'énergie de l'orbitale  $\Gamma$ , et où  $\hat{V}^{(1)}$  est défini par (3.10a, 3.11). Signalons d'autre part que la décomposition du hamiltonien donnée ici n'est aucunement unique (voir [102]).

Les opérateurs  $\hat{T}$  et  $\{\hat{O}_s\}$  obtenus présentent la remarquable propriété de ne pas coupler les sous-espaces des neutrons et des protons. En effet, dans les équations (3.13) et (3.14) se manifestent seulement des produits en  $\hat{n}^\dagger \hat{n}$  et  $\hat{p}^\dagger \hat{p}$ . La conséquence intéressante et immédiate sur les méthodes QMC est que les marcheurs peuvent alors être factorisés en deux déterminants de Slater, un pour chaque espèce de nucléon, sans aucune approximation. L'avantage principal est que le temps de calcul s'en trouve considérablement réduit puisque les produits matriciels, qui représentent la source la plus importante de consommation de CPU dans ce type de calculs, concernent ainsi des matrices dont la dimension est divisée par deux. Par ailleurs, à chaque ensemble d'indices  $\{K, M_K > 0, \varpi, r\}$  sont associées deux valeurs opposées de  $\omega_s$  définies par (3.15). Comme les dynamiques stochastiques en temps imaginaire présentées au précédent chapitre (section 1.2) se caractérisent par un terme de diffusion en  $\sqrt{\omega_s}$ , les marcheurs mis en jeu dans les schémas QMC correspondant sont nécessairement formés à partir d'états individuels à composantes complexes. Hormis pour des interactions résiduelles schématiques, l'échantillonnage se voit alors généralement contaminé par un problème de phase. La reconstruction des états propres du modèle en couches exige par conséquent de faire appel à l'une des approximations discutées au premier chapitre (section 1.3.2) par l'intermédiaire d'un état d'essai.

## 3.2 Schémas Monte-Carlo quantiques à champs auxiliaires pour le modèle en couches

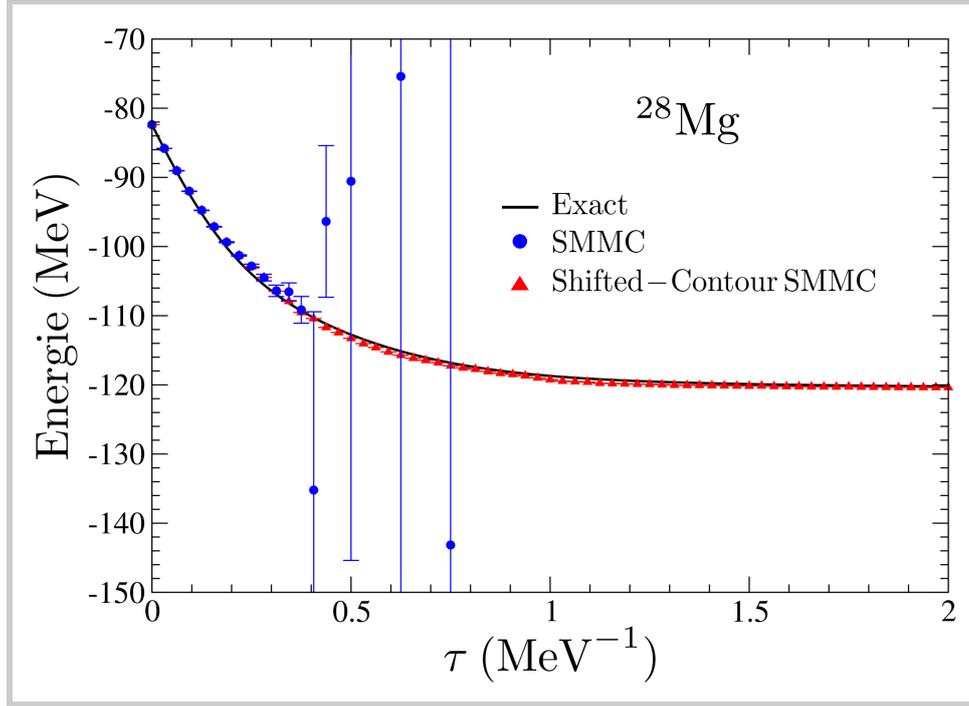
La méthode « Shell Model Monte-Carlo » (SMMC), dont les principaux auteurs sont S. E. Koonin, D. J. Dean, et K. Langanke, est aujourd'hui la principale approche QMC du modèle en couches nucléaire [22, 70, 96, 102, 104–111]. Il s'agit en réalité d'une approche standard à champs auxiliaires. À température nulle et en termes de déterminants de Slater<sup>2</sup>, elle repose ainsi sur la propagation stochastique en temps imaginaire de marcheurs  $|\Phi_\tau\rangle$  dont les états individuels évoluent selon l'équation différentielles (1.23) :

$$d|\phi_n\rangle = dh|\phi_n\rangle = \left[ -d\tau \left( T - \sum_s \omega_s O_s^2 \right) + \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s O_s \right] |\phi_n\rangle, \quad (3.16)$$

où les matrices  $T$  et  $O_s$  représentent dans l'espace de Hilbert à une particule les opérateurs à un corps (3.14) et (3.13) construits à la section précédente. Uniquement l'état fondamental peut être échantillonné dans la limite d'un temps imaginaire infini. Néanmoins, un formalisme similaire existe pour reconstituer l'état d'équilibre statistique à température finie. Au travers du calcul de fonctions de réponse, les propriétés des états excités peuvent alors être partiellement et indirectement déduites, mais une spectroscopie détaillée analogue à celle issue de la diagonalisation du hamiltonien n'est en aucun cas accessible. Les études des noyaux de la couche  $fp$  dans leur état fondamental [108], des distributions de force Gamow-Teller [108], des noyaux super-déformés [109], de l'évolution des corrélations d'appariement avec la température [96], de la double décroissance  $\beta$  [110], et le calcul des densités de niveaux [111], constituent les principales applications à ce jour de la méthode SMMC.

Le problème de signe/phase demeure l'obstacle majeur auquel se heurte la reformulation SMMC. Nous en donnons une illustration sur la figure 3.1 pour le noyau  $^{28}\text{Mg}$  de la couche

2. Il est également possible de propager des fonctions d'onde Hartree-Fock-Bogoliubov.



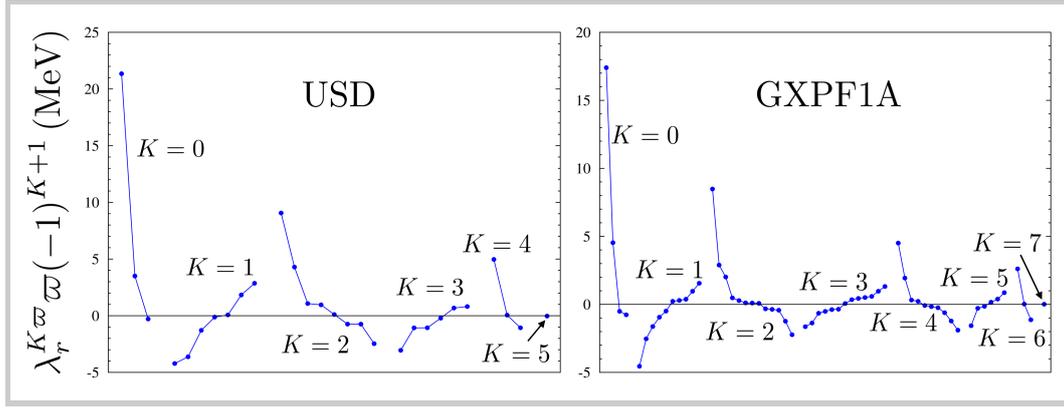
**Figure 3.1** – Évolution de l'énergie moyenne avec l'inverse de la température  $\tau$ , pour le noyau  $^{28}\text{Mg}$  de la couche  $sd$  avec l'interaction réaliste USD. Les cercles bleus et les triangles rouges dotés de barres d'erreurs sont respectivement les résultats SMMC et « shifted-contour SMMC », tandis que la courbe noire représente l'énergie exacte. Ces résultats sont issus de la référence [107].

$sd$  avec l'interaction effective phénoménologique USD [74]. Très rapidement, le rapport signal sur bruit se dégrade et seules les propriétés thermodynamiques dans le régime à haute température  $k_B T \gtrsim 3 \text{ MeV}$  peuvent concrètement être reconstruites. Comme nous l'avons discuté dans le premier chapitre, la croissance exponentielle des erreurs statistiques avec le temps imaginaire dans les échantillonnages QMC de l'état fondamental  $|\Psi_G\rangle$  s'explique par le changement de phase du recouvrement  $\langle \Psi_G | \Phi_\tau \rangle$  au cours du mouvement brownien. Pour des noyaux pair-pair ou  $N = Z$  impair-impair, la propagation stochastique (3.16) garantit en réalité l'absence de problème de signe/phase avec des interactions résiduelles à deux corps qui, dans le canal densité-densité, sont caractérisées par des matrices  $X_{abcd}^{K\varpi}$  (définies par l'équation (3.12)) admettant des valeurs propres  $\{\lambda_r^{K\varpi}\}$  telles que

$$\text{sgn}(\lambda_r^{K\varpi}) = \varpi(-1)^{K+1}, \quad (3.17)$$

où rappelons que  $\varpi = (-1)^{l_a+l_c} = (-1)^{l_b+l_d}$  désigne la parité des couples d'orbitales  $(\Gamma_a; \Gamma_c)$  et  $(\Gamma_b; \Gamma_d)$ . Cet important résultat, prouvé par G. H. Lang *et al.* [102, 105], repose sur l'argumentation générale de la section 1.3 liée à l'existence d'une transformation antilinéaire  $\mathcal{T}$  obéissant à  $\mathcal{T}^2 = -\mathbb{1}$  et sous laquelle l'opérateur stochastique  $dh$  gouvernant le mouvement (3.16) est invariant. Dans le cadre du modèle en couches, le renversement du temps répond aux critères requis avec alors  $\mathcal{T} = \exp(-\frac{i\pi}{\hbar} s_y) K_{\vec{r}}$ , où  $K_{\vec{r}}$  représente l'opérateur de conjugaison complexe dans la base des états propres de la position d'un nucléon et  $s_y$  celui associé la composante de son spin selon l'axe  $(O_y)$ . Il transforme tout état propre  $|nljm\rangle$  de l'oscillateur en  $|\overline{nljm}\rangle = \mathcal{T}|nljm\rangle = (-1)^{l+j-m}|nlj-m\rangle$  dès lors que les harmoniques sphériques ont une phase telle que  $^3 Y_{lm_l}^* = (-1)^{m_l} Y_{l-m_l}$ . En conséquence, on vérifie immé-

3. Convention de Condon et Shortley.



**Figure 3.2** – Critères de Lang (3.17) pour les hamiltoniens USD (couche  $sd$ ) et GXPF1A (couche  $fp$ ). La figure représente les produits  $\{\lambda_r^{K\varpi} \varpi(-1)^{K+1}\}$  dans chaque canal particule-trou de moment cinétique  $K$ . Les valeurs négatives correspondent à des matrices  $X_{abcd}^{K\varpi}$  données par (3.12) associées à des interactions résiduelles donnant potentiellement naissance au problème de signe/phase.

diatement que les matrices  $O_s$  sont paires ou impaires sous le renversement du temps selon les valeurs des nombres quantiques  $\varpi$ ,  $K$ , et  $\sigma$  entrant dans la définition de l'indice  $s$  :

$$\bar{O}_s = \mathcal{T}O_s\mathcal{T}^{-1} = \varpi\sigma(-1)^K O_s .$$

La partie déterministe du mouvement brownien (3.16) est donc  $\mathcal{T}$ -invariante tandis que la contribution diffusive se transforme en  $\sum_s (\sqrt{2\omega_s})^* dW_s \varpi\sigma(-1)^K O_s$ . Sous les *conditions de Lang* (3.17) pour les valeurs propres  $\{\lambda_r^{K\varpi}\}$ , chacun de ces termes stochastiques retrouve toutefois sa forme initiale et  $d\bar{h} = \mathcal{T}dh\mathcal{T}^{-1} = dh$ . En reprenant alors le raisonnement du chapitre 1, il apparaît que si les états individuels initialement occupés peuvent être groupés en paires de vecteurs ( $|\phi\rangle; |\bar{\phi}\rangle = \mathcal{T}|\phi\rangle$ ) reliés par le renversement du temps, il en est de même à tout temps imaginaire  $\tau$  et un recouvrement réel et positif avec l'état fondamental est de cette manière assuré pour tout  $\tau$ . Seuls les noyaux pair-pair ou  $N = Z$  impair-impair autorisent le choix d'un tel déterminant de Slater comme point de départ de la propagation. Avec une interaction résiduelle remplissant les conditions (3.17), ces noyaux peuvent donc être appréhendés sans problème de signe/phase avec l'approche SMMC à température nulle.

Le critère de Lang (3.17) se trouve en réalité être très restrictif et n'est concrètement satisfait que pour des hamiltoniens schématiques du modèle en couches. Par exemple, l'appariement entre nucléons identiques ou l'interaction quadrupolaire à l'origine des bandes rotationnelles le vérifient. En revanche, aucune des interactions effectives réalistes (USD, KB3 [112], GXPF1A [75, 76]) habituellement utilisées ne remplit ces conditions. Nous en donnons une illustration dans les couches  $sd$  et  $fp$  sur la figure 3.2. Le problème de signe/phase est dans ce cas inévitable et à ce jour seule une procédure empirique est mise en œuvre pour le contourner [22, 106]. Elle consiste à *modifier* le hamiltonien en attribuant un facteur  $\xi$  aux valeurs propres  $\lambda_r^{K\varpi}$  problématiques tandis que les autres se voient pondérées d'une fonction  $f(\xi)$  positive pour  $\xi < 0$  et telle que  $f(1) = 1$  afin de retrouver les interactions réelles dans la limite  $\xi = 1$ . Plusieurs calculs SMMC sont alors menés avec des valeurs  $\xi < 0$  qui garantissent par construction l'absence de problème de signe/phase. Les observables sont finalement extraites de ces simulations (non physiques) par extrapolation vers  $\xi = 1$  en supposant un comportement linéaire ou quadratique avec  $\xi$ . Au jour d'aujourd'hui, aucun test de cette technique n'a été, à notre connaissance, présenté dans le régime des hautes températures pour lequel le problème de signe/phase avec le hamiltonien original n'est pourtant pas réhibitoire. Seule une comparaison avec les résultats provenant de la diagonalisation complète dans la couche de valence  $fp$

pour le noyau de  $^{54}\text{Fe}$  a été réalisée [106] : dans ce cas, la méthode d'extrapolation semble en mesure de converger vers les valeurs exactes. Il faut toutefois noter que les valeurs propres  $\{\lambda_r^{K\varpi}\}$  dominantes (en valeur absolue) pour les principales interactions utilisées vérifient la condition de Lang (3.17), comme le montre la figure 3.2, et correspondent donc à des canaux exempts de problème de signe/phase.

De façon générale, la technique d'extrapolation décrite ci-dessus ne nous semble pas apparaître comme une solution satisfaisante : son application au modèle de Hubbard, décrivant des électrons sur un réseau et considéré comme le modèle de référence pour l'étude du problème de signe/phase, conduit d'ailleurs à des résultats totalement erronés [113].

Dans l'optique d'étendre l'applicabilité de l'approche SMMC, un nouvel échantillonnage a été proposé en 2007 sur la base d'une réécriture du hamiltonien en « décalant » chaque opérateur  $\hat{O}_s$  de sa valeur moyenne  $\langle \hat{O}_s \rangle_H$  à l'approximation de Hartree :

$$\hat{H} = \left( \sum_s \omega_s \langle \hat{O}_s \rangle_H^2 \right) \hat{\mathbb{1}} + \hat{T} - 2 \sum_s \omega_s \langle \hat{O}_s \rangle_H \hat{O}_s - \sum_s \omega_s \left( \hat{O}_s - \langle \hat{O}_s \rangle_H \hat{\mathbb{1}} \right)^2 . \quad (3.18)$$

Nous renvoyons à la référence [107] pour une présentation détaillée de la méthode QMC à température finie qui résulte de cette procédure<sup>4</sup>. Les premiers résultats obtenus dans le cadre du modèle en couches avec des interactions effectives réalistes dans les espaces *sd* et *fp* semblent révéler une très importante stabilisation de la propagation stochastique en temps imaginaire. Une illustration en est donnée sur la figure 3.1 pour le noyau  $^{28}\text{Mg}$  où des températures de l'ordre de  $k_B T \sim 0.5$  MeV peuvent alors être atteintes sans perte de contrôle des erreurs statistiques. Un comportement similaire est observé en chimie quantique où la méthode a été suggérée pour la première fois [114–116]. Cependant, les travaux effectués dans ce contexte ont montré que les schémas QMC traditionnels déduits de la réécriture (3.18) ne solutionnent pas le problème de signe/phase mais retarde simplement son émergence, ce qui peut permettre d'accéder à des températures suffisamment basses pour que le système soit quasiment dans son état fondamental. En physique nucléaire, les calculs QMC basés sur l'expression (3.18) de  $\hat{H}$  ne sont toujours pas publiés et leur validité est remise en cause dans un rapport interne du laboratoire Lawrence Livermore National Laboratory [117].

Une première tentative pour obtenir la spectroscopie « yrast » des noyaux dans le cadre d'un traitement QMC du modèle en couches a été plus récemment proposée par G. Puddu [118–121]. Elle repose sur la même dynamique en temps imaginaire que l'approche SMMC (équation (3.16)), mais les marcheurs  $y$  sont projetés sur les nombres quantiques de moment cinétique  $J$  et  $M$  ou bien uniquement  $M$ . En général, cette méthode se heurte de nouveau à une explosion des erreurs statistiques due au problèmes de signe/phase et seules des interactions résiduelles schématiques ont pu être considérées.

Actuellement, la méthode « Monte-Carlo Shell Model » développée par T. Otsuka *et al.* est la seule en mesure de déterminer la spectroscopie de noyaux pour lesquels la diagonalisation directe du hamiltonien dans l'espace de toutes les configurations accessibles est impossible [122–127]. Cette approche ne s'apparente toutefois pas à un échantillonnage QMC des états « yrast » au sens exposé au chapitre 1, c'est-à-dire au travers de la moyenne de marcheurs suivant un mouvement brownien déduit du hamiltonien. En effet, la dynamique (3.16)  $y$  est seulement employée pour construire un sous-espace formé par un petit nombre de déterminants de Slater et à l'intérieur duquel est effectuée une diagonalisation du hamiltonien après projection sur les nombres quantiques  $J$ ,  $M$ , etc. souhaités. Seuls sont retenus les déterminants pertinents en recherchant à chaque étape, parmi une population de marcheurs de taille fixée,

4. Cette méthode est connue sous le nom de « Shifted-Contour Shell Model Monte-Carlo ».

celui qui conduit à la diminution  $\Delta E$  la plus significative de l'énergie. *A priori*, aucune manifestation directe du problème de signe/phase n'apparaît donc dans cette méthode. Néanmoins, l'émergence de marcheurs collectivement orthogonaux à l'état recherché, qui est à l'origine de la divergence des erreurs statistiques dans les approches standard à champs auxiliaires du type SMMC, est ici susceptible de se traduire par des gains en énergie  $\Delta E$  très faibles au fur et à mesure que des déterminants sont inclus pour enrichir le sous-espace de travail. En d'autres termes, on ne peut *a priori* exclure une réminiscence du problème de signe/phase au travers d'une convergence extrêmement lente vers l'état exact. Malgré cette limitation potentielle, la structure de noyaux jusqu'alors inaccessibles a pu être élucidée comme par exemple la coexistence de forme de  $^{56}\text{Ni}$  [125], ou la disparition de magieité des noyaux exotiques autour de  $N = 20$  en prenant en compte à la fois la couche  $sd$  et une partie des orbites de la couche  $fp$  [126].

### 3.3 Approximation des chemins contraints

La qualité de l'approximation de champ moyen enchevêtré par les symétries, présentée au chapitre précédent, incite à initier la propagation en temps imaginaire avec les états variationnels  $|\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}\rangle$  correspondants. En effet, dans les méthodes à température nulle, le temps  $\tau$  requis pour converger vers l'état fondamental est d'autant plus faible que le point de départ est pertinent. La performance de l'échantillonnage QMC s'en trouve alors considérablement renforcée puisque les fluctuations statistiques et le problème de signe/phase s'amplifient rapidement avec  $\tau$ . En outre, l'approche SEMF pouvant être appliquée à toutes les représentations irréductibles du groupe de symétrie du hamiltonien, une reconstruction QMC de la spectroscopie « yrast » des noyaux sera ainsi accessible et constituera une première étape dans le développement d'une méthodologie alternative à la diagonalisation dans l'espace de toutes les configurations permises.

Dans ce contexte, l'énergie  $E_G^J$  d'un état « yrast »  $|\Psi_G^{JM}\rangle$  de moment cinétique<sup>5</sup>  $J$  peut être déterminée *via* l'estimateur mixte (1.47) du hamiltonien au terme de la propagation pendant un temps imaginaire suffisamment long de l'approximation SEMF pour les mêmes nombres quantiques :

$$E_G^J = \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}, \Psi_G^{JM}} \stackrel{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} | \hat{H} \exp(-\tau \hat{H}) | \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} \rangle}{\langle \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} | \exp(-\tau \hat{H}) | \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} \rangle}.$$

De la définition  $|\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}\rangle = \sum_{K=-J}^J C_K^J \hat{P}_{MK}^J |\Phi\rangle$  des états SEMF, où  $|\Phi\rangle$  désigne le déterminant de Slater de référence, et les propriétés (2.35) des opérateurs de « passage »  $\hat{P}_{MK}^J$  entre états d'une représentation standard pour  $J$  donné, il vient directement

$$E_G^J \stackrel{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\sum_{K,K'} C_K^{J*} C_{K'}^J \langle \Phi | \hat{P}_{KK'}^J \hat{H} \exp(-\tau \hat{H}) | \Phi \rangle}{\sum_{K,K'} C_K^{J*} C_{K'}^J \langle \Phi | \hat{P}_{KK'}^J \exp(-\tau \hat{H}) | \Phi \rangle}. \quad (3.19)$$

Par la suite, nous désignerons par

$$|\Psi_T^J\rangle = \sum_{K,K'} C_K^{J*} C_{K'}^J \hat{P}_{KK'}^J |\Phi\rangle, \quad (3.20)$$

l'état d'essai pour le calcul QMC de l'énergie que la relation (3.19) met en exergue. Numériquement, l'évaluation de (3.19) avec un schéma stochastique *exact* risquerait de se heurter à

5. Le raisonnement se généralise immédiatement aux autres nombres quantiques (isospin, parité, etc.) qui caractérisent les états stationnaires du noyau.

la convergence vers une forme indéterminée « 0/0 » pour un moment cinétique  $J$  différent de celui de l'état fondamental  $|\Psi_G\rangle$  du noyau. En effet, le déterminant  $|\Phi\rangle$  ne respecte aucune des symétries du hamiltonien et sa propagation  $\exp(-\tau\hat{H})|\Phi\rangle$  sur une longue durée  $\tau \rightarrow +\infty$  tend donc vers  $|\Psi_G\rangle$ . Dès lors, le recouvrement avec le vecteur d'essai  $|\Psi_T^J\rangle$  sera proche de zéro si les deux états ne se transforment pas selon la même représentation irréductible. Néanmoins, avec des interactions réalistes, une reproduction exacte de l'évolution en temps imaginaire est utopique à cause du problème de signe/phase. Les différents schémas de contrôle présentés au chapitre 1 contraignent alors le mouvement brownien de façon à avoir une population de marcheurs ayant collectivement un recouvrement réel et positif avec l'état test considéré. En conséquence, le calcul QMC de l'énergie (3.19) ne peut être mis en échec, mais il conduira à une valeur approchée. L'approximation à l'état « yrast »  $|\Psi_G^{JM}\rangle$  obtenue de la sorte par le mouvement brownien à chemins contraints sera notée  $|\tilde{\Psi}_G^{JM}\rangle$  :

$$|\tilde{\Psi}_G^{JM}\rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\propto} \sum_{K=-J}^J C_K^J \hat{P}_{MK}^J \widetilde{e^{-\tau\hat{H}}} |\Phi\rangle, \quad (3.21)$$

où l'état  $|\Psi_T^J\rangle$  défini par (3.20) est utilisé pour contrôler le problème de phase dans la propagation en temps imaginaire.

En incorporant dans la dynamique des marcheurs  $|\Phi_\tau\rangle$  un échantillonnage préférentiel avec  $\langle \Psi_T^J | \Phi_\tau \rangle$  pour distribution d'importance, l'énergie  $\tilde{E}_G^J$  sera reconstruite conformément au schéma guidé (1.45) :

$$\tilde{E}_G^J = \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}, \tilde{\Psi}_G^{JM}} \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\langle \Psi_T^J | \hat{H} \widetilde{e^{-\tau\hat{H}}} | \Phi \rangle}{\langle \Psi_T^J | \widetilde{e^{-\tau\hat{H}}} | \Phi \rangle} \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\mathbb{E}[\tilde{\Pi}_\tau \text{Re}\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T^J, \Phi_\tau}]}{\mathbb{E}[\tilde{\Pi}_\tau]}. \quad (3.22)$$

Le poids biaisé  $\tilde{\Pi}_\tau$  de chaque réalisation  $|\Phi_\tau\rangle$  à l'approximation « *cosinus* » de la section 1.3.2 évolue selon

$$\frac{\tilde{\Pi}_{\tau+d\tau}}{\tilde{\Pi}_\tau} = \exp\left(-d\tau \text{Re}\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T^J, \Phi_\tau}\right) \max\{0; \cos(d\theta)\} \quad ; \quad \tilde{\Pi}_0 = \langle \Psi_T^J | \Phi \rangle, \quad (3.23)$$

où  $d\theta$  est la variation de la phase du recouvrement avec l'état d'essai, c'est-à-dire

$$d\theta = \arg \frac{\langle \Psi_T^J | \Phi_{\tau+d\tau} \rangle}{\langle \Psi_T^J | \Phi_\tau \rangle}.$$

Enfin, les marcheurs sont factorisés en un produit  $|\Phi_\tau\rangle = |\Phi_\tau^n\rangle |\Phi_\tau^p\rangle$  de déterminants de Slater pour les neutrons et protons de valence dont les états individuels suivent un mouvement brownien en temps imaginaire régi par les équations différentielles stochastiques suivantes (en convention d'Ito) :

$$\begin{cases} d|\phi_n^x\rangle = \left[ -d\tau \left( T - \sum_s \omega_s \left( 2\langle \hat{O}_s \rangle_{\Psi_T^J, \Phi_\tau} O_s + O_s^2 \right) \right) + \sum_s \sqrt{2\omega_s} dW_s O_s \right] |\phi_n^x\rangle \\ |\phi_{n,\tau=0}^x\rangle = |\phi_n^x\rangle, \end{cases} \quad (3.24)$$

où  $n = 1 \rightarrow N_v$  pour les neutrons ( $x = n$ ),  $n = 1 \rightarrow Z_v$  pour les protons ( $x = p$ ) de valence. L'expression des matrices  $O_s$ , est la même pour chaque espèce de nucléon et se déduit de la définition (3.15, 3.13) introduite pour écrire  $\hat{H}$  en termes d'une forme quadratique d'opérateurs à un corps.

Les observables d'intérêt pour le modèle en couches sont des opérateurs tensoriels irréductibles  $\hat{A}_{kq}$ . Dans un état ayant des nombres quantiques  $J$  et  $M$  bien définis, seules les

composantes  $q = 0$  ont des valeurs moyennes non nulles. Avec l'approche QMC que nous venons de décrire, aucune d'entre elles n'est assurées d'être exactes dans la limite  $\tau \rightarrow +\infty$  — à l'exception évidemment du carré  $\hat{J}^2$  du moment et de sa composante  $\hat{J}_z$  — en raison de l'approximation des chemins contraints. Au mieux, nous pourrions effectivement espérer accéder à la valeur moyenne  $\langle \hat{A}_{k0} \rangle_{\tilde{\Psi}_G^{JM}}$  en faisant appel à deux populations indépendantes de marcheurs pour reconstruire le bra  $\langle \hat{\Psi}_G^{JM} |$  et le ket  $|\tilde{\Psi}_G^{JM}\rangle$ . Comme nous l'avons précisé à la fin du premier chapitre, une telle démarche est contaminée par de très grandes fluctuations statistiques et n'est jamais mise en œuvre. De ce fait, Nous nous limiterons ici à la détermination des estimateurs mixtes (1.48) et extrapolés (1.49) avec un état d'essai logiquement fourni par l'approximation SEMF, soit

$$\langle \hat{A}_{k0} \rangle_{\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}, \tilde{\Psi}_G^{JM}}^{(\text{mix})} = \frac{\text{Re} \langle \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} | \hat{A}_{k0} | \tilde{\Psi}_G^{JM} \rangle}{\text{Re} \langle \Psi_{\text{SEMF}}^{JM} | \tilde{\Psi}_G^{JM} \rangle}, \quad (3.25)$$

$$\langle \hat{A}_{k0} \rangle_{\tilde{\Psi}_G^{JM}}^{(\text{ext})} = 2 \langle \hat{A}_{k0} \rangle_{\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}, \tilde{\Psi}_G^{JM}}^{(\text{mix})} - \langle \hat{A}_{k0} \rangle_{\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}}. \quad (3.26)$$

Dans le cadre du schéma QMC à dynamique guidée que nous utilisons, et compte tenu de la définition (3.21) de l'état « yrast » approché, l'estimateur mixte (3.25) ci-dessus se voit reconstitué *via* :

$$\langle \hat{A}_{k0} \rangle_{\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}, \tilde{\Psi}_G^{JM}}^{(\text{mix})} \stackrel{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \text{Re} \left( \sum_{K, K'} C_{K'}^{J*} C_K^J \langle \Phi | \hat{P}_{KM}^J \hat{A}_{k0} \hat{P}_{MK'}^J | \Phi_\tau \rangle / \langle \Psi_T^J | \Phi_\tau \rangle \right) \right]}{\mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \right]}. \quad (3.27)$$

Pour une observable scalaire, telle que les nombres d'occupation des couches ( $nlj$ ), le calcul QMC de cette expression est ainsi similaire à celui (3.22) que nous avons présenté pour l'énergie :

$$\langle \hat{A}_{00} \rangle_{\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}, \tilde{\Psi}_G^{JM}}^{(\text{mix})} \stackrel{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \text{Re} \langle \hat{A}_{00} \rangle_{\Psi_T^J, \Phi_\tau} \right]}{\mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \right]}. \quad (3.28)$$

Dans les autres cas, il n'est plus possible de commuter l'observable  $\hat{A}_{kq}$  avec l'opérateur de « passage »  $\hat{P}_{MK'}^J$  dans (3.27) et une double intégration sur les angles d'Euler se révèle *a priori* nécessaire. Ayant déjà rencontré une telle situation dans le cadre de l'approximation SEMF en 2.4, nous emprunterons la même démarche mais en cherchant cette fois à ce que les opérateurs de « passage »  $\hat{P}_{KK'}^J$  agissent seulement sur le bra  $|\Phi\rangle$ . La raison en est purement pratique : les orbitales des déterminants  $\hat{R}_\Omega |\Phi\rangle$  pourront de cette manière être stockées en mémoire, pour chaque jeu d'angles  $\Omega$  du réseau de points d'intégration, et être employées à tout instant durant la propagation en temps imaginaire. Dans ce but, recourons tout d'abord le comportement général des opérateurs tensoriels irréductibles par rotation :

$$\hat{A}_{k0} \hat{R}_\Omega = \sum_{q=-k}^k D_{0q}^{k*}(\Omega) \hat{R}_\Omega \hat{A}_{kq},$$

où  $D^k$  désigne la matrice  $D$  de Wigner pour le moment cinétique  $k$ . De plus, le théorème de réduction de ces matrices implique

$$D_{MK'}^{J*} D_{0q}^{k*} = \sum_I \sum_{M_1, M_2 = -I}^I \langle J, M, k, 0 | I, M_1 \rangle \langle J, K', k, q | I, M_2 \rangle D_{M_1 M_2}^{I*},$$

si bien que

$$\hat{A}_{k0} \hat{P}_{MK'}^J = \frac{2J+1}{2I+1} \sum_{\substack{q, I \\ M_1, M_2}} \langle J, M, k, 0 | I, M_1 \rangle \langle J, K', k, q | I, M_2 \rangle \hat{P}_{M_1 M_2}^I \hat{A}_{kq}.$$

Une fois cette expression multipliée à gauche par  $\hat{P}_{KM}^J$ , les sommes portant sur les indices  $I$  et  $M_1$  disparaissent en vertu de (2.35). D'autre part, le second coefficient de Clebsch-Gordan  $\langle J, K', k, q | I, M_2 \rangle$  apparaissant ci-dessus est non nul seulement pour des valeurs de  $q$  et  $M_2$  telles que  $K' + q = M_2$ . Finalement,

$$\hat{P}_{KM}^J \hat{A}_{k0} \hat{P}_{MK'}^J = \langle J, M, k, 0 | J, M \rangle \sum_{q=-k}^k \langle J, K', k, q | J, K' + q \rangle \hat{P}_{K, K'+q}^J \hat{A}_{kq} .$$

L'estimateur mixte (3.27) pour la valeur moyenne de la composante  $\hat{A}_{k0}$  dans l'état « yrast » approché  $|\tilde{\Psi}_G^{JM}\rangle$  prend ainsi la forme

$$\langle \hat{A}_{k0} \rangle_{\Psi_{\text{SEMF}}^{JM}, \tilde{\Psi}_G^{JM}}^{(\text{mix})} \stackrel{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \text{Re} \left( \langle \hat{A}_k^{JM} \rangle_{\Phi, \Phi_\tau} \frac{\langle \Phi | \Phi_\tau \rangle}{\langle \Psi_T^J | \Phi_\tau \rangle} \right) \right]}{\mathbb{E} [\tilde{\Pi}_\tau]} , \quad (3.29a)$$

où nous avons posé

$$\hat{A}_k^{JM} = \langle J, M, k, 0 | J, M \rangle \sum_{K, K', q} C_K^{J*} C_{K'}^J \langle J, K', k, q | J, K' + q \rangle \hat{P}_{K, K'+q}^J \hat{A}_{kq} . \quad (3.29b)$$

Pour conclure, précisons que les estimateurs locaux présents dans les relations (3.22, 3.23, 3.24, 3.28, 3.29), c'est-à-dire tous les termes faisant intervenir un opérateur et un marcheur, sont à nouveau aisément évalués grâce au théorème de Wick étendu aux éléments de matrice entre déterminants de Slater [36] et rapidement présenté au chapitre deux (au début de la section 2.2.2).

## 3.4 Mise en œuvre numérique

Les principaux points délicats de l'implémentation de la méthode QMC qui vient d'être exposée résident dans la résolution numérique des équations différentielles stochastiques (3.24), et dans la simulation de la loi de distribution des poids (3.23) des marcheurs. Nous détaillons dans cette section les algorithmes mis en œuvre pour y parvenir.

### 3.4.1 Discrétisation des équations différentielles stochastiques

Nous adoptons la méthode la plus généralement utilisée qui passe par une reformulation de la dynamique des orbitales reposant sur la décomposition de Hubbard-Stratonovich [49, 50]. Dans l'approche Monte-Carlo quantique standard à champs auxiliaires, le mouvement en temps imaginaire est discrétisé en  $N_{\Delta\tau}$  pas de temps  $\Delta\tau$  afin d'exprimer l'état propagé à l'instant final  $\tau_f$  comme

$$\exp(-\tau_f \hat{H}) |\Phi_0\rangle = \left[ \exp(-\Delta\tau \hat{H}) \right]^{N_{\Delta\tau}} |\Phi_0\rangle .$$

Pour  $\Delta\tau$  suffisamment petit, le propagateur  $\exp(-\Delta\tau \hat{H})$  peut se factoriser *via* l'approximation de Trotter-Suzuki [128, 129] du second ordre

$$\exp(-\Delta\tau \hat{H}) = \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2} \hat{T}\right) \exp\left(\Delta\tau \sum_s \omega_s \hat{O}_s^2\right) \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2} \hat{T}\right) + \mathcal{O}(\Delta\tau^2) . \quad (3.30)$$

La décomposition de Hubbard-Stratonovich permet alors de linéariser le terme quadratique, c'est-à-dire de réduire l'exponentielle d'un opérateur à deux corps en une intégrale d'exponentielles d'opérateurs à un corps suivant l'identité

$$\exp(x\hat{O}^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta e^{-\frac{1}{2}\eta^2} \exp(\eta\sqrt{2x}\hat{O}) .$$

Introduisons donc un vecteur  $\vec{\eta}$  constitué d'un ensemble de variables  $\eta_s$  appelées *champs auxiliaires* et distribuées selon une loi gaussienne  $\exp(-\eta_s^2/2)/\sqrt{2\pi}$ . Soit par ailleurs un propagateur stochastique  $\hat{U}(\vec{\eta})$  dépendant de ces champs

$$\hat{U}(\vec{\eta}) = \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{T}\right) \exp\left(\sum_s \sqrt{2\omega_s\Delta\tau} \eta_s \hat{O}_s\right) \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{T}\right) .$$

Les opérateurs  $\hat{T}$  et  $\{\hat{O}_s\}$  étant tous à un corps,  $\hat{U}$  transforme un déterminant de Slater  $|\Phi_\tau\rangle$  en un autre déterminant intervenant dans la reconstruction de l'état du temps  $\tau + \Delta\tau$  :

$$|\Phi_{\tau+\Delta\tau}\rangle = \hat{U}(\vec{\eta})|\Phi_\tau\rangle .$$

Par conséquent, l'état obtenu par propagation exacte de  $|\Phi_\tau\rangle$  peut se réinterpréter en termes de la valeur moyenne d'états de particules indépendantes  $|\Phi_{\tau+\Delta\tau}\rangle$ ,

$$\exp(-\Delta\tau\hat{H})|\Phi_\tau\rangle = \int d\vec{\eta} p(\vec{\eta}) \hat{U}(\vec{\eta})|\Phi_\tau\rangle = \mathbb{E}[|\Phi_{\tau+\Delta\tau}\rangle] . \quad (3.31)$$

où l'élément  $d\vec{\eta} = \prod_s d\eta_s$  et  $p(\vec{\eta}) = \prod_s \exp(-\eta_s^2/2)/\sqrt{2\pi}$ . Nous retrouvons finalement une version discrétisée, mais totalement équivalente, de l'équation (1.22). Il est en effet facile de vérifier que les orbitales des marcheurs sont ainsi soumises à la dynamique régie par les équations différentielles stochastiques (1.23) précédemment établies. Lorsque le pas de temps est suffisamment petit pour être considéré comme un élément  $d\tau$ , les grandeurs  $\Delta W_s$  tendent quant à eux vers des incréments infinitésimaux  $dW_s$  de processus de Wiener indépendants dans le formalisme d'Ito du calcul stochastique. Dans cette limite, les états individuels formant un marcheur à la date  $\tau + d\tau$  sont au premier ordre en  $d\tau$ ,

$$\begin{aligned} |\phi_{n,\tau+d\tau}\rangle &= \exp\left(-\frac{d\tau}{2}T\right) \exp\left(\sum_s \sqrt{2\omega_s}dW_s O_s\right) \exp\left(-\frac{d\tau}{2}T\right) |\phi_{n,\tau}\rangle \\ &= \left(\mathbb{1} - \frac{d\tau}{2}T\right) \left(\mathbb{1} + \sum_s \sqrt{2\omega_s}dW_s O_s + \frac{1}{2}\left[\sum_s \sqrt{2\omega_s}dW_s O_s\right]^2\right) \left(\mathbb{1} - \frac{d\tau}{2}T\right) |\phi_{n,\tau}\rangle \\ &= |\phi_{n,\tau}\rangle - d\tau\left(T - \sum_s \omega_s O_s^2\right) |\phi_{n,\tau}\rangle + \sum_s \sqrt{2\omega_s}dW_s O_s |\phi_{n,\tau}\rangle , \end{aligned}$$

soit exactement ceux découlant d'une variation selon les équations (1.23).

Cette approche s'étend immédiatement à la dynamique guidée (1.35) qui se distingue des considérations précédentes uniquement par une contribution déterministe supplémentaire, fonction de l'estimateur local  $\langle\hat{O}_s\rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau}$  avec l'état d'essai  $|\Psi_T\rangle$ . De cette manière, les marcheurs au temps  $\tau + \Delta\tau$  peuvent simplement être obtenus par application du propagateur linéarisé en  $\hat{O}_s$

$$\hat{U}(\vec{\eta}) = \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{T}\right) \exp\left(\sum_s \left[2\Delta\tau\omega_s \langle\hat{O}_s\rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} + \sqrt{2\omega_s\Delta\tau} \eta_s\right] \hat{O}_s\right) \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{T}\right) . \quad (3.32)$$

Dans le cadre du modèle en couches nucléaire, lorsque l'espace de valence considéré contient des orbitales  $nlj$  dont les moments cinétiques  $j$  sont tous différents, la matrice  $T$  s'avère diagonale et l'application du propagateur  $\exp(-\frac{\Delta\tau}{2}T)$  est alors triviale et exacte. Le terme lié

aux opérateurs  $\hat{O}_s$  est lui appliqué par un développement en série de l'exponentielle que nous avons choisi d'arrêter au cinquième ordre. Enfin, remarquons qu'afin d'optimiser ces produits matriciels à répétition, il est possible de tirer partie du fait qu'un grand nombre des éléments de  $T$  et des  $O_s$  sont nuls en faisant appel à une routine de multiplication dédiée aux matrices creuses.

### 3.4.2 Simulation de la distribution des marcheurs selon leur poids et estimation des observables

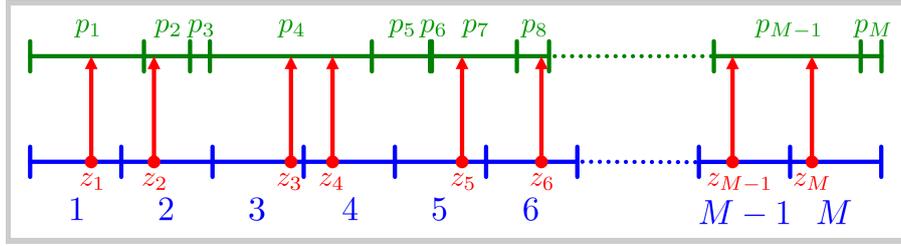
L'évaluation directe des estimateurs mixtes (3.22, 3.28, 3.29) d'observables est en général très peu efficace en raison de la croissance exponentielle des poids  $\tilde{\Pi}_\tau$  des marcheurs avec le temps imaginaire. Ce problème peut toutefois être aisément contourné en échantillonnant les réalisations  $|\Phi_\tau\rangle$  selon leur poids  $\tilde{\Pi}_\tau$ . Dans ce contexte, l'algorithme le plus couramment sollicité est celui de Metropolis-Hastings [130, 131]. Il repose sur la génération de deux trajectoires  $\{|\Phi_\tau\rangle, \tau = 0 \rightarrow \tau_f\}$  et  $\{|\Phi'_\tau\rangle, \tau = 0 \rightarrow \tau_f\}$  proches au travers de l'utilisation de champs auxiliaires  $\{\eta_s\}$  et  $\{\eta'_s\}$  légèrement différents à chaque pas du mouvement brownien. Par exemple, on peut choisir  $\eta'_s = \sqrt{1 - \xi^2}\eta_s + \xi\chi_s$  où  $\xi$  est un paramètre fixé pour optimiser la simulation et  $\chi_s$  une variable aléatoire normalement distribuée avec une moyenne nulle et une variance unité. Au temps final  $\tau_f$ , les poids  $\tilde{\Pi}_{\tau_f}$  et  $\tilde{\Pi}'_{\tau_f}$  des deux réalisations sont comparées et la nouvelle trajectoire  $\{|\Phi'_\tau\rangle\}$  est acceptée avec la probabilité  $\tilde{\Pi}'_{\tau_f}/\tilde{\Pi}_{\tau_f}$ . Habituellement,  $\xi$  est ajusté pour que le taux de rejet soit de l'ordre de 50 %. L'inconvénient d'un tel schéma Metropolis-Hastings se situe dans la nécessité de se donner une cible  $\tau_f$  en temps imaginaire si bien que seules les observables à cette date sont accessibles. Notons qu'une nouvelle version de l'algorithme a toutefois été récemment suggérée pour s'affranchir de cette restriction et donc pour reconstruire régulièrement les observables au cours d'une unique simulation [132].

Alternativement, l'échantillonnage selon les poids des trajectoires peut être réalisé au travers des méthodes de *reconfiguration stochastique* développées dans le cadre d'approches QMC basées sur les fonctions de Green. L'idée centrale est alors de cloner les marcheurs à poids élevé et de supprimer ceux à poids faible. Cette procédure est appliquée régulièrement au cours du mouvement, avant que la variance des poids ne devienne trop importante. Il en résulte de fait un nombre variable de marcheurs biaisant le calcul des valeurs moyennes. Néanmoins, une variante de cette méthode de reconfiguration a été proposée en physique de la matière condensée [133] pour éliminer le biais précédent en maintenant fixe au cours du temps imaginaire la taille de la population de marcheurs. Nous détaillons ici cet algorithme qui a été implémenté pour nos calcul Monte-Carlo de modèle en couches. Considérons une population formée de  $M$  marcheurs  $\{|\Phi^{(m)}\rangle\}$ , chacun associé à un poids  $\tilde{\Pi}^{(m)}$ ,  $m = 1 \rightarrow M$ . Au bout d'un temps que nous noterons  $\Delta\tau$ , une redistribution des marcheurs est réalisée. Elle génère une nouvelle population  $\{|\Phi^{(m')}\rangle\}$ ,  $m' = 1 \rightarrow M$ , construite en choisissant des marcheurs parmi la population originale avec une probabilité

$$p^{(m')} = \frac{\tilde{\Pi}^{(m')}}{\sum_{m=1}^M \tilde{\Pi}^{(m)}} , \quad (3.33)$$

tel qu'illustré par la figure 3.3. Pour cela, un nombre  $z_{m'} = (x_{m'} + m' - 1)/M$  de loi uniforme dans  $[(m' - 1)/M ; m'/M[$  est tout d'abord tiré pour chaque marcheur. Une table ( $m \leftrightarrow m'$ ) assignant un nouveau marcheur d'indice  $m'$  à chacun de ceux formant la population de départ est ensuite créée en appliquant la procédure suivante [134] :

- initialisations  $p_{\text{sum}} = p_1$  et  $m = 1$  ;
- pour chaque  $m' = 1 \rightarrow M$  :



**Figure 3.3** – Illustration du principe du schéma de reconfiguration stochastique à nombre de marcheurs  $M$  fixé. Le segment vert, découpé en parties de tailles  $p_m$ , représente la population des marcheurs avant application de l’algorithme. Les nouveaux marcheurs possèdent tous des poids identiques, le segment bleu les caractérisant est donc équitablement partitionné. Ils sont choisis parmi les marcheurs initiaux en tirant des nombres aléatoires uniformes  $z_{m'} \in [(m' - 1)/M; m'/M[$  qui permettent de générer une table (en rouge) établissant une correspondance entre les deux populations. Dans cet exemple, les marcheurs numérotés 3, 5, et  $M$  ne se retrouvent pas dans la nouvelle population en raison de la faible probabilité  $p_m$  qu’ils ont d’être sélectionnés, ni le marcheur 6 dont le poids est nul. À l’opposé, les marcheurs 4 et  $M - 1$  sont dupliqués.

- tant que  $z_{m'} < p_{\text{sum}}$  :
  - $k \leftarrow m + 1$ ,
  - $p_{\text{sum}} \leftarrow p_{\text{sum}} + p_m$ ,
- sauvegarde de  $m$  et  $m'$
- application de la correspondance ( $m \leftrightarrow m'$ ) à la population de marcheurs ;
- initialisation des poids  $\{\bar{\Pi}^{(m')}\}$  des nouveaux marcheurs à l’unité.

De cette façon, les marcheurs conduisant au problème de phase se trouvent automatiquement filtrés à chaque application de l’algorithme puisque leur poids est strictement nul. De plus, si tous les états originaux sont équiprobables, la population est inchangée. Il est par ailleurs important de remarquer que le schéma de reconfiguration ne modifie en rien les moyennes statistiques dès lors que la taille  $M$  de la population est suffisamment grande pour que l’échantillonnage (3.33) de la loi de probabilité des poids soit significatif. Néanmoins, des corrélations statistiques entre les marcheurs de la nouvelle population sont générées suite au processus de duplication/rejet. Leur prise en compte est nécessaire si les erreurs statistiques sur les observables sont évaluées à partir d’un unique ensemble de marcheurs. Nous avons privilégié une autre démarche consistant à réaliser plusieurs simulations indépendantes avec chacune un même nombre  $M$  de déterminants de Slater. L’estimateur mixte d’une observable  $\hat{A}$ , noté ici simplement  $\langle \hat{A} \rangle^{(\text{mix})}$  par souci de légèreté, se déduit alors de ses valeurs  $\langle \hat{A} \rangle_p^{(\text{mix})}$  reconstruites selon (3.22, 3.28, 3.29) à l’aide des marcheurs de chacune des populations  $p = 1 \rightarrow \mathcal{P}$  simulées suivant

$$\langle \hat{A} \rangle^{(\text{mix})} = \frac{1}{\mathcal{P}} \sum_{p=1}^{\mathcal{P}} \langle \hat{A} \rangle_p^{(\text{mix})}. \quad (3.34)$$

L’erreur statistique associée s’obtient en conséquence du théorème de la limite centrale comme

$$\sigma_{\langle \hat{A} \rangle^{(\text{mix})}} = \sqrt{\frac{1}{\mathcal{P} - 1} \left[ \frac{1}{\mathcal{P}} \sum_{p=1}^{\mathcal{P}} \left( \langle \hat{A} \rangle_p^{(\text{mix})} \right)^2 - \left( \frac{1}{\mathcal{P}} \sum_{p=1}^{\mathcal{P}} \langle \hat{A} \rangle_p^{(\text{mix})} \right)^2 \right]}. \quad (3.35)$$

Dans la partie suivante, nous montrons l’influence des différents paramètres introduits pour mettre en pratique la méthode QMC proposée.

### 3.4.3 Influence des différents paramètres de simulation

Résumons tout d'abord l'algorithme sous-jacent à notre approche Monte-Carlo quantique à chemins contraints. Après avoir choisi un nombre de marcheurs  $M$  par population, un pas de temps imaginaire  $\Delta\tau$ , une période de reconfiguration  $\Delta\tau_r$  et un temps imaginaire final  $\tau_f$  tous deux proportionnels à  $\Delta\tau$ , nous procédons comme suit :

- Partant du déterminant de Slater  $|\Phi\rangle$  de la solution SEMF, les orbitales  $\{|\phi_{n,\Omega}\rangle\}$  des déterminants  $|\Phi_\Omega\rangle = \hat{R}_\Omega|\Phi\rangle$  transformés par rotation sont construites puis stockées en mémoire pour chaque angle d'Euler, en suivant la même méthode de discrétisation qu'à la section 2.3 et résumée par l'équation (2.38).

**Propagation :** Pour chaque population

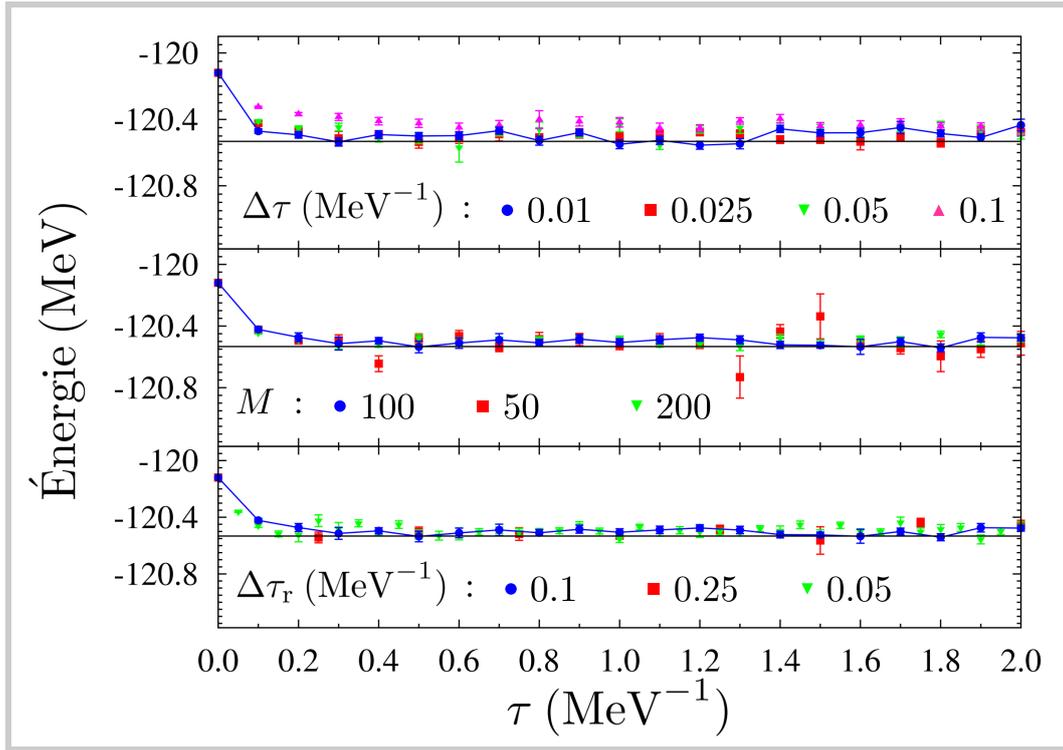
- Les états individuels des  $M$  marcheurs sont initialisés par ceux formant le déterminant  $|\Phi\rangle$  de l'approximation SEMF, soit  $|\phi_{n,\tau=0}^{(m)}\rangle = |\phi_n\rangle$ , et leurs poids à l'unité.
- Propagation d'un pas de temps ( $\tau \rightarrow \tau + \Delta\tau$ ). Pour chaque marcheur :
  - Les estimateurs locaux  $\langle \hat{O}_s \rangle_{\Psi_{T,\Phi_\tau}^J}$  des opérateurs  $\hat{O}_s$  ainsi que l'énergie locale  $\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_{T,\Phi_\tau}^J}$  sont calculées pour le marcheur  $|\Phi_\tau^{(m)}\rangle$  du temps  $\tau$  ;
  - Autant de bruits blancs  $\{\eta_s\}$  indépendants (nombres aléatoires de loi gaussienne centrée réduite) que d'opérateur  $\hat{O}_s$  sont générés en faisant appel à l'algorithme de Box-Muller [135] ;
  - Les orbitales sont propagées par application de l'opérateur d'évolution stochastique  $\hat{U}(\vec{\eta})$  (équation (3.32)) pour obtenir le marcheur  $|\Phi_{\tau+\Delta\tau}^{(m)}\rangle = \hat{U}(\vec{\eta})|\Phi_\tau^{(m)}\rangle$  ;
  - La variation de phase  $\Delta\theta$  du recouvrement entre le marcheur et l'état d'essai durant le pas  $\Delta\tau$  est évaluée ;
  - Si  $|\Delta\theta| < \pi/2$  le poids du marcheur est multiplié par  $\exp(-\Delta\tau \text{Re}\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_{T,\Phi_\tau}^J}) \times \cos(\Delta\theta)$ , dans le cas contraire il est mis à zéro ;
  - L'estimateur mixte *au temps imaginaire courant*  $\tau + \Delta\tau$  de l'énergie pour la population est mis à jour selon (3.22) ;
  - Si le temps imaginaire final  $\tau_f$  est atteint, un calcul similaire est effectué pour les observables souhaitées au travers des expressions (3.28, 3.29) ;
- Si le temps imaginaire atteint est un multiple de  $\Delta\tau_r$  l'algorithme de reconfiguration stochastique est appliqué.

**Analyse :**

- Les valeurs moyennes finales et les erreurs statistiques associées sont obtenues en prenant en compte l'ensemble des populations respectivement suivant les formules (3.34) et (3.35).
- Des estimateurs extrapolés peuvent alors être calculés.

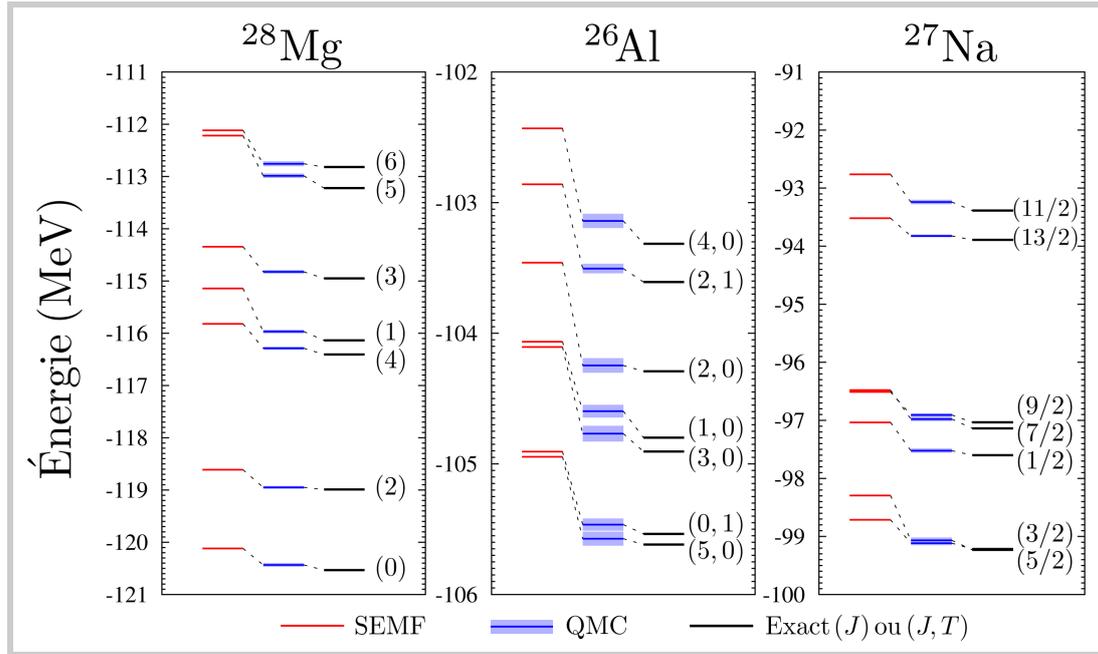
Cette implémentation numérique offre de plus la possibilité de réduire les erreurs statistiques en ajoutant à volonté les résultats de nouvelles populations à ceux déjà acquis, et ce sans avoir à recommencer complètement un calcul avec un nombre plus élevé de marcheurs. Précisons enfin que le temps imaginaire  $\tau_f$  final doit être choisi assez grand pour que la population globale représente effectivement un échantillonnage de l'état fondamental du secteur de symétrie considéré.

Dans le but d'apprécier la sensibilité des résultats vis-à-vis des différents paramètres, nous avons confronté les énergies déterminées par la procédure décrite ci-dessus pour plusieurs valeurs des pas de temps  $\Delta\tau$ ,  $\Delta\tau_r$  et de la taille  $M$  des populations, à celle issue de la diagonali-



**Figure 3.4** – Étude de l'influence des différents paramètres des simulations QMC pour l'état fondamental  $J = 0$  du noyau  $^{28}\text{Mg}$  de la couche  $sd$  avec l'interaction USD. Les énergies en fonction du temps imaginaire sont représentées pour différents pas de temps  $\Delta\tau$  (en haut), différentes tailles de population  $M$  (au milieu), et différents pas de temps de reconfiguration  $\Delta\tau_r$  (en bas), obtenues en moyennant les résultats de  $\mathcal{P} = 50$  populations.

sation exacte du hamiltonien par le code ANTOINE [80–82], pour l'état fondamental ( $J = 0$ ) du noyau  $^{28}\text{Mg}$  de la couche  $sd$  avec l'interaction effective USD [74]. Les résultats de ces tests ont été obtenus en utilisant  $\mathcal{P} = 50$  populations et sont regroupés sur la figure 3.4. Nous notons tout d'abord une très rapide convergence vers l'énergie « yrast » qui illustre de nouveau la qualité de l'approximation SEMF utilisée pour initier le mouvement brownien. En outre, le problème de signe/phase apparaît bien sous contrôle puisqu'aucune explosion des fluctuations statistiques n'est constatée au cours de l'évolution en temps imaginaire. Le panneau supérieur montre que pour un pas de temps de  $0.1 \text{ MeV}^{-1}$ , une erreur systématique commence à émerger. Elle s'explique par l'approximation de Trotter-Suzuki (équation (3.30)) utilisée dans le schéma de discrétisation des équations différentielles stochastiques et dont la validité se limite au second ordre en  $\Delta\tau$ . Concernant l'influence de la taille de la population, les énergies pour  $M = 100$  et  $M = 200$  marcheurs sont en accord aux erreurs statistiques près, tandis qu'une légère déviation est observée pour  $M = 50$ . Dans le cas d'un nombre  $M$  de marcheurs trop faible, l'échantillonnage (3.33) de la distribution des poids est en effet trop grossier et induit un biais. Enfin, sur le panneau inférieur, nous constatons que la variation du pas de temps de reconfiguration n'impacte pas vraiment les résultats. Remarquons toutefois que les fluctuations statistiques sont plus importantes avec  $\Delta\tau_r = 0.25 \text{ MeV}^{-1}$  en conséquence d'une plus grande dispersion des poids des marcheurs dont la croissance est exponentielle avec le temps imaginaire. Au regard de ces observations, nous utiliserons par la suite systématiquement le même ensemble de paramètres, à savoir un pas de temps imaginaire  $\Delta\tau = 0.01 \text{ MeV}^{-1}$ , une période de reconfiguration  $\Delta\tau_r = 0.1 \text{ MeV}^{-1}$ , et des populations contenant  $M = 100$  marcheurs. En outre, tous les résultats présentés seront obtenus en moyennant entre  $\mathcal{P} = 30$  et  $\mathcal{P} = 50$  populations.



**Figure 3.5** – Spectres « yrast » des noyaux  $^{28}\text{Mg}$ ,  $^{26}\text{Al}$  et  $^{27}\text{Na}$  de la couche *sd* avec l'interaction USD. En noir à droite et en rouge à gauche sont respectivement reportés les niveaux d'énergie exacts provenant du code ANTOINE et ceux obtenus par la méthode SEMF. Les résultats QMC sont situés au centre en bleu, la zone plus claire autour de chaque niveau représentant les erreurs statistiques. Les nombres entre parenthèses correspondent au spin  $J$  ou au couple spin et isospin  $(J, T)$  pour le  $^{26}\text{Al}$ .

## 3.5 Premiers résultats dans les couches *sd* et *fp*

Nous nous focaliserons dans un premier temps sur les trois noyaux de la couche *sd* précédemment considérés, le noyau pair-pair  $^{28}\text{Mg}$ , le noyau  $N = Z$  impair-impair  $^{26}\text{Al}$ , et le noyau impair  $^{27}\text{Na}$ . La figure 3.5 donne les spectres « yrast » obtenus pour l'interaction effective réaliste USD, par l'approximation SEMF (pour rappel), par la méthode QMC à chemins contraints, et par diagonalisation *via* le code ANTOINE. Concernant les états  $T = 1$  du  $^{26}\text{Al}$ , nous avons une fois encore fait appel à l'invariance de charge de l'interaction en effectuant les calculs pour son noyau isobarique analogue  $^{26}\text{Mg}$ . Les énergies QMC sont de nouveau associées à des erreurs statistiques contrôlées quel que soit le noyau, contrairement à l'approche traditionnelle SMMC (voir la figure 3.1). Ces résultats mettent finalement en exergue que la reformulation QMC à chemins contraints conduit à une approximation tout-à-fait excellente de la spectroscopie des trois noyaux en question, la différence maximale entre les énergies exactes et celles déterminées se situant aux alentours de 0.2 MeV, soit 0.003 % d'erreur relative. Une telle précision est d'ailleurs particulièrement remarquable concernant le noyau impair  $^{27}\text{Na}$ . Rappelons en effet que pour de tels noyaux la méthode SMMC traditionnelle ne peut échapper au problème de phase quand bien même l'interaction résiduelle satisfait aux critères de Lang (voir section 3.2).

Les observables auxquelles nous nous sommes intéressés dans nos calculs QMC sont les mêmes que pour l'approche variationnelle de champ moyen enchevêtré par les symétries à la section 2.4 :

- les nombres d'occupation de neutrons ( $m_t = 1/2$ ) et de protons ( $m_t = -1/2$ ) des couches  $nlj$

$$N_{\Gamma m_t} = \sum_{m=-j}^j \langle \hat{c}_{\Gamma m m_t}^\dagger \hat{c}_{\Gamma m m_t} \rangle ;$$

- le moment quadrupolaire électrique

$$Q_2(J) = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \langle \Psi_G^{JM=J} | \hat{A}_{20} | \Psi_G^{JM=J} \rangle \quad \text{avec} \quad \hat{A}_{2q} = \sum_{n=1}^{A_v} e_n^{\text{eff}} \hat{r}_n^2 Y_{2q}(\hat{r}_n) ;$$

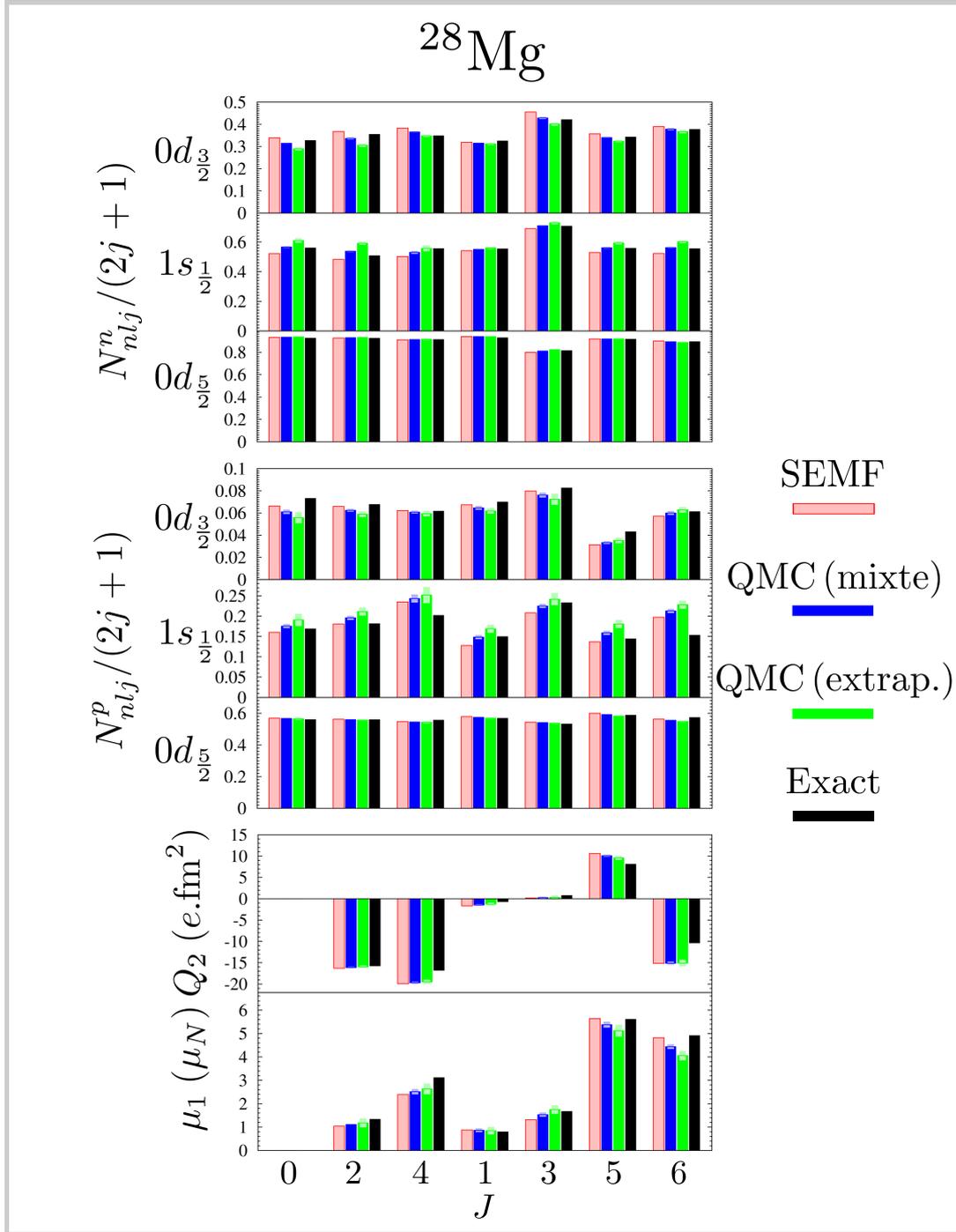
- le moment dipolaire magnétique

$$\mu_1(J) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle \Psi_G^{JM=J} | \hat{A}_{10} | \Psi_G^{JM=J} \rangle \quad \text{avec} \quad \hat{A}_{1q} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum_{n=1}^{A_v} (g_n^l \hat{l}_q + g_n^s \hat{s}_q) \mu_N .$$

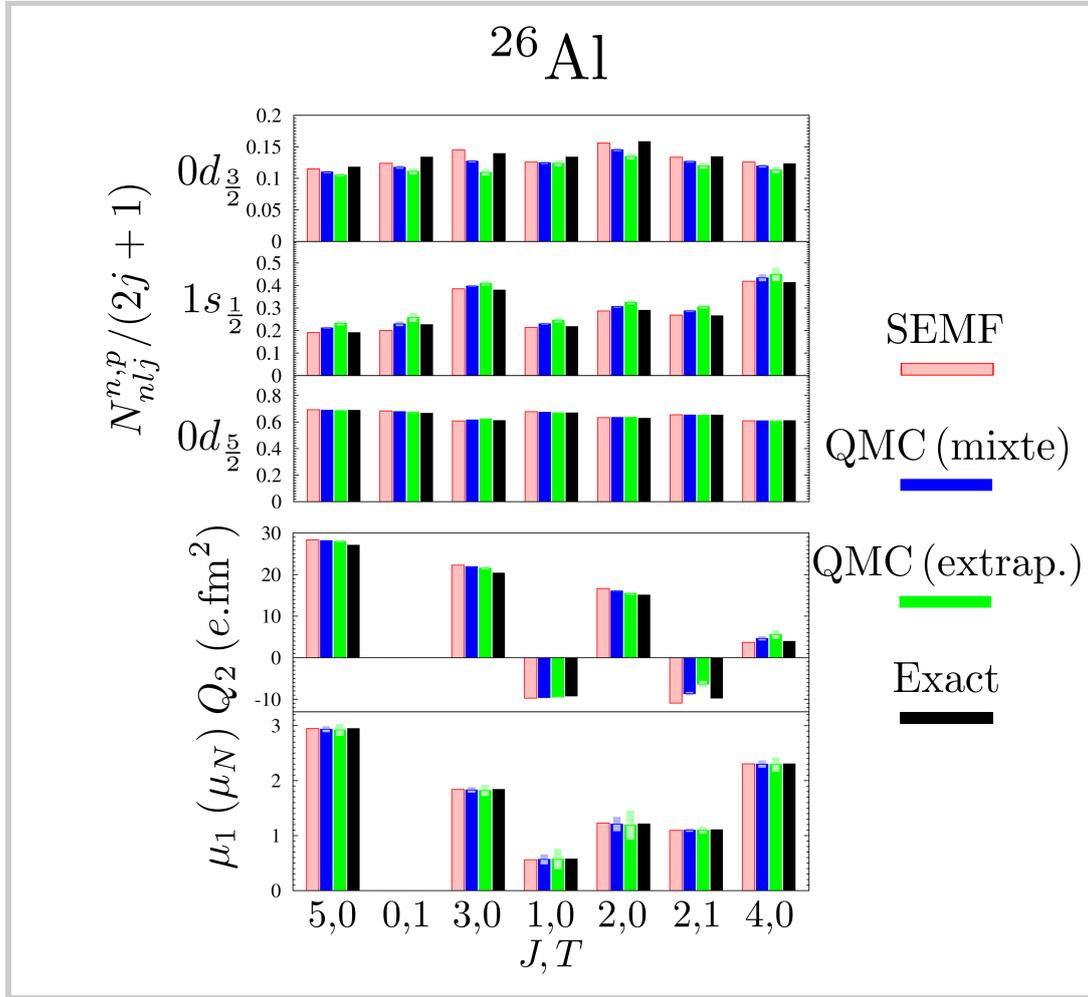
Dans tous les cas considérés, l'isospin carré moyen se révèle exact à  $10^{-7}$  près environ. Par conséquent, pour les noyaux  $N = Z$ , les estimateurs des valeurs moyennes d'un opérateur isovectoriel dans un état  $T = 1$  seront déterminés à partir de ceux pour son isobarique analogue, selon la méthode décrite à la section 2.4.

Pour les mêmes états des trois noyaux  $^{28}\text{Mg}$ ,  $^{26}\text{Al}$ , et  $^{27}\text{Na}$  que dans les spectres 3.5, les estimateurs mixtes (3.25) et extrapolés (3.26) de ces observables sont reportés sur les figures 3.6, 3.7 et 3.8. Les résultats obtenus sont d'assez bonne qualité, mais se montrent tout de même décevants. Aucune amélioration significative de l'approche variationnelle SEMF n'est concrètement constatée à l'issue de la propagation QMC pour les observables ne commutant pas avec le hamiltonien (alors qu'à l'opposé l'isospin carré moyen est exact). L'utilisation des estimateurs mixtes et extrapolés pour approximer leur valeur moyenne  $\langle \hat{A} \rangle_{\tilde{\Psi}_G^{JM}}$  s'avère donc visiblement insuffisante. En conséquence, la reconstruction de l'expression exacte  $\langle \hat{A} \rangle_{\tilde{\Psi}_G^{JM}} = \langle \tilde{\Psi}_G^{JM} | \hat{A} | \tilde{\Psi}_G^{JM} \rangle$  au travers d'une évolution en temps imaginaire à la fois du ket SEMF et du bra devra être envisagée à l'avenir.

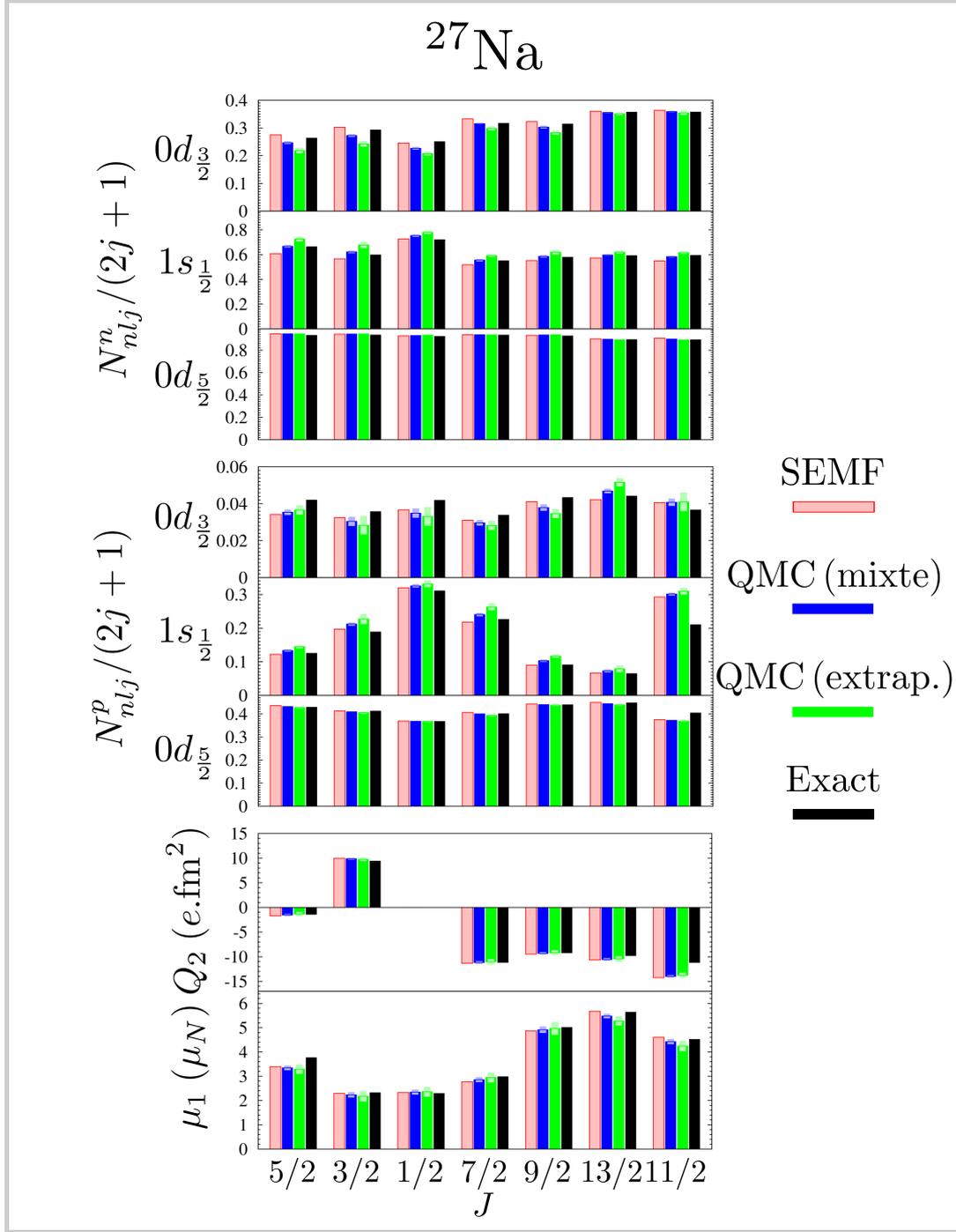
Nous avons finalement considéré le noyaux de Nickel 56 de la couche  $fp$  avec l'interaction GXPF1A [75, 76], noyau pour lequel la diagonalisation de la matrice hamiltonienne par le code ANTOINE nous est inaccessible au laboratoire en raison de la dimension rédhibitoire de l'espace des états. Les énergies exactes des trois premiers états indiquées sur la figure 3.9 ont été extraites de la référence [136]. Pour ce noyau qui présente en même temps le plus grand espace de valence et le plus grand nombre de nucléons traités, les énergies de liaisons obtenus par le schéma QMC à chemins contraints s'accordent toujours remarquablement avec les valeurs exactes. L'écart relatif entre les deux spectres tout comme les erreurs statistiques sont effectivement du même ordre que pour les noyaux de la couche  $sd$  précédents. Notons que la qualité avec laquelle les observables autres que l'énergie sont reconstruites ne peut être appréciée étant donné que la référence [136] ne contient pas leurs valeurs exactes.



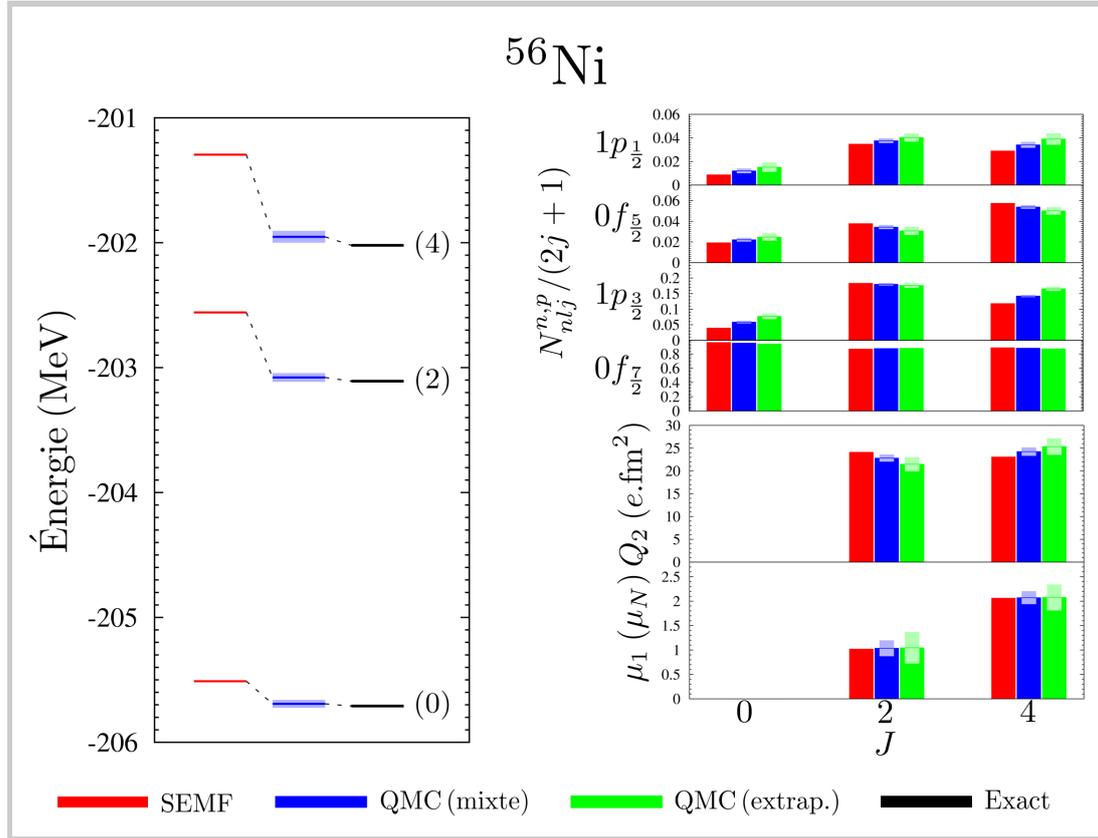
**Figure 3.6** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{28}\text{Mg}$  de la couche *sd*. Au temps imaginaire  $\tau_f = 2 \text{ MeV}^{-1}$  sont indiqués respectivement en bleu et vert les estimateurs mixte et extrapolé, les zones plus claires à l’extrémité de chaque barre représentant les erreurs statistiques. Sont également données les valeurs exactes issues du code ANTOINE et celles obtenues à l’approximation variationnelle SEMF en noir et rouge à titre comparatif. Le panneau supérieur contient les nombres d’occupation normalisés à  $2j + 1$  pour les neutrons et celui du centre pour les protons. Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les moments multipolaires, reportés sur la partie inférieure de la figure, sont les mêmes que précédemment à savoir :  $e^{\text{eff}} = 0.49e$ ,  $g^l = 0.036$ ,  $g^s = -3.875$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.29e$ ,  $g^l = 1.03$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons.



**Figure 3.7** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{26}\text{Al}$  de la couche  $sd$ . Au temps imaginaire  $\tau_f = 2 \text{ MeV}^{-1}$  sont indiqués respectivement en bleu et vert les estimateurs mixte et extrapolé, les zones plus claires à l'extrémité de chaque barre représentant les erreurs statistiques. Sont également données les valeurs exactes issues du code ANTOINE et celles obtenues à l'approximation variationnelle SEMF en noir et rouge à titre comparatif. Le panneau supérieur contient les nombres d'occupation normalisés à  $2j + 1$  (qui sont égaux pour les neutrons et les protons). Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les moments multipolaires, reportés sur la partie inférieure de la figure, sont les mêmes que précédemment à savoir :  $e^{\text{eff}} = 0.49e$ ,  $g^l = 0.036$ ,  $g^s = -3.875$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.29e$ ,  $g^l = 1.03$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons.



**Figure 3.8** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{27}\text{Na}$  de la couche *sd*. Au temps imaginaire  $\tau_f = 2 \text{ MeV}^{-1}$  sont indiqués respectivement en bleu et vert les estimateurs mixte et extrapolé, les zones plus claires à l'extrémité de chaque barre représentant les erreurs statistiques. Sont également données les valeurs exactes issues du code ANTOINE et celles obtenues à l'approximation variationnelle SEMF en noir et rouge à titre comparatif. Le panneau supérieur contient les nombres d'occupation normalisés à  $2j + 1$  pour les neutrons et celui du centre pour les protons. Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les moments multipolaires, reportés sur la partie inférieure de la figure, sont les mêmes que précédemment à savoir :  $e^{\text{eff}} = 0.49e$ ,  $g^l = 0.036$ ,  $g^s = -3.875$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.29e$ ,  $g^l = 1.03$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons.



**Figure 3.9** – Compilation des différentes observables considérées pour le noyau  $^{56}\text{Ni}$  de la couche  $fp$ . Au temps imaginaire  $\tau_f = 1 \text{ MeV}^{-1}$  sont indiqués respectivement en bleu et vert les estimateurs mixte et extrapolé, les zones plus claires représentant les erreurs statistiques. Sont également données les valeurs exactes (pour l'énergie) issues de la référence [136] et celles obtenues à l'approximation variationnelle SEMF en noir et rouge à titre comparatif. Le panneau supérieur droit contient les nombres d'occupation normalisés à  $2j+1$  (qui sont égaux pour les neutrons et les protons). Les charges électriques effectives et facteurs- $g$  utilisés pour les moments multipolaires, reportés sur la partie inférieure droite de la figure, sont les mêmes que précédemment à savoir :  $e^{\text{eff}} = 0.5e$ ,  $g^l = 0$ ,  $g^s = -3.826$  pour les neutrons, et  $e^{\text{eff}} = 1.5e$ ,  $g^l = 1$ ,  $g^s = 5.586$  pour les protons.



---

---

# CHAPITRE 4

---

---

## Ouverture vers les systèmes électroniques fortement corrélés

**O**UTRE la structure nucléaire, nous abordons dans ce mémoire le traitement stochastique des systèmes d'électrons sur réseau décrits par le *hamiltonien de Hubbard*. Ce modèle, supposé fournir une description minimale des *cuprates* supraconducteurs, offre également un cadre de référence pour tester la performance de nouvelles approches QMC dans la mesure où les méthodes conventionnelles à champs auxiliaires y sont en général mises en échec par un sévère problème de signe.

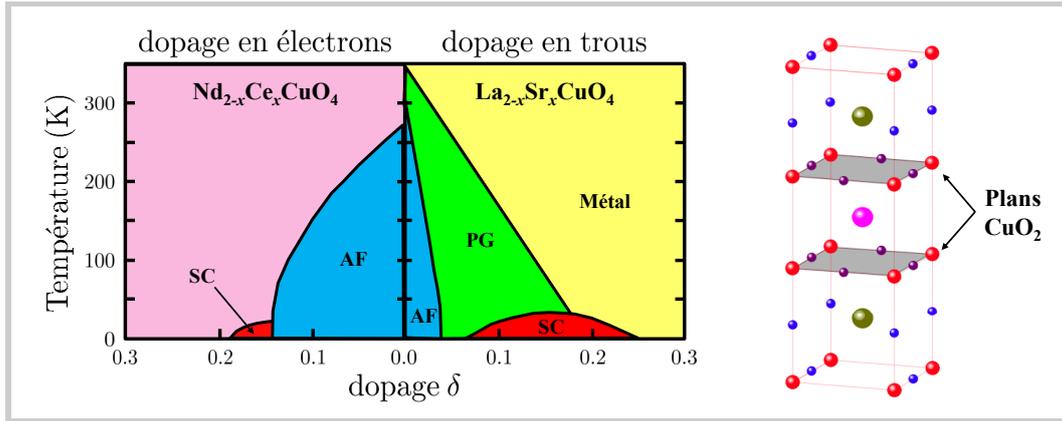
Nous nous concentrerons ici sur des échantillonnages récemment proposés qui garantissent des poids positifs pour chaque réalisation quels que soient le dopage du réseau et le couplage sur site entre les électrons. Nous montrerons que ces schémas s'avèrent en réalité sous-tendus par un mouvement brownien à dynamique guidée similaire à celui étudié tout au long du mémoire. Les erreurs systématiques constatées pour de petits « clusters », où une diagonalisation exacte du hamiltonien est possible, seront interprétées comme une conséquence d'une variance infinie de l'erreur sur l'état exact à  $N$ -corps.

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Le modèle de Hubbard</b>	<b>86</b>
<b>4.2</b>	<b>Limitation des traitements QMC à champs auxiliaires</b>	<b>88</b>
<b>4.3</b>	<b>Approches QMC exemptes de problème de signe</b>	<b>90</b>
4.3.1	Le schéma à dynamique guidée	90
4.3.2	Le schéma de champ moyen stochastique à poids positifs	91
4.3.3	Le schéma QMC « gaussien »	94
4.3.4	Mise en œuvre, résultats, et discussion	97

---



**Figure 4.1** – Diagramme de phase typique (à gauche) et structure cristalline schématisée (à droite) des matériaux supraconducteurs à haute température critique. Les acronymes AF, SC, et PG signifient respectivement phase antiferromagnétique, supraconductrice, et de pseudo-gap.

## 4.1 Le modèle de Hubbard

La cohésion de la majorité des solides est assurée par des électrons délocalisés sur l'ensemble du réseau cristallin. Leurs propriétés peuvent alors être globalement expliquées au moyen de modèles simples mettant en jeu des fermions sans interaction comme la théorie des bandes, celle des liquides de Fermi, ou les méthodes de fonctionnelles de la densité (DFT). Depuis les années 1960, l'émergence de nouveaux matériaux aux propriétés non conventionnelles met cependant un tel schéma en défaut. Par exemple, certains oxydes de métaux de transition comme les *cuprates* de terres rares, exhibent une multitude de phases exotiques qui pour la plupart échappent complètement aux approches de type DFT (voir la figure 4.1). En fonction de la stœchiométrie de ces composés et de la température sont ainsi observées :

- des phases isolantes antiferromagnétiques ;
- des ordres de spin et de charge incommensurables ;
- un comportement supraconducteur apparaissant à « haute » température critique avec un paramètre d'ordre de symétrie  $d_{x^2-y^2}$  ;
- ou encore une phase toujours assez mystérieuse dite de « pseudo-gap », non supraconductrice bien que la densité d'états électroniques soit considérablement affaiblie.

Il est aujourd'hui communément admis que ces états quantiques non conventionnels naissent de fortes corrélations entre les électrons, mais leurs compréhensions et celle de leur compétition à basse énergie demeurent toutefois un défi majeur de la physique théorique de la matière condensée.

Introduits presque simultanément par plusieurs auteurs en 1963 dans le but d'étudier les effets de la compétition entre la délocalisation et les corrélations des électrons [137–139], *le modèle de Hubbard* constitue une approche effective minimale pour décrire des électrons en interaction sur un réseau. En géométrie bidimensionnelle, il a été proposée par P. Anderson pour capturer les propriétés des cuprates [23]. Leur structure, schématiquement représentée sur la figure 4.1, est en effet arrangée en couches planaires de CuO<sub>2</sub> empilées les unes sur les autres, au sein desquelles les atomes de cuivre forment un réseau carré et les atomes d'oxygène se situent aux centres des paires d'atomes Cu les plus rapprochés. Les éléments restants, dont l'oxygène excédentaire, occupent les espaces séparant les plans et agissent comme des

réservoirs de charges en fournissant des porteurs, généralement des trous, dans les couches CuO<sub>2</sub>.

Dans le langage de la seconde quantification, le hamiltonien de Hubbard est défini par

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -t \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle, \sigma} \hat{c}_{\vec{r}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{r}'\sigma} + U \sum_{\vec{r}} \hat{n}_{\vec{r}\uparrow} \hat{n}_{\vec{r}\downarrow}, \quad (4.1)$$

$\hat{c}_{\vec{r}\sigma}^\dagger$ ,  $\hat{c}_{\vec{r}\sigma}$ , et  $\hat{n}_{\vec{r}\sigma} = \hat{c}_{\vec{r}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{r}\sigma}$  représentant respectivement ici les opérateurs de création, d'annihilation, et nombre d'électrons au site  $\vec{r}$  avec le spin  $\sigma \in \{\uparrow; \downarrow\}$ . L'énergie cinétique  $\hat{T}$  se résume à une contribution de sauts entre sites plus proches voisins  $\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle$ , d'intensité  $t$  (aussi appelé intégrale de saut). Cette limitation ne se justifie qu'à l'approximation des liaisons fortes où seules les orbitales de Wannier associées à des sites très proches possèdent un recouvrement non négligeable. Il est néanmoins courant de tenir compte de sauts entre seconds plus proches voisins avec une intensité  $t'$ . Il est par ailleurs aisé de montrer que la partie cinétique du hamiltonien tend à délocaliser les électrons sur l'ensemble du cristal. Prenons l'exemple d'une cellule d'un réseau de maille carrée comprenant  $L = L_x \times L_y$  sites avec des conditions aux limites périodiques. Les états individuels d'ondes planes sont ainsi définis comme

$$\hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{c}_{\vec{r}\sigma}^\dagger, \quad (4.2)$$

où les composantes du vecteur d'onde  $\vec{k}$  sont discrétisées à l'intérieur de la première zone de Brillouin  $[-\pi; \pi]^2$  selon  $k_\alpha = 2\pi n_\alpha / L_\alpha$  avec  $n_\alpha$  entier et  $\alpha = x, y$ . En inversant la transformée de Fourier discrète (4.2), le terme de saut  $\hat{T}$  des électrons se met immédiatement sous la forme  $\hat{T} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma}$  avec la relation de dispersion  $\varepsilon_{\vec{k}} = -2t [\cos(k_x) + \cos(k_y)]$ . Ses vecteurs propres sont donc des déterminants de Slater construits à partir d'ondes planes et le cristal se trouve dans un état conducteur. D'autre part, le terme d'interaction à deux corps  $\hat{V}$  du hamiltonien (4.1) modélise une répulsion coulombienne ( $U > 0$ ) entre les électrons fortement écrantée par ceux des couches internes des atomes constituant le réseau, et par conséquent réduite à sa composante purement locale. Dans la limite d'un couplage faible  $U \ll t$ , les propriétés du système sont correctement reproduites par la théorie des liquides de Fermi. Lorsqu'à l'inverse  $U \gg t$ , l'état énergétiquement favorisé à mi-remplissage  $N = L/2$  correspond à un isolant de Mott [140] avec un électron par site. Dans cette limite où l'énergie cinétique ne joue qu'un rôle perturbatif, le hamiltonien de Hubbard (4.1) devient équivalent à celui de Heisenberg avec une interaction d'échange antiferromagnétique entre les spins des électrons des sites plus proches voisins associée à la constante de couplage  $J = 4t^2/U$  [141].

En dépit de sa simplicité, le modèle de Hubbard n'est exactement soluble qu'à une dimension, en passant par l'*ansatz* de Bethe [142]. Numériquement, la diagonalisation du hamiltonien fait face à une croissance en  $4^L$  de la dimension de l'espace et dépasse donc déjà les moyens actuels pour une vingtaine de sites. D'un autre côté, un traitement perturbatif dans la région du diagramme de phase où est attendu un état supraconducteur est tout aussi inenvisageable car  $U \gg t$ . En conséquence, 25 années après la proposition d'Anderson, la forme exacte du diagramme de phase du modèle de Hubbard à deux dimensions demeure une question vivement débattue. Par exemple, on ne sait toujours pas s'il supporte ou non un état fondamental exhibant des corrélations d'appariement et/ou des inhomogénéités périodiques de charges. De fait, un nombre important d'approximations à  $N$ -corps ont été développées dans l'espoir d'apporter des réponses à ces interrogations, comme par exemple l'approche de champ moyen dynamique [143, 144] et celle des bosons esclaves [144, 145]. Citons également les nombreuses approches variationnelles, qui se basent traditionnellement sur l'application du projecteur de Gutzwiller, pour supprimer au moins partiellement la double occupation des sites, sur un déterminant de Slater ou une fonction d'onde de type BCS [144, 146–150]. En général, ces approximations reposent néanmoins sur des paramètres d'ordre supraconducteur, d'onde de densité de

charge, ou magnétique, fixés par avance. Leurs conclusions, notamment sur l'existence d'un état fondamental non conventionnel, s'avèrent de plus souvent en contradiction entre elles et avec les simulations QMC qui s'affranchissent *a priori* d'un tel d'arbitraire mais qui souffrent de sévères problèmes de signe. Notons enfin que, comme nous l'avons déjà indiqué, la méthode Hartree-Fock « enchevêtrée » par les symétries a très récemment été utilisée pour extraire les fonctions de corrélations de spin, de charge, et d'appariement, sans aucune hypothèse préalable sur la structure de la fonction d'onde [63]. Pour de petits « clusters », elle se révèle en excellent accord avec les solutions exactes disponibles. Pour de larges cellules rectangulaires dopées en trous, elle a permis de mettre en exergue l'émergence de corrélations d'appariement fragmentées en plusieurs modes dont celui attendu en onde  $d_{x^2-y^2}$ . Ces corrélations s'accompagnent en outre du développement d'inhomogénéités de charge, les trous se répartissant périodiquement sous forme de rayures sur un fond antiferromagnétique. De telles « *stripes* » ont été observées expérimentalement dans les cuprates [151], mais leur rôle dans la supraconductivité non conventionnelle reste un sujet controversé.

En conclusion, même s'il constitue une description minimaliste des cuprates de terres rares, le modèle de Hubbard cache encore aujourd'hui une physique très riche susceptible de mener à une compréhension microscopique des propriétés de ces matériaux. Dans ce travail, nous n'affichons pas la prétention d'apporter des éléments de réponse aux questions en suspens. Nous profiterons simplement du cadre offert par le modèle de Hubbard pour discuter des méthodes Monte-Carlo quantiques développées dans ce travail.

## 4.2 Limitation des traitements QMC à champs auxiliaires

Commençons par mettre le hamiltonien de Hubbard sous une forme quadratique  $\hat{H} = \hat{T} - \sum_s \omega_s \hat{O}_s^2$  propice à l'implémentation des méthodes QMC. Contrairement au cas du modèle en couches nucléaire, cette étape est ici immédiate. En utilisant seulement le reflet du principe de Pauli en seconde quantification ( $\hat{n}_{\vec{r}\sigma}^2 = \hat{n}_{\vec{r}\sigma}$ ), on vérifie effectivement que

$$\hat{H} = \hat{T} + \frac{|U|}{2} \hat{N} - \frac{|U|}{2} \sum_{\vec{r}} \left( \hat{n}_{\vec{r}\uparrow} - \text{sgn}(U) \hat{n}_{\vec{r}\downarrow} \right)^2, \quad (4.3)$$

avec  $\text{sgn}(U) = U/|U|$  le signe de l'interaction sur site et où  $\hat{N}$  désigne l'opérateur nombre total d'électrons. La somme portant sur les nœuds du réseau ( $s \equiv \vec{r}$ ), le nombre de termes de la décomposition, et par suite le nombre de termes fluctuants dans les équations différentielles stochastiques des méthodes QMC à champs auxiliaires (voir l'équation (4.6) ci-après), se réduit à la moitié de la dimension  $d = 2L$  de l'espace de Hilbert à un corps, alors qu'il est égal à  $d^2$  pour le modèle en couches. Nous constatons de plus que les opérateurs à un corps  $\hat{O}_s \equiv \hat{O}_{\vec{r}}$ , définis par

$$\hat{O}_{\vec{r}} = \hat{n}_{\vec{r}\uparrow} - \text{sgn}(U) \hat{n}_{\vec{r}\downarrow}, \quad (4.4)$$

ont ici une signification physiques. Ils s'assimilent aux opérateurs donnant pour chaque site  $\vec{r}$  le nombre de particules si  $U < 0$  et la magnétisation si  $U > 0$ . Par ailleurs, les coefficients  $\omega_s \equiv \omega_{\vec{r}}$  qui leurs sont associés sont tous égaux à  $|U|/2$ , donc strictement positifs, et les représentations matricielles des opérateurs à une particule correspondant

$$O_{\vec{r}} = |\vec{r}\uparrow\rangle\langle\vec{r}\uparrow| - \text{sgn}(U) |\vec{r}\downarrow\rangle\langle\vec{r}\downarrow|, \quad (4.5)$$

sont réelles en base  $\{|\vec{r}\sigma\rangle\}$ . En conséquence, dès lors que les fonctions d'onde individuelles du déterminant de Slater initial sont elles aussi réelles dans cette base, elles le demeureront à tous

temps imaginaires ultérieurs et pour chaque réalisation. Ainsi, le problème de phase général des approches QMC se ramène pour le modèle de Hubbard à un problème de signe. Dans les schémas de reconstruction de l'état fondamental  $|\Psi_G\rangle$ , seul un recouvrement  $\langle\Psi_G|\Phi_\tau\rangle$  avec les marcheurs  $|\Phi_\tau\rangle$  de signe constant au cours du mouvement brownien sera donc en mesure de garantir l'applicabilité des méthodes QMC. Avec la dynamique standard à champs auxiliaires <sup>1</sup>

$$d|\phi_n\rangle = \left[ -d\tau T + \sqrt{|U|} \sum_{\vec{r}} dW_{\vec{r}} O_{\vec{r}} \right] |\phi_n\rangle, \quad (4.6)$$

cette condition peut être satisfaite en régime attractif ( $U < 0$ ) et pour un système non polarisé,  $N_\uparrow = N_\downarrow = N/2$  où  $N_\sigma$  est le nombre d'électrons de spin  $\sigma$ . Il suffit pour cela de choisir un état initial factorisé en deux déterminants identiques pour chaque canal de spin  $|\Phi_0\rangle = |\Phi_0^\uparrow\rangle|\Phi_0^\downarrow\rangle$  avec des orbitales telles que  $\langle\vec{r}^\uparrow|\phi_{n,0}^\uparrow\rangle = \langle\vec{r}^\downarrow|\phi_{n,0}^\downarrow\rangle \in \mathbb{R}_+$ . En effet, étant donné la forme (4.5) des matrices  $O_{\vec{r}}$ , cette structure particulière pour l'état des marcheurs est préservée par les équations différentielles stochastiques (4.6), et le recouvrement  $\langle\Psi_G|\Phi_\tau\rangle$  à un instant  $\tau_0$  quelconque est bien réel et positif :

$$\langle\Psi_G|\Phi_{\tau_0}\rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \mathbb{E}[\langle\Phi_\tau|\Phi_{\tau_0}\rangle] \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \mathbb{E}[\langle\Phi_\tau^\uparrow|\Phi_{\tau_0}^\uparrow\rangle\langle\Phi_\tau^\downarrow|\Phi_{\tau_0}^\downarrow\rangle] \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \mathbb{E}[\langle\Phi_\tau^\uparrow|\Phi_{\tau_0}^\uparrow\rangle^2] \in \mathbb{R}_+.$$

En régime répulsif, seul le système non polarisé à mi-remplissage offre l'opportunité d'être exempt de problème de signe. Ce résultat s'explique par la correspondance, sous une transformation particule-trou, des états stationnaires pour les ensembles de paramètres  $\{N_\uparrow; N_\downarrow; U\}$  et  $\{N_\uparrow; L - N_\downarrow; -U\}$  [152]. Par conséquent, si  $N_\uparrow = N_\downarrow = L/2$ , le modèle avec  $U > 0$  est complètement semblable à son image attractive dont l'échantillonnage est libre de tout problème de signe. Signalons qu'il est aussi possible d'aboutir à ces conclusions en examinant les conditions sous lesquelles les équations du mouvement (4.6) sont invariantes sous le renversement du temps, conformément à l'argumentation générale du premier chapitre.

Les régimes d'intérêt du modèle de Hubbard pour les cuprates correspondent à de fortes répulsions sur site,  $U/t \sim 8 \rightarrow 12$ , et à des réseaux dopés en trous. À ce jour, ils ne peuvent être appréhendés par les méthodes QMC traditionnelles qu'au travers d'une approximation à chemins contraints. Elle repose sur la dynamique à champs auxiliaires (4.6) conjuguée à un échantillonnage des marcheurs  $\{|\Phi_\tau\rangle\}$  selon l'importance de leur recouvrement  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$  avec un état d'essai  $|\Psi_T\rangle$ . Le problème de signe y est simplement contrôlé en tronquant la distribution de ces derniers pour préserver uniquement ceux correspondant à un recouvrement  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle > 0$  à tout temps. Un état fondamental approché  $|\tilde{\Psi}_G\rangle$  se voit ainsi reconstruit selon

$$|\tilde{\Psi}_G\rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\propto} \widetilde{e^{-\tau\hat{H}}|\Phi_0\rangle} \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \mathbb{E} \left[ \tilde{\Pi}_\tau \frac{|\Phi_\tau\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle} \right] \quad \text{avec} \quad \tilde{\Pi}_\tau = \max\{0; \langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle\}.$$

La plupart des simulations à chemins contraints du modèle de Hubbard font appel à un simple état d'électrons indépendants comme état d'essai [59–61], même si un état BCS<sup>2</sup> en onde  $d$  a également été utilisé [153]. Tous les résultats obtenus de cette manière s'accordent pour conclure à l'absence d'ordre à longue portée dans le canal  $d_{x^2-y^2}$ , sans toutefois infirmer la conjecture d'Anderson. Récemment, le modèle de Hubbard a été traité par une approche QMC avec des conditions aux limites fluctuantes pour accélérer la convergence vers la limite thermodynamique [154]. Seul le terme de saut  $\hat{T}$  du hamiltonien (4.1) est sensible à de telles conditions qui, précisément, introduisent un facteur de phase dès qu'un électron sort de la cellule de simulation :

$$\hat{c}_{\vec{r}+L\alpha}^\dagger \tilde{u}_{\alpha,\sigma} = \exp(i\theta_\alpha) \hat{c}_{\vec{r}\sigma}^\dagger, \quad (4.7)$$

1. Le terme quadratique  $\sum_{\vec{r}} O_{\vec{r}}^2 = \mathbb{1}$  normalement présent est compensé par celui en  $|U|\hat{N}/2$  provenant de la décomposition (4.3) du hamiltonien.

2. Le gap étant nul à l'approximation variationnelle BCS en régime répulsif, sa valeur est fixée arbitrairement.

où  $\alpha = x, y$ . Il en résulte des fonctions d'onde complexes dans les approches QMC et un problème de phase dans l'échantillonnage de l'état fondamental contrôlé selon l'approximation « *cosinus* ». L'état d'essai  $|\Psi_T\rangle$  employé est à nouveau le déterminant de Slater des électrons sans interaction. En moyennant sur les phase  $\theta_\alpha$ , une équation d'état approximative reliant l'énergie par site à la densité d'électrons a pu être déterminée pour un couplage intermédiaire  $U = 4t$ . Pour des couplages plus forts,  $U/t \sim 8 \rightarrow 12$ , l'émergence dans la région dopée en trous de phases présentant des ordres de spin et de charge incommensurables (« *stripes* ») a de plus été mise en évidence. Signalons que ce scénario est parfaitement reproduit par l'approche variationnelle de champ moyen enchevêtré par les symétries récemment appliquée au modèle de Hubbard [63]. Nous avons par ailleurs tenté d'inclure des corrélations d'appariement en onde  $d$  dans l'état  $|\Psi_T\rangle$  au travers d'un schéma QMC similaire. Au voisinage du dopage  $1/8$  optimal pour la supraconductivité non conventionnelle dans les cuprates, aucun gain en énergie substantiel n'a été obtenu quelle que soit la valeur du gap pour l'état BCS initial et nous n'avons donc pas poursuivi plus avant cette étude préliminaire.

## 4.3 Approches QMC exemptes de problème de signe

### 4.3.1 Le schéma à dynamique guidée

Rappelons dans un premier temps que ce schéma QMC vise à reconstruire l'état fondamental du système comme la moyenne d'états de particules indépendantes pondérés par des poids issus d'un échantillonnage préférentiel inclus dans la dynamique :

$$|\Psi_G\rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\propto} \exp(-\tau \hat{H}) |\Phi_0\rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \mathbb{E} \left[ \Pi_\tau \frac{|\Phi_\tau\rangle}{\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle} \right], \quad (4.8)$$

avec

$$\Pi_\tau = \Pi_0 \exp \left[ - \int_0^\tau d\tau' \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T, \Phi_{\tau'}} \right]. \quad (4.9)$$

L'état d'essai  $|\Psi_T\rangle$  guide les trajectoires des marcheurs en intervenant, au travers des estimateurs locaux  $\langle \hat{O}_{\vec{r}} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau}$  des opérateurs  $\hat{O}_{\vec{r}}$ , dans l'évolution temporelle de leurs états individuels occupés  $\{|\phi_n\rangle\}$ . Ces derniers sont en effet animés de la dynamique gouvernée par les équations différentielles stochastiques suivantes :

$$d|\phi_n\rangle = \left[ -d\tau \left( T - |U| \sum_{\vec{r}} \langle \hat{O}_{\vec{r}} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} O_{\vec{r}} \right) + \sqrt{|U|} \sum_{\vec{r}} dW_{\vec{r}} O_{\vec{r}} \right] |\phi_n\rangle, \quad (4.10)$$

les éléments stochastiques  $dW_{\vec{r}}$  étant les incréments infinitésimaux de processus de Wiener indépendants.

Pour examiner le problème de signe dans l'échantillonnage (4.8), nous devons comme précédemment analyser le produit scalaire entre l'état fondamental exact  $|\Psi_G\rangle$  et une réalisation  $|\Phi_{\tau_0}\rangle$  à un instant quelconque. L'état guide ne devant pas être orthogonal à l'état recherché, nous sommes toujours en droit de considérer  $|\Psi_G\rangle$  comme résultant de la propagation en temps imaginaire de  $|\Psi_T\rangle$ . Ainsi :

$$\langle \Psi_G | \Phi_{\tau_0} \rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\exp(\tau E_G)}{\langle \Psi_T | \Psi_G \rangle} \langle \Psi_T | e^{-\tau \hat{H}} | \Phi_{\tau_0} \rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \frac{\exp(\tau E_G)}{\langle \Psi_T | \Psi_G \rangle} \mathbb{E}[\Pi_\tau], \quad (4.11)$$

en utilisant (4.8) avec  $\Pi_0 = \langle \Psi_T | \Phi_{\tau_0} \rangle$  et où  $E_G$  désigne évidemment l'énergie de l'état fondamental. Or, la dynamique (4.10) garantit que les marcheurs sont associés à des fonctions d'onde

individuelles réelles sous réserve qu'elle soit initiée par un tel déterminant de Slater  $|\Phi_0\rangle$  et que l'état d'essai corresponde également à une fonction d'onde à  $N$ -corps  $\langle \vec{r}_1\sigma_1, \dots, \vec{r}_N\sigma_N | \Psi_T \rangle$  réelle. Sous ces hypothèses, l'énergie locale  $\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau}$  et de fait le poids  $\Pi_\tau$  de la relation (4.9) sont réels. De plus, ce dernier conserve constamment le signe de  $\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle$  qui est d'ailleurs le même que celui du recouvrement initial  $\langle \Psi_T | \Phi_0 \rangle$ . Effectivement, tout changement de signe de la « fonction d'importance »  $\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle$  s'accompagnerait nécessairement par un croisement de la surface nodale  $\mathcal{N}_T$  de l'état test. À ce moment là, les estimateurs locaux

$$\langle \hat{O}_{\vec{r}} \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} = \frac{\langle \Psi_T | \hat{O}_{\vec{r}} | \Phi_\tau \rangle}{\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle},$$

divergeraient. Leur présence dans le terme de dérive du mouvement brownien (4.10) équivaut alors schématiquement à une barrière de potentiel infinie qui repousse les marcheurs du domaine  $\mathcal{N}_T$  et finalement les confine dans la région  $\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle / \langle \Psi_T | \Phi_0 \rangle > 0$ . En définitive, le recouvrement (4.11) entre une réalisation et l'état fondamental possède toujours la même phase (celle de rapport  $\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle / \langle \Psi_T | \Phi_0 \rangle$ ). Aucune approximation n'ayant été faite pour parvenir à ce résultat, le schéma QMC à dynamique guidée pour le modèle de Hubbard n'est en rien similaire à la méthode des chemins contraints. Il conduit en moyenne à l'état fondamental exact sans présenter aucun problème de signe quels que soient l'intensité de l'interaction sur site et le taux de remplissage du réseau.

### 4.3.2 Le schéma de champ moyen stochastique à poids positifs [24]

Cette approche QMC a été proposée en 2007 pour les modèles de type Hubbard. Elle conduit à une reconstruction de l'état fondamental similaire à celle (4.8), les poids  $\Pi_\tau$  étant également donnés par (4.9). Le vecteur d'essai  $|\Psi_T\rangle$  est toutefois restreint à un déterminant de Slater dont les états individuels occupés seront par la suite logiquement notés  $\{|\psi_n\rangle\}$ . Les marcheurs obéissent à une dynamique *a priori* différente de (4.10) et qui assure remarquablement le maintien au cours du mouvement d'une biorthogonalité entre les orbitales des deux déterminants

$$\langle \psi_n | \phi_p \rangle = \delta_{np}. \quad (4.12)$$

Il en résulte immédiatement  $\langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle = 1, \forall \tau$ . Comme précédemment les poids  $\Pi_\tau$  des réalisations sont donc réels et positifs pour le modèle de Hubbard dès lors que les états individuels du déterminant d'essai  $|\Psi_T\rangle$  et celles du vecteur initial  $|\Phi_0\rangle$  correspondent à des fonctions d'onde réelles. De nouveau, aucun problème de signe ne contamine ainsi l'échantillonnage de l'état fondamental. L'évolution des marcheurs, que nous détaillerons plus loin, étant conduite dans sa partie déterministe par le hamiltonien Hartree-Fock, nous parlerons d'une *méthode de champs moyen stochastique à poids positifs*. Nous renvoyons à la référence [24] pour la démonstration originale des équations différentielles stochastiques à la base de cette méthode. Ici, nous proposons de montrer en réalité leur stricte équivalence avec celles (4.10) du schéma guidé.

Considérons un déterminant de Slater  $|\Phi'\rangle$  dont les états individuels  $\{|\phi'_n\rangle\}$  décrivent des trajectoires pilotées par (4.10) :

$$d|\phi'_n\rangle = dh|\phi'_n\rangle \quad \text{avec} \quad dh = -d\tau \left( T - |U| \sum_{\vec{r}} \langle \hat{O}_{\vec{r}} \rangle_{\Psi_T, \Phi'_\tau} O_{\vec{r}} \right) + \sqrt{|U|} \sum_{\vec{r}} dW_{\vec{r}} O_{\vec{r}}. \quad (4.13)$$

Ces vecteurs peuvent être linéairement combinés pour satisfaire les relations de biorthogonalité (4.12) en posant

$$|\phi_n\rangle = \sum_{p=1}^N (f^{-1})_{pn} |\phi'_p\rangle, \quad (4.14)$$

où  $f$  est la matrice de recouvrement entre les états à un corps de  $|\Psi_T\rangle$  et ceux de  $|\Phi'\rangle$ ,  $f_{np} = \langle\psi_n|\phi'_p\rangle$ . Les marcheurs associés  $|\Phi_\tau\rangle$  et  $|\Phi'_\tau\rangle$  ne diffèrent alors que par un facteur de normalisation :

$$|\Phi_\tau\rangle = \det(f^{-1})|\Phi'_\tau\rangle = \frac{|\Phi'_\tau\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi'_\tau\rangle}. \quad (4.15)$$

Cherchons à présent les équations différentielles dictant le mouvement des nouveaux états individuels  $\{|\phi_n\rangle\}$ . Au premier ordre en  $d\tau$  dans le calcul d'Ito, il vient directement par différentiation de (4.14) :

$$\begin{aligned} d|\phi_n\rangle &= \sum_{p=1}^N \left[ (f^{-1})_{pn} d|\phi'_p\rangle + d(f^{-1})_{pn} |\phi'_p\rangle + d(f^{-1})_{pn} d|\phi'_p\rangle \right] \\ &= dh|\phi_n\rangle + \sum_{p=1}^N \left[ d(f^{-1})_{pn} + d(f^{-1})_{pn} dh \right] |\phi'_p\rangle. \end{aligned} \quad (4.16)$$

De plus, de la relation évidente  $ff^{-1} = \mathbb{1}$  résulte que

$$\begin{aligned} d(f^{-1}) &= -f^{-1}(df)f^{-1} - f^{-1}(df)d(f^{-1}) \\ &= -f^{-1}(df)f^{-1} + f^{-1}(df^s)f^{-1}(df^s)f^{-1} + \mathcal{O}(d\tau^{3/2}). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Soit alors la matrice densité de transition à un corps  $\mathcal{R}$  pour les éléments de matrice d'observables entre les déterminants  $|\Psi_T\rangle$  et  $|\Phi'_\tau\rangle$  ou  $|\Phi_\tau\rangle$  [36] (rappelons que par construction  $\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle = 1$ ) :

$$\mathcal{R}_{ij} = \frac{\langle\Psi_T|\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_i|\Phi'_\tau\rangle}{\langle\Psi_T|\Phi'_\tau\rangle} = \langle\Psi_T|\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_i|\Phi_\tau\rangle \Leftrightarrow \mathcal{R} = \sum_{n,p=1}^N |\phi_p\rangle(f^{-1})_{pn}\langle\psi_n| = \sum_{n=1}^N |\varphi_n\rangle\langle\psi_n|. \quad (4.18)$$

Il est ainsi aisé de réécrire la dynamique (4.16) des états  $|\phi_n\rangle$  sous une forme compacte ne faisant plus appel qu'à cette matrice  $\mathcal{R}$  et à l'opérateur  $dh$  introduit par l'équation (4.13) du schéma guidé :

$$d|\phi_n\rangle = (\mathbb{1} - \mathcal{R}) \left[ dh - dh\mathcal{R}dh \right] |\phi_n\rangle,$$

où nous avons utilisé  $df_{np} = \langle\psi_n|(d|\phi'_p\rangle) = \langle\psi_n|dh|\phi'_p\rangle$ . En remarquant que l'estimateur local  $\langle\hat{O}_{\vec{r}}\rangle_{\Psi_T,\Phi'_\tau}$  est simplement donné par

$$\langle\hat{O}_{\vec{r}}\rangle_{\Psi_T,\Phi'_\tau} = \text{tr}(\mathcal{R}O_{\vec{r}}) = \langle\vec{r}\uparrow|\mathcal{R}|\vec{r}\uparrow\rangle - \text{sgn}U\langle\vec{r}\downarrow|\mathcal{R}|\vec{r}\downarrow\rangle,$$

et en développant le produit  $dh\mathcal{R}dh$  au premier ordre en  $d\tau$  nous obtenons finalement les équations différentielles

$$d|\phi_n\rangle = (\mathbb{1} - \mathcal{R}) \left[ -d\tau h[\mathcal{R}] + \sqrt{|U|} \sum_{\vec{r}} dW_{\vec{r}} O_{\vec{r}} \right] |\phi_n\rangle = (\mathbb{1} - \mathcal{R}) dh_{\text{SHF}} |\phi_n\rangle, \quad (4.19)$$

Ci-dessus,  $h[\mathcal{R}]$  désigne le hamiltonien Hartree-Fock du modèle de Hubbard mais en termes de la matrice densité de transition  $\mathcal{R}$  au lieu de la densité à un corps habituelle, soit

$$h[\mathcal{R}] = T + U \sum_{\vec{r},\sigma} \left[ \langle\vec{r}\bar{\sigma}|\mathcal{R}|\vec{r}\bar{\sigma}\rangle |\vec{r}\sigma\rangle\langle\vec{r}\sigma| - \langle\vec{r}\sigma|\mathcal{R}|\vec{r}\bar{\sigma}\rangle |\vec{r}\sigma\rangle\langle\vec{r}\bar{\sigma}| \right], \quad (4.20)$$

où  $\bar{\sigma}$  représente le spin opposé de  $\sigma$ . Il définit la partie de dérive du mouvement brownien, la diffusion étant issue d'une linéarisation de l'interaction à deux corps par des processus de Wiener indépendants attachés à chaque nœud du réseau cristallin. La dynamique (4.19) s'avère être exactement celle du schéma Hartree-Fock stochastique à poids positifs pour le modèle de

Hubbard. Il est facilement vérifiable qu'elle conserve bien la propriété de biorthogonalité (4.14) au cours du temps imaginaire :

$$\langle \psi_p | \phi_{n,\tau+\mathrm{d}\tau} \rangle = \langle \psi_p | \phi_n \rangle + \langle \psi_p | (\mathbb{1} - \mathcal{R}) dh_{\text{SHF}} | \phi_n \rangle = \delta_{pn} .$$

En effet, les états individuels constituant le déterminant d'essai sont les vecteurs propres gauches de la matrice densité de transition, c'est-à-dire  $\langle \psi_p | \mathcal{R} = \langle \psi_p |$ , et donc  $\langle \psi_p | (\mathbb{1} - \mathcal{R}) = 0$ .

Pour résumer, nous venons de prouver que l'approche QMC implémentée pour la structure nucléaire est équivalente<sup>3</sup> à un schéma récent basé sur une extension stochastique du champ moyen lorsqu'elle est guidée par un déterminant de Slater. Pour le modèle de Hubbard, aucun problème de signe ne se manifeste et tout estimateur mixte d'une observable peut être exactement reconstruit.

Il est par ailleurs possible d'étendre la démarche afin d'accéder aux « vraies » valeurs moyennes  $\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_G} = \langle \Psi_G | \hat{A} | \Psi_G \rangle$ . Dans ce cas, il est nécessaire d'appliquer les résultats généraux du chapitre 1 au bra  $\langle \Psi_G |$  et au ket  $|\Psi_G\rangle$  pour réinterpréter le projecteur  $|\Psi_G\rangle\langle\Psi_G|$  sur l'état fondamental en termes de l'espérance mathématique de dyade  $|\Phi_\tau^{(a)}\rangle\langle\Phi_\tau^{(b)}|$  constituées de déterminants de Slater. Avec l'approche envisagée dans cette section, une condition de biorthogonalité  $\langle \phi_n^{(b)} | \phi_p^{(a)} \rangle = \delta_{np}$  entre leurs orbitales est imposée à chaque instant imaginaire. Nous nous limiterons à donner les résultats issus d'une application directe des raisonnements présentés dans les références [24, 52] :

$$|\Psi_G\rangle\langle\Psi_G| \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\propto} e^{-\frac{\tau}{2}\hat{H}} |\Phi_0^{(a)}\rangle\langle\Phi_0^{(b)}| e^{-\frac{\tau}{2}\hat{H}} \underset{\tau \rightarrow +\infty}{=} \mathbb{E} \left[ \Pi_\tau |\Phi_\tau^{(a)}\rangle\langle\Phi_\tau^{(b)}| \right] ,$$

avec un poids statistique donné par

$$\Pi_\tau = \exp \left[ - \int_0^\tau \mathrm{d}\tau' \langle \hat{H} \rangle_{\Phi_\tau^{(b)} \Phi_\tau^{(a)}} \right] .$$

Pour le modèle de Hubbard, les états individuels formant  $|\Phi^{(a)}\rangle$  et  $|\Phi^{(b)}\rangle$  évoluent selon les équations différentielles stochastiques ( $x = a, b$ ) suivantes

$$d|\phi_n^{(x)}\rangle = (\mathbb{1} - \mathcal{R}) \left[ -\frac{\mathrm{d}\tau}{2} h[\mathcal{R}] + \sqrt{\frac{|U|}{2}} \sum_{\vec{r}} \mathrm{d}W_{\vec{r}}^{(x)} O_{\vec{r}} \right] |\phi_n^{(x)}\rangle = (\mathbb{1} - \mathcal{R}) dh_{\text{SHF}}^{(x)} |\phi_n^{(x)}\rangle . \quad (4.21)$$

Les opérateurs de champ moyen stochastique  $dh_{\text{SHF}}^{(x)}$  sont ainsi similaires à celui (4.19) que nous avons pour la reconstruction de  $|\Psi_G\rangle$ , mais avec des processus de Wiener  $W_{\vec{r}}^{(x)}$  indépendants pour le bra et le ket. D'autre part, la matrice densité de transition  $\mathcal{R}$  est désormais celle des deux états d'électrons indépendants qui compose la dyade

$$\mathcal{R}_{ij} = \langle \Phi^{(b)} | \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i | \Phi^{(a)} \rangle \Leftrightarrow \mathcal{R} = \sum_{n=1}^N |\phi_n^{(a)}\rangle\langle\phi_n^{(b)}| . \quad (4.22)$$

En injectant (4.21) dans cette expression, nous obtenons directement l'évolution de  $\mathcal{R}$  dans le temps imaginaire, à savoir

$$d\mathcal{R} = (\mathbb{1} - \mathcal{R}) dh_{\text{SHF}}^{(a)} \mathcal{R} + \mathcal{R} dh_{\text{SHF}}^{(b)} (\mathbb{1} - \mathcal{R}) . \quad (4.23)$$

Concernant le problème de signe, tous les raisonnements menés depuis le début de cette section s'adaptent sans aucune difficulté pour conduire, dans le cas du modèle de Hubbard, à un recouvrement réel et positif entre le projecteur  $|\Psi_G\rangle\langle\Psi_G|$  et une réalisation  $|\Phi_\tau^{(a)}\rangle\langle\Phi_\tau^{(b)}|$ . Ce résultat est toutefois seulement valable sous réserve d'initier la propagation avec des fonctions d'onde individuelles réelles. Aucune dégradation du rapport signal sur bruit n'est donc attendue dans une telle simulation Monte-Carlo quantique du modèle de Hubbard.

3. L'équivalence s'applique à chacune des réalisations du mouvement brownien, les marcheurs  $|\Phi_\tau^{(a)}\rangle$  et  $|\Phi_\tau^{(b)}\rangle$  étant reliés par (4.14, 4.15).

### 4.3.3 Le schéma QMC « gaussien » [25, 39, 40, 134]

Il s'agit chronologiquement du premier schéma QMC proposé sans problème de signe pour le hamiltonien de Hubbard quel que soit l'interaction  $U$  sur site et le dopage du réseau. Il repose sur la reconstruction de l'opérateur densité à  $N$ -corps  $\hat{D}_\tau = \exp(-\tau(\hat{H} - \mu\hat{N}))$  du système dans l'ensemble grand-canonique pour le potentiel chimique  $\mu$  et la température  $T = 1/k_B\tau$ . Les marcheurs sont dans ce cas des opérateurs  $\hat{\Lambda}$  dits « gaussiens », de trace unité, et qui constituent une base surcomplète de l'espace de Liouville. Ils sont définis comme <sup>4</sup>

$$\hat{\Lambda}(\mathcal{R}) = \det(\mathbb{1} - \mathcal{R}^T) : \exp \left[ - \sum_{i,j=1}^d \left( 2\mathbb{1} + (\mathcal{R} - \mathbb{1})^{-1} \right)_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \right] : , \quad (4.24)$$

$: \cdots :$  désigne le produit normal ; les opérateurs fermioniques sont ceux associés à une base orthonormée de l'espace à un corps de dimension  $d$ , par exemple  $|u_i\rangle = |\vec{r}\sigma\rangle$  pour le modèle de Hubbard. On montre par ailleurs que la matrice  $\mathcal{R}$ , de dimension  $d \times d$ , qui paramétrise l'*ansatz* (4.24) correspond à sa densité à un corps  $\mathcal{R}_{ij} = \langle \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i \rangle = \text{Tr}(\hat{\Lambda} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i)$ . En général, elle ne sera pas hermitique et c'est pourquoi nous l'avons notée  $\mathcal{R}$  par souci de cohérence avec les considérations jusqu'alors présentées. Toutefois, contrairement aux matrices densité à un corps de transition entre deux déterminants de Slater,  $\mathcal{R}^2 \neq \mathcal{R}$ .

L'opérateur densité décrivant l'état d'équilibre grand-canonique du système peut être déterminé par une propagation en temps imaginaire selon l'équation de Bloch

$$\frac{d\hat{D}_\tau}{d\tau} = \frac{1}{2} \{ \hat{H} - \mu\hat{N}, \hat{D}_\tau \} \quad ; \quad \hat{D}_0 = \hat{\mathbb{1}} . \quad (4.25)$$

Dans sa formulation originale, le schéma QMC gaussien transcrit cette dynamique en une équation aux dérivées partielles de type Fokker-Planck pour la distribution de probabilité des marcheurs  $\hat{\Lambda}$ . Dès lors, l'état exact  $\hat{D}_\tau$  peut se reconstruire comme une moyenne pondérée d'opérateurs gaussiens associés à des matrices  $\mathcal{R}$  évoluant stochastiquement

$$\hat{D}_\tau = \mathbb{E} \left[ \Pi_\tau \hat{\Lambda}(\mathcal{R}_\tau) \right] . \quad (4.26)$$

Pour le modèle de Hubbard, les matrices  $\mathcal{R}_\tau$  demeurent réelles tout au long de leur mouvement brownien et les poids  $\Pi_\tau$  sont tous réels et positifs. Par conséquent, aucune manifestation du problème de signe ne survient dans le calcul de la valeur moyenne  $\langle \hat{A} \rangle_{\hat{D}_\tau}$  d'équilibre d'une observable  $\hat{A}$  quelconque

$$\langle \hat{A} \rangle_{\hat{D}_\tau} = \frac{\text{Tr}(\hat{D}_\tau \hat{A})}{\text{Tr}(\hat{D}_\tau)} = \frac{\mathbb{E} \left[ \Pi_\tau \langle \hat{A} \rangle_{\hat{\Lambda}(\mathcal{R}_\tau)} \right]}{\mathbb{E}[\Pi_\tau]} .$$

L'*ansatz* (4.24) peut en fait se reformuler aisément comme un opérateur densité Hartree-Fock, c'est-à-dire comme l'exponentielle d'un opérateur à un corps  $\hat{K} = \sum_{i,j=1}^d K_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$  soit

$$\hat{\Lambda}(\mathcal{R}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \exp(-\hat{K}) \quad ; \quad \mathcal{Z} = \text{Tr}(\exp(-\hat{K})) . \quad (4.27)$$

$\mathcal{R}$  est alors reliée à  $K$  par la relation suivante qui se réduit à la statistique de Fermi-Dirac lorsque  $\hat{K}$  est diagonal [36] :

$$\mathcal{R} = \left[ \mathbb{1} + \exp(K) \right]^{-1} . \quad (4.28)$$

4. Dans les références [25, 39, 40, 134],  $\hat{\Lambda}$  est plutôt écrit en termes de la matrice transposée  $\mathcal{R}^T$  qui y est notée  $n$ .

Précisons enfin que l'*ansatz* (4.24, 4.27) autorise l'application du théorème de Wick pour exprimer n'importe quelle valeur moyenne d'observable comme une fonctionnelle de  $\mathcal{R}$ . Pour parvenir au schéma QMC (4.26) et aux équations différentielles stochastiques que suivent les matrices  $\mathcal{R}_\tau$ , leurs auteurs J. F. Corney et P. D. Drummond ont été amenés à développer un formalisme mathématique complexe basé sur l'algèbre de Grassman [39]. Nous souhaitons montrer ici qu'il est tout-à-fait possible de retrouver leurs résultats beaucoup plus simplement au travers d'une extension de la dynamique guidée de la section 4.3.1.

Considérons alors à une date  $\tau$  un opérateur  $\hat{\Lambda}(\mathcal{R}_\tau)$  du type (4.24, 4.27), que nous noterons pour alléger  $\hat{\Lambda}_\tau$ . Sa propagation exacte selon l'équation de Bloch (4.25) pendant un pas de temps infinitésimal  $d\tau$  conduit à un opérateur densité  $\hat{\mathcal{G}}_{\tau+d\tau}$  qui, au premier ordre en  $d\tau$ , peut s'exprimer sous la forme

$$\hat{\mathcal{G}}_{\tau+d\tau} = \exp\left(-\frac{d\tau}{2}\hat{H}_\mu\right)\hat{\Lambda}_\tau\exp\left(-\frac{d\tau}{2}\hat{H}_\mu\right), \quad (4.29)$$

où  $\hat{H}_\mu = \hat{H} - \mu\hat{N}$ .  $\hat{\mathcal{G}}_{\tau+d\tau}$  ne possède clairement pas la structure particulière (4.27) de  $\hat{\Lambda}$  en raison des contributions à deux corps que contient  $\hat{H}$ . Utilisons alors :

- la décomposition quadratique (4.3) de  $\hat{H}$  réécrite toutefois en fonction de la différence  $\hat{O}_{\vec{r}} - \langle\hat{O}_{\vec{r}}\rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}\hat{\mathbb{1}}$ , soit

$$\hat{H} = \left(\frac{|U|}{2}\sum_{\vec{r}}\langle\hat{O}_{\vec{r}}\rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}^2\right)\hat{\mathbb{1}} + \hat{T} + \frac{|U|}{2}\hat{N} - |U|\sum_{\vec{r}}\langle\hat{O}_{\vec{r}}\rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}\hat{O}_{\vec{r}} - \frac{|U|}{2}\sum_{\vec{r}}\left(\hat{O}_{\vec{r}} - \langle\hat{O}_{\vec{r}}\rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}\hat{\mathbb{1}}\right)^2;$$

- la transformation de Hubbard-Stratonovich pour linéariser l'évolution induite par chaque terme quadratique,

$$\exp\left(d\tau x\hat{O}^2/2\right) = \mathbb{E}\left[\exp\left(\sqrt{x}dW\hat{O}\right)\right] \quad ; \quad \mathbb{E}[dW] = 0, dW^2 = d\tau.$$

Ainsi, l'état corrélé  $\hat{\mathcal{G}}_{\tau+d\tau}$  à  $\tau + d\tau$  devient

$$\hat{\mathcal{G}}_{\tau+d\tau} = \mathbb{E}\left[\exp\left(dS^{(a)} + dS^{(b)}\right)\exp\left(d\hat{h}^{(b)}\right)\hat{\Lambda}_\tau\exp\left(d\hat{h}^{(a)}\right)\right], \quad (4.30)$$

avec, pour  $x = a, b$ ,

$$\begin{cases} dS^{(x)} = -\frac{d\tau}{4}|U|\sum_{\vec{r}}\langle\hat{O}_{\vec{r}}\rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}^2 - \sqrt{\frac{|U|}{2}}\sum_{\vec{r}}dW_{\vec{r}}^{(x)}\langle\hat{O}_{\vec{r}}\rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}, \\ d\hat{h}^{(x)} = -\frac{d\tau}{2}\hat{T}_\mu + d\tau\frac{|U|}{2}\sum_{\vec{r}}\langle\hat{O}_{\vec{r}}\rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}\hat{O}_{\vec{r}} + \sqrt{\frac{|U|}{2}}\sum_{\vec{r}}dW_{\vec{r}}^{(x)}\hat{O}_{\vec{r}}, \end{cases} \quad (4.31)$$

où il a été posé  $\hat{T}_\mu = \hat{T} + |U|\hat{N}/2 - \mu\hat{N}$ , et où les  $dW_{\vec{r}}^{(x)}$  sont des différentielles de processus de Wiener indépendants satisfaisant aux tables de multiplication

$$dW_{\vec{r}}^{(x)}dW_{\vec{r}'}^{(x')} = \delta_{\vec{r}\vec{r}'}\delta_{xx'}d\tau. \quad (4.32)$$

De plus, le produit des trois exponentielles d'opérateurs à un corps apparaissant dans la relation (4.30) est, à un facteur de normalisation près, un opérateur densité du type (4.27) à la date  $\tau + d\tau$

$$\exp\left(d\hat{h}^{(b)}\right)\hat{\Lambda}_\tau\exp\left(d\hat{h}^{(a)}\right) = \exp\left(-\hat{K}_{\tau+d\tau}\right) = \mathcal{Z}_{\tau+d\tau}\hat{\Lambda}_{\tau+d\tau}. \quad (4.33)$$

Les facteurs scalaires issus des relations (4.31) et (4.33) peuvent alors être simplement pris en compte en affectant un poids  $\Pi_\tau$  à chaque marcheur  $\hat{\Lambda}_\tau$ , d'où

$$\exp\left(-\frac{d\tau}{2}\hat{H}_\mu\right)\left(\Pi_\tau\hat{\Lambda}_\tau\right)\exp\left(-\frac{d\tau}{2}\hat{H}_\mu\right) = \mathbb{E}\left[\Pi_{\tau+d\tau}\hat{\Lambda}_{\tau+d\tau}\right], \quad (4.34)$$

avec

$$\begin{aligned} \frac{\Pi_{\tau+d\tau}}{\Pi_\tau} &= e^{dS^{(a)}} e^{dS^{(b)}} \frac{\mathcal{Z}_{\tau+d\tau}}{\mathcal{Z}_\tau} \\ &= e^{dS^{(a)}} e^{dS^{(b)}} \text{Tr} \left( \exp \left( d\hat{h}^{(b)} \right) \hat{\Lambda}_\tau \exp \left( d\hat{h}^{(a)} \right) \right) \\ &= 1 - d\tau \langle \hat{H} \rangle_{\hat{\Lambda}_\tau} . \end{aligned} \quad (4.35)$$

Signalons que cette dernière expression s'obtient immédiatement en développant toutes les exponentielles au premier ordre en  $d\tau$  (c'est-à-dire à l'ordre deux en  $dS^{(x)}$  et  $d\hat{h}^{(x)}$  compte tenu des termes stochastiques inclus dans chacun). Il en résulte  $d\Pi = -\Pi d\tau \langle \hat{H} \rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}$  et de fait

$$\Pi_\tau = \exp \left[ - \int_0^\tau d\tau' \langle \hat{H} \rangle_{\hat{\Lambda}_{\tau'}} \right] .$$

À ce stade, nous pouvons par ailleurs remarquer que les développements menés depuis la propagation infinitésimale (4.29) demeurent valables si  $\hat{\Lambda}_\tau$  était une dyade  $|\Phi_\tau\rangle\langle\Psi_T|/\langle\Psi_T|\Phi_\tau\rangle$  normée et constituée d'un déterminant de Slater  $|\Phi_\tau\rangle$  évoluant en temps imaginaire et d'un état d'essai  $|\Psi_T\rangle$  fixe  $\forall \tau$ . Dans ce cas (4.29) est donc remplacé par  $\exp(-d\tau\hat{H})\hat{\Lambda}_\tau$  et nous avons évidemment  $dS^{(b)} = 0$  et  $d\hat{h}^{(b)} = 0$ , les expressions (4.31) de  $dS^{(a)}$  et  $d\hat{h}^{(a)}$  étant toujours valides mais avec  $d\tau/2 \rightarrow d\tau$  et  $dW_{\vec{r}}^{(a)} \rightarrow \sqrt{2}dW_{\vec{r}}^{(a)}$ . La dynamique des états individuels  $\{|\phi_{n,\tau}\rangle\}$  des marcheurs s'en déduit alors immédiatement et coïncide exactement avec le schéma de la section 4.3.1 guidé par l'état  $|\Psi_T\rangle$ . C'est en ce sens que la démarche adoptée ici pour une reformulation QMC du problème à  $N$ -corps à température finie peut être considérée comme une extension de ce schéma à des opérateurs densités Hartree-Fock (4.24, 4.27).

Reprenons maintenant le cours de notre démonstration. Le marcheur  $\hat{\Lambda}_{\tau+d\tau}$  introduit par la relation (4.33) étant entièrement défini par sa densité à un corps  $\mathcal{R}_{\tau+d\tau} = \mathcal{R}_\tau + d\mathcal{R}$ , il ne nous reste plus qu'à déterminer cette matrice. Ses éléments s'estiment directement à partir de (4.33),

$$(\mathcal{R} + d\mathcal{R})_{ij} = \text{Tr} \left( \hat{\Lambda}_{\tau+d\tau} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i \right) = \frac{\text{Tr} \left( e^{d\hat{h}^{(b)}} \hat{\Lambda}_\tau e^{d\hat{h}^{(a)}} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i \right)}{\text{Tr} \left( e^{d\hat{h}^{(b)}} \hat{\Lambda}_\tau e^{d\hat{h}^{(a)}} \right)} = \frac{\langle e^{d\hat{h}^{(a)}} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i e^{d\hat{h}^{(b)}} \rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}}{\langle e^{d\hat{h}^{(a)}} e^{d\hat{h}^{(b)}} \rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}} , \quad (4.36)$$

après avoir multiplié le numérateur et dénominateur par  $1/\mathcal{Z}_\tau$  pour faire apparaître  $\hat{\Lambda}_\tau$ . Or, en usant de (4.35)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\langle e^{d\hat{h}^{(a)}} e^{d\hat{h}^{(b)}} \rangle_{\hat{\Lambda}_\tau}} &= \left( \frac{\mathcal{Z}_{\tau+d\tau}}{\mathcal{Z}_\tau} \right)^{-1} = 1 + d\tau \langle \hat{H} \rangle_{\hat{\Lambda}_\tau} + \sum_{x=a,b} \left[ dS^{(x)} + \frac{1}{2} \left( dS^{(x)} \right)^2 \right] \\ &= 1 + d\tau \langle \hat{H} \rangle_{\hat{\Lambda}_\tau} - \sqrt{\frac{|U|}{2}} \sum_{\vec{r},x} dW_{\vec{r}}^{(x)} \text{tr}(\mathcal{R}O_{\vec{r}}) . \end{aligned} \quad (4.37)$$

Exprimer le numérateur de (4.36) demande une fois encore le développement des exponentielles, puis de recourir de manière répétée au théorème de Wick afin d'exprimer à l'aide de  $\mathcal{R}_\tau$  les valeurs moyennes d'opérateurs qui en découlent (jusqu'à trois corps). Ce calcul d'algèbre plutôt fastidieux ne présentant aucune difficulté particulière, nous omettons ses détails ici et donnons simplement son résultat :

$$\begin{aligned} \langle e^{d\hat{h}^{(a)}} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i e^{d\hat{h}^{(b)}} \rangle_{\hat{\Lambda}_\tau} &= \mathcal{R}_{ij} + \left[ \left( \mathbf{1} - \mathcal{R} \right) dh_{\text{SHF}}^{(a)} \mathcal{R} + \mathcal{R} dh_{\text{SHF}}^{(b)} \left( \mathbf{1} - \mathcal{R} \right) \right]_{ij} \\ &+ \left\{ -d\tau \langle \hat{H} \rangle_{\hat{\Lambda}_\tau} + d\tau |U| \sum_{\vec{r}} \left( \text{tr}(\mathcal{R}O_{\vec{r}}) \right)^2 + \sqrt{\frac{|U|}{2}} \sum_{\vec{r},x} dW_{\vec{r}}^{(x)} \text{tr}(\mathcal{R}O_{\vec{r}}) \right\} \mathcal{R}_{ij} \\ &+ d\tau \frac{|U|}{2} \sum_{\vec{r}} \text{tr}(\mathcal{R}O_{\vec{r}}) \left[ \left( \mathbf{1} - \mathcal{R} \right) O_{\vec{r}} \mathcal{R} + \mathcal{R} O_{\vec{r}} \left( \mathbf{1} - \mathcal{R} \right) \right]_{ij} , \end{aligned} \quad (4.38)$$

où nous avons repris la notation introduite dans (4.21)

$$dh_{\text{SHF}}^{(x)} = -\frac{d\tau}{2} h[\mathcal{R}] + \sqrt{\frac{|U|}{2}} \sum_{\vec{r}} dW_{\vec{r}}^{(x)} O_{\vec{r}},$$

avec  $h$  la matrice Hartree-Fock (4.20) du modèle de Hubbard. En combinant (4.37) et (4.38), nous finissons par atteindre l'objectif visé en aboutissant à une équation différentielle stochastique pour l'évolution en temps imaginaire de la matrice densité à un corps définissant chaque marcheur

$$d\mathcal{R} = (\mathbb{1} - \mathcal{R}) dh_{\text{SHF}}^{(a)} \mathcal{R} + \mathcal{R} dh_{\text{SHF}}^{(b)} (\mathbb{1} - \mathcal{R}). \quad (4.39)$$

Il s'agit là exactement du mouvement brownien sur lequel repose le schéma QMC gaussien formulé avec les règles d'Ito [25, 39, 40, 134]. Nous retrouvons également une dynamique similaire à celle (4.23) du champs moyen stochastique à poids positifs, avec néanmoins des matrices densités  $\mathcal{R}$  ne satisfaisant plus  $\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}$ .

En conclusion, nous avons montré que les échantillonnages QMC récemment suggérés pour le modèle de Hubbard sont en réalité issus du schéma à dynamique guidée originalement proposé dans le cadre de la chimie quantique par S. Zhang et H. Krakauer [54–56], et que nous avons précédemment adapté pour le modèle en couches nucléaire :

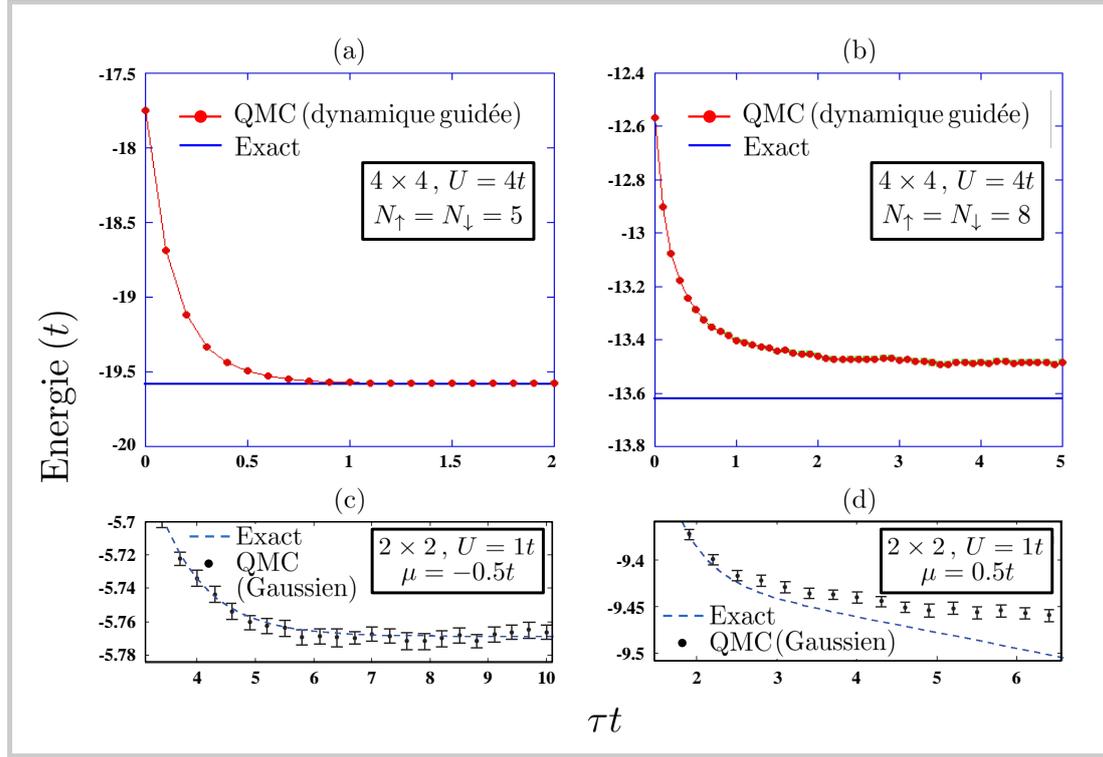
- le champs moyen stochastique à poids positifs s'obtient par une simple combinaison linéaire des états individuels constituant chaque marcheur dans l'approche guidée par un déterminant de Slater ;
- la méthode QMC à température finie basée sur l'évolution stochastique d'opérateurs densité gaussiens peut être dérivée en transcrivant dans l'espace de Liouville la dynamique stochastique guidée des déterminants de Slater.

Tous ces schémas sont exacts en moyenne et ne sont pas contaminés par le problème de signe avec le hamiltonien de Hubbard, quels que soient le couplage sur site  $U/t$  et le dopage du réseau.

#### 4.3.4 Mise en œuvre, résultats, et discussion

En garantissant des poids réels et positifs pour chaque réalisation, les approches QMC que nous venons de décrire devraient normalement amener à une reconstruction sans aucun biais des propriétés du modèle de Hubbard. Sur la figure 4.2 sont donnés les résultats pour l'énergie du système provenant de simulations QMC sur de petits « clusters » pour lesquels une diagonalisation du hamiltonien est accessible. La partie supérieure (figure 4.2 (a) et (b)) correspond au schéma à dynamique guidée par un déterminant de Slater d'essai  $|\Psi_T\rangle$  pour un réseau  $4 \times 4$ , un couplage  $U = 4t$  et un nombre  $N = 10$  (figure 4.2-(a)) ou  $N = 16$  (figure 4.2-(b)) d'électrons. La propagation en temps imaginaire est initiée par l'état test  $|\Psi_T\rangle$  qui correspond aux électrons libres (figure 4.2-(a)) ou à une solution Hartree-Fock (figure 4.2-(b)). À température finie, nous avons reporté sur la figure 4.2-(c) (resp. figure 4.2-(d)) les calculs QMC de la référence [155] avec l'ansatz gaussien (4.24, 4.27) pour un « cluster »  $2 \times 2$ , une faible interaction sur site  $U = t$  et un potentiel chimique  $\mu = -0.5t$  (resp.  $\mu = 0.5t$ ) associé à un réseau dopé en trous (resp. demi-rempli). Dans tous les cas, aucune manifestation du problème de signe n'émerge mais une déviation significative comparée à l'énergie exactes est observée au voisinage du mi-remplissage.

Pour tenter de comprendre l'origine de ces erreurs systématiques, nous nous baserons sur les fondements des approches QMC discutés au chapitre 1. Nous avons alors souligné que la



**Figure 4.2** – Évolution avec le temps imaginaire (figures (a) et (b)) ou l'inverse de la température  $T$  (figures (c) et (d)) de l'énergie moyenne pour le modèle de Hubbard sur de petites cellules de  $4 \times 4$  ou  $2 \times 2$  sites. Les résultats des schémas QMC sans problème de signe sont comparés avec ceux obtenus par diagonalisation de la matrice hamiltonienne.

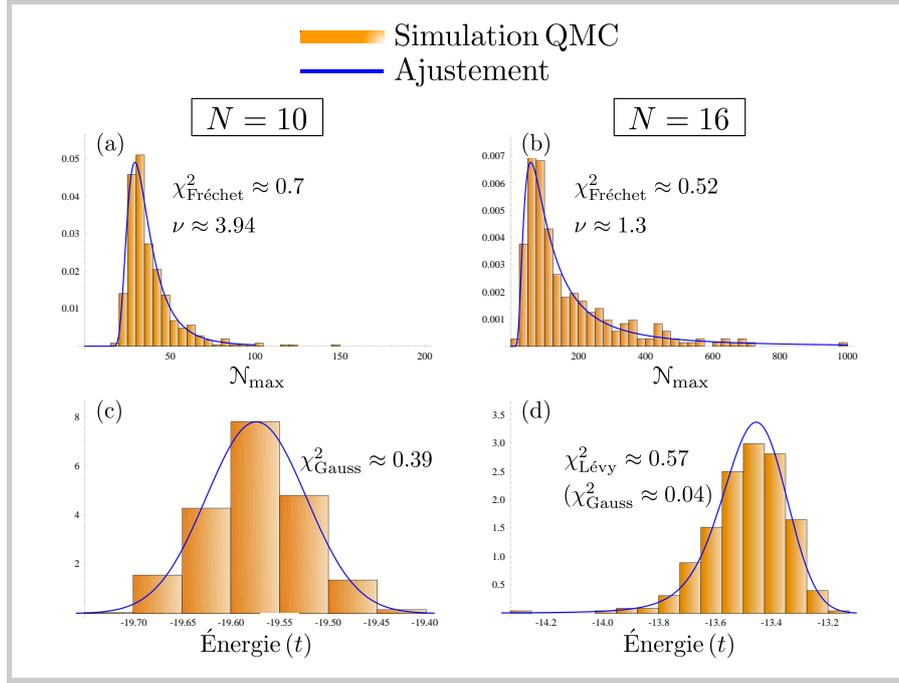
reconstruction de l'état fondamental  $|\Psi_G\rangle$  n'était valide qu'à condition de faire appel à des marcheurs en temps imaginaires ayant :

- un recouvrement de phase constante avec  $|\Psi_G\rangle$  ;
- une norme dont le second moment est fini afin que la variance d'une observable quelconque ne diverge pas.

Pour le modèle de Hubbard et le schéma à dynamique guidée, l'absence du problème de signe est garantie. En revanche, l'existence d'une borne supérieure à la distance quadratique moyenne entre l'état exact et une de ses réalisations stochastiques n'est pas assurée. En notant  $\mathcal{N}_\tau$  la norme d'un marcheur<sup>5</sup>, seul un examen du comportement asymptotique de sa distribution peut fournir une réponse : avec une décroissance selon une loi puissance  $1/\mathcal{N}_\tau^{1+\nu}$  quand  $\mathcal{N}_\tau$  tend vers l'infini, le second moment de  $\mathcal{N}_\tau$  n'est défini que pour  $\nu > 2$ . Dans ce cas, et seulement celui-ci, la méthodologie Monte-Carlo est applicable. Récemment, il a été proposé d'extraire l'exposant  $\nu$  à partir de l'analyse du maximum  $\mathcal{N}_{\max}$  de la norme des marcheurs d'une population de taille finie suffisamment grande [156]. En effet, selon le théorème des valeurs extrêmes [157], la distribution de Fréchet  $P_{\text{Fréchet}}$  est attendue pour  $\mathcal{N}_{\max}$  lorsque celle de la norme  $\mathcal{N}_\tau$  possède une queue en loi de puissance :

$$P_{\text{Fréchet}}(\mathcal{N}_{\max}) = \frac{\nu}{(\mathcal{N}_{\max}/\mathcal{N}_0)^{1+\nu}} \exp \left[ (\mathcal{N}_{\max}/\mathcal{N}_0)^{-\nu} \right]. \quad (4.40)$$

5. Nous renvoyons la section 1.2.3 du premier chapitre pour une définition précise de la norme  $\mathcal{N}_\tau$  des marcheurs suite à un échantillonnage selon leur poids  $\Pi_\tau$  par une reconfiguration de la population selon l'algorithme présenté pour les calculs QMC de modèle en couches (voir section 3.4).



**Figure 4.3** – Distributions des valeurs extrêmes de la norme  $N_{\max}$  (figures (a) et (b)) et de l'énergie (figures (c) et (d)) obtenues à l'issue de la simulation QMC à dynamique guidée du modèle de Hubbard pour un réseau  $4 \times 4$ , un couplage sur site  $U = 4t$ , et pour  $N = 10$  (à gauche) et  $N = 16$  (à droite) électrons respectivement à gauche et à droite. Dans chaque cas, les valeurs de  $\chi^2$  provenant de l'ajustement (en bleu) des histogrammes QMC (en orange) sont indiqués pour les différentes lois utilisées.

Les résultats de l'ajustement selon cette loi de la distribution empirique des valeurs maximales  $N_{\max}$  issues d'un grand nombre de simulations indépendantes, avec chacune un même nombre de marcheurs, sont représentés sur la figure 4.3. Pour  $N = 10$  électrons (figure 4.3-(a)) où l'énergie exacte de l'état fondamental est bien reproduite, nous trouvons un exposant  $\nu = 3.94 > 2$  qui valide le traitement QMC. En revanche, à mi-remplissage ( $N = 16$ , figure 4.3-(b)) où l'énergie reconstruite dévie d'environ 1% de sa valeur exacte,  $\nu = 1.3 < 2$  et l'échantillonnage Monte-Carlo n'est plus légitime. Nous avons par ailleurs vérifié que les énergies moyennes des différentes populations sont bien normalement distribuées pour  $N = 10$  (figure 4.3-(c)). À l'opposé, pour le réseau demi-rempli, elles suivent une loi de Lévy complètement asymétrique, comme attendu selon le théorème de la limite centrale généralisé lorsque la variance est infinie [38]. Par conséquent, l'erreur statistique relative sur la valeur moyenne ne tend plus vers zéro avec le nombre  $\mathcal{P}$  de populations comme  $\mathcal{P}^{-1/2}$ . Les barres d'erreur de la figure 4.2-(b), évaluées sous l'hypothèse d'une variance finie, n'ont donc aucun sens. Enfin, conformément à la discussion du chapitre 1, rappelons que la divergence du moment d'ordre 2 de la norme des marcheurs dans le schéma à dynamique guidée traduit le peuplement par le mouvement brownien du voisinage de la surface nodale associée à l'état d'essai. Les réalisations correspondantes sont d'ailleurs très aisément mises en évidence par des estimateurs locaux  $\langle \hat{O}_s \rangle_{\Psi_T, \Phi_\tau} = \langle \Psi_T | \hat{O}_s | \Phi_\tau \rangle / \langle \Psi_T | \Phi_\tau \rangle$  subissant subitement, et parfois pendant une très courte durée, de très grandes déviations. Ces trajectoires (appelées « spikes ») mettent en défaut l'algorithme simple (3.32) pour résoudre les équations différentielles stochastiques. Toutes les simulations avec le modèle de Hubbard ont ainsi été réalisées *via* une résolution numérique complexe s'appuyant sur un algorithme d'Euler (semi-implicite) couplé à une adaptation du pas de temps  $\Delta\tau$ . Notons que cette procédure ne peut être menée aussi naïvement que pour les

équations différentielles ordinaires en raison des termes fluctuants. Schématiquement, il s'agit toujours de comparer la solution obtenue pour un pas  $\Delta\tau$  à celle issue de la propagation en deux étapes successives de durée  $\Delta\tau/2$ , mais en s'assurant que les incréments des processus de Wiener mis en jeu au cours de ces deux étapes sont statistiquement équivalents à ceux initialement choisis pour le pas  $\Delta\tau$ . Ce schéma adaptatif a été implémenté par une méthode arborescente décrite dans la référence [158].

Concernant l'approche QMC basée sur l'*ansatz* gaussien  $\hat{\Lambda}_\tau$  (4.24, 4.27), rappelons que la démarche initialement adoptée repose sur l'établissement d'une équation de Fokker-Planck pour la distribution de probabilité des marcheurs  $\hat{\Lambda}_\tau$ . Celle-ci ne peut être obtenue à partir de la dynamique exacte de l'opérateur densité qu'à condition que les termes faisant intervenir le comportement asymptotique de la distribution soient négligeables. Logiquement, la présence de ces « termes de bord » a donc été invoquée pour expliquer les erreurs systématiques observées. Pour un « cluster »  $2 \times 2$ , un tel terme a d'ailleurs été identifié [155]. Toutefois, notre démonstration alternative montre qu'avec le même mouvement brownien que celui déduit de l'équation de Fokker-Planck, on retrouve bien en moyenne l'état corrélé exact à tout temps imaginaire. En conséquence, les « termes de bord » s'annulent nécessairement *collectivement*. Sur la base des résultats précédents avec le schéma à dynamique guidée, nous suspectons plutôt de nouveau l'apparition d'une décroissance en loi de puissance de la distribution de la norme  $\|\hat{\Lambda}_\tau\|$  des marcheurs<sup>6</sup> entraînant une divergence du second moment et de l'erreur quadratique moyenne sur l'état exact. Des travaux sont en cours pour vérifier une telle conjecture.

Dans l'état actuel, les schémas QMC à dynamique guidée, de champ moyen stochastique à poids positifs, ou basés sur des opérateurs densités gaussiens, restent contaminés par l'émergence d'erreurs systématiques avec le hamiltonien de Hubbard malgré leur immunité face au problème de signe. Par une projection des marcheurs sur les nombres quantiques de l'état fondamental, à l'issue de la dynamique [24, 155, 156, 159] ou à chaque reconfiguration de la population lors de son mouvement brownien [160, 161], des progrès substantiels dans la réduction voire l'élimination de ces erreurs ont été constatés. Ces méthodes permettent ainsi d'appréhender, au moins approximativement, des régimes et des tailles de réseaux jusqu'alors inaccessibles par les traitements QMC à champs auxiliaires [160]. La qualité de l'état reconstruit comparativement à celui découlant de l'approximation des chemins contraints reste toutefois à élucider.

---

6. Il s'agit ici de la norme dans l'espace de Liouville définie par  $\|\hat{\Lambda}\| = \sqrt{\text{Tr}(\hat{\Lambda}\hat{\Lambda}^\dagger)}$ .

---

---

# Conclusions

L'ESSENTIEL du travail exposé s'inscrit dans l'optique de disposer à terme d'une alternative à la diagonalisation directe du hamiltonien du modèle en couches nucléaire au travers des méthodes Monte-Carlo quantiques (QMC). Ce manuscrit présente les développements formels et pratiques d'un schéma stochastique original, basé sur un état d'essai variationnel de champ moyen enchevêtré par les symétries (SEMF). Celui-ci est utilisé pour initier, guider le mouvement brownien en temps imaginaire, mais aussi pour le contraindre suivant les techniques de référence permettant de contrôler le problème de phase. Au regard des résultats exploratoires rapportés, la méthode proposée semble offrir une reconstruction remarquable de la spectroscopie « yrast » des noyaux des couches de valence *sd* et *fp*, et même pour les noyaux de masse impaire alors que ceux-ci s'avèrent ordinairement bien plus pathologiques vis-à-vis du problème de phase. Une telle qualité s'explique par l'aptitude de l'approche SEMF à fournir un état d'essai efficace et qui offre déjà une approximation très convenable aux occupations des couches, moments multipolaires, et probabilités de transitions électromagnétiques. Ces observations nous ont d'ailleurs incité à débiter une étude SEMF de noyaux exotiques de Cobalt situés autour de la fermeture de couche  $N = 40$  en relation avec un programme expérimental mené dernièrement au GANIL.

La principale restriction dont souffre la méthode QMC à chemins contraints se révèle être le temps de calcul qu'elle réclame avec les moyens numériques à notre disposition. La continuité naturelle du travail présenté porte par conséquent sur une parallélisation des codes développés. Nous songeons également implémenter l'évaluation des probabilités de transitions électromagnétiques et de décroissances  $\beta$  (Fermi et Gamow-Teller) par l'intermédiaire d'un estimateur mixte dédié qui a été utilisé dans de récents calculs *ab initio* du type QMC en base position [162]. Pour l'avenir, il faudra envisager de dépasser l'approximation des estimateurs mixtes pour les valeurs moyennes d'observables en adaptant au cas nucléaire la technique de rétro-propagation brièvement décrite au premier chapitre. Nous suggérons par ailleurs d'étendre l'approche stochastique proposée afin d'autoriser la reconstruction des états excités. Pour un spin donné, l'effort nécessaire à la réalisation de ce projet réside dans la détermination de solutions variationnelles SEMF orthogonales à celles déjà obtenues pour l'état fondamental<sup>1</sup>. Enfin, notre méthode reconstitue actuellement les corrélations d'appariement entre les nucléons au travers du mouvement brownien des états à particules indépendantes. Il est alors envisageable de les inclure directement au sein du schéma de reconstruction en considérant des marcheurs de type Hartree-Fock-Bogoliubov au lieu de déterminants de Slater. La faisabilité

---

1. Par exemple, en notant de manière allégée  $|\Psi_0\rangle$  l'approximation SEMF pour un moment cinétique quelconque, le premier état excité s'obtiendra en minimisant l'énergie dans l'état  $\hat{Q}|\Psi_1\rangle$  où  $|\Psi_1\rangle$  revêt toujours la même forme (2.33) que  $|\Psi_0\rangle$  et où  $\hat{Q} = \mathbb{1} - |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|/(\Psi_0|\Psi_0)$  représente le projecteur sur le sous-espace orthogonal à celui-ci. Cet *ansatz* se généralise sans difficulté à la recherche du  $n$ -ième états, auquel cas  $\hat{Q}$  fait intervenir une somme sur les  $n - 1$  vecteurs déjà déterminés.

pratique d'un tel échantillonnage se voit cependant compromise par le temps de calcul exigé, qui serait assurément plus important, notamment en raison de la restauration indispensable des nombres de neutrons et de protons.

Nous nous sommes en outre intéressés aux approches QMC du modèle de Hubbard dont le diagramme de phase en géométrie bidimensionnel demeure largement débattu et d'un intérêt considérable pour la compréhension des matériaux supraconducteurs à haute température critique. Nous avons prouvé que la méthode à dynamique guidée par une fonction d'onde d'essai réelle conduit à un échantillonnage de l'état fondamental exempt de tout problème de signe, quels que soient l'interaction sur site et le taux de remplissage du réseau. Nous avons alors établi que les erreurs systématiques qui sont pourtant numériquement constatées pour de petits « clusters » trouvent leur origine dans une accumulation des marcheurs au voisinage de la surface nodale de l'état d'essai. Cette accumulation a pour conséquence le développement d'un comportement asymptotique en loi de puissance dans la distribution de la norme des marcheurs, entraînant une variance infinie de l'erreur sur l'état exact. Finalement, nous avons de plus démontré l'équivalence entre la dynamique QMC guidée par un déterminant de Slater et la méthode de champ moyen stochastique à poids positifs récemment suggérée. En étendant leur principe à des opérateurs densité de type Hartree-Fock, nous avons également pu retrouver le schéma QMC gaussien, introduit en 2004 pour échantillonner sans problème de signe les propriétés du modèle de Hubbard à température finie.

À ce stade, seule une amélioration de l'état d'essai qui guide les trajectoires browniennes pourrait éliminer les erreurs systématiques. L'approche variationnelle SEMF<sup>2</sup> apparaît de nouveau comme une candidate susceptible de fournir un tel état au regard des résultats encourageants auxquels elle a récemment mené avec le hamiltonien de Hubbard [63]. Le formalisme QMC ainsi obtenu serait alors complètement similaire à celui mis en œuvre dans ce mémoire pour la structure du noyau atomique.

Pour conclure, les approches QMC s'affichent comme des candidates attrayantes à la résolution du problème quantique à  $N$ -corps, permettant de contourner sa complexité exponentielle. Elles s'avèrent toutefois soumises à des hypothèses de validité strictes, souvent négligées, et se voient généralement contaminées par le problème de signe/phase qui les rend totalement inopérantes. À ce jour, aucun schéma stochastique n'est en mesure de garantir que soient respectés les critères de variance finie et de trajectoires à poids positifs qui sont nécessaires à une reconstruction exacte de l'état quantique d'un système de fermions en interaction.

---

2. Les nombres quantiques à restaurer sont dans ce cas la quasi-impulsion totale, le spin et sa projection sur un axe, ainsi que ceux associés aux symétries d'espace discrètes du réseau cristallin.

---

---

# Bibliographie

- [1] J. P. Elliott, *Proc. Roy. Soc. A* **245**, 128,562 (1958). 1, 35
- [2] G. Racah, *Phys. Rev.* **63**, 367 (1943). 1
- [3] P. Van Isacker, *Structure nucléaire : Acquis et défis*, Journée de Prospective IN2P3, La Colle sur Loup, (url : prospective2004.in2p3.fr/trans/vanisacker.ppt) (2004). 2
- [4] R. W. Richardson, *Phys. Rev.* **3**, 277 (1963). 2
- [5] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks, & R. Schiavilla, *Phys. Rev. C* **51**, 38 (1995), et référence citées. 1
- [6] L. D. Faddeev, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **39**, 1459 (1960). 2
- [7] L. D. Faddeev, *Sov. Phys.* **12**, 1014 (1961). 2
- [8] O. A. Yakubovsky, *Sov. J. Nucl. Phys.* **5**, 937 (1967). 2
- [9] J. Carlson, *Phys. Rev. C* **36**, 2026 (1987). 2, 15
- [10] R. B. Wiringa, S. C. Pieper, J. Carlson, & V. R. Pandharipande, *Phys. Rev. C* **62**, 014001 (2000). 2, 15
- [11] S. C. Pieper & R. B. Wiringa, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **51**, 53 (2001). 2, 15
- [12] S. C. Pieper, *Nucl. Phys. A* **751**, 516 (2005). 2, 15
- [13] P. Navrátil, J. P. Vary, & B. R. Barrett, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5728 (2000). 2, 34
- [14] P. Navrátil, J. P. Vary, & B. R. Barrett, *Phys. Rev. C* **62**, 054311 (2000). 2, 34
- [15] P. Navrátil, S. Quaglioni, I. Stetcu, and & R. Barrett, *e-print : nucl-th/0904.0463*. 2, 34
- [16] H. Kamada, A. Nogga, W. Glöckle, E. Hiyama, M. Kamimura, K. Varga, Y. Suzuki, M. Viviani, A. Kievsky, S. Rosati, J. Carlson, S. C. Pieper and R. B. Wiringa, P. Navrátil, B. R. Barrett, N. Barnea, W. Leidemann, & G. Orlandini, *Phys. Rev. C* **64**, 044001 (2001). 2
- [17] P. J. Brussaard & P. W. M. Glaudemans, *Shell-Model Applications in Nuclear Spectroscopy*, North Holland, Amsterdam (1977). 2, 34
- [18] K. L. G. Heyde, *The Nuclear Shell Model*, Springer-Verlag (1994). 2, 34
- [19] A. Volya & V. Zelevinsky, *Phys. Rev. C* **74**, 064314 (2006). 2
- [20] N. Michel, W. Nazarewicz, M. Płoszajczak, & T. Vertse, *J. Phys. G : Nucl. Part. Phys.* **36**, 013101 (2009). 2
- [21] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961). 2
- [22] S. E. Koonin, D. J. Dean, & K. Langanke, *Phys. Rept.* **278**, 1 (1997). 3, 16, 65, 67
- [23] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987). 3, 86
- [24] O. Juillet, *New J. Phys.* **9**, 163 (2007). 3, 91, 93, 100
- [25] J. F. Corney & P. D. Drummond, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 260401 (2004). 3, 14, 94, 97

- [26] A. Messiah, *Mécanique quantique, tome 2*, Dunod, Paris (2003). 6
- [27] D. M. Ceperley & M. H. Kalos, dans *Monte-Carlo Methods in Statistical Physics*, Springer-Verlag, Heidelberg (1979). 8, 23, 29, 30
- [28] M. H. Kalos, D. Levesque, & L. Verlet, *Physical Review A : General Physics* **9**, 2178 (1974). 8
- [29] D. M. Ceperley & B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980). 8
- [30] J. G. Zabolitsky & M. H. Kalos, *Nucl. Phys. A* **356**, 114 (1981). 8
- [31] D. M. Ceperley & B. J. Alder, *Science* **231**, 555 (1986). 8
- [32] R.C. Grimm and R.G. Storer, *J. Comput. Phys.* **7**, 134 (1971). 8
- [33] J. B. Anderson, *J. Chem. Phys.* **63**, 1499 (1975). 8
- [34] J. B. Anderson, *J. Chem. Phys.* **65**, 4122 (1976). 8
- [35] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, & G Rajagopal, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 33 (2001). 8
- [36] J. P. Blaizot & G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts (1986). 8, 24, 36, 38, 41, 72, 92, 94
- [37] T. S. Biró & A. Jacovàk, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 132302 (2004). 11
- [38] F. Bardou, J.-P. Bouchaud, A. Aspect, & C. Cohen-Tannoudji, *Lévy Statistics and Laser Cooling : How Rare Events Bring Atoms to Rest*, Cambridge University Press, Massachusetts (2002). 12, 13, 99
- [39] J. F. Corney & P. D. Drummond, *J. Phys. A : Math. Gen.* **39**, 269 (2006). 14, 94, 95, 97
- [40] J. F. Corney & P. D. Drummond, *Phys. Rev. B* **73**, 125112 (2006). 14, 94, 97
- [41] P. D. Drummond & C. W. Gardiner, *J. Phys. A : Math. Gen.* **13**, 2353 (1980). 14
- [42] C. W. Gardiner, *Quantum Noise*, Springer-Verlag, Berlin (2000). 14
- [43] I. Carusotto, Y. Castin, & J. Dalibard, *Physical Review A : General Physics* **63**, 023606 (2001). 14
- [44] W. Purwanto, S. Zhang, & H. Krakauer, *J. Chem. Phys.* **130**, 094107 (2009). 15
- [45] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, & R.T. Scalettar, *Phys. Rev. B* **40**, 506 (1989). 16
- [46] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, Springer-Verlag, Berlin (1983). 17
- [47] G. Sugiyama & S. E. Koonin, *Ann. Phys. (N.Y.)* **168**, 1 (1986). 17
- [48] F. F. Assaad, dans : *Lecture notes of the Winter School on Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems : From Theory to Algorithms*, Vol. 10, p. 99, ed. par J. Grotendorst, D. Marx & A. Muramatsu (Publication Series of the John von Neumann Institute for Computing, 2002). 17
- [49] R. D. Stratonovich, *Sov. Phys. Dokl.* **2**, 416 (1958). 17, 72
- [50] J. Hubbard, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 77 (1959). 17, 72
- [51] O. Juillet & Ph. Chomaz, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 142503 (2002). 18
- [52] O. Juillet, *New Fermionic Quantum Monte-Carlo Methods with Stochastic Mean-Field Wave-Functions*, dans *Mémoire d'habilitation à diriger les recherches*, Université de Caen/Basse-Normandie (2007), communication privée. 18, 93
- [53] O. Juillet, F. Gulminelli, & Ph. Chomaz, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 160401 (2004). 18
- [54] S. Zhang & H. Krakauer, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 136401 (2003). 18, 26, 97
- [55] W. A. Al-Saidi, S. Zhang, & H. Krakauer, *J. Chem. Phys.* **124**, 224101 (2006). 18, 26, 97

- [56] W. Purwanto, H. Krakauer, & S. Zhang, *Phys. Rev. B* **80**, 214116 (2009). 18, 26, 97
- [57] W. Krauth, *Statistical Mechanics : Algorithms and Computations*, Oxford University Press, USA (2006). 18
- [58] C. Wu & S.-. Zhang, *Phys. Rev. B* **71**, 155115 (2005). 23, 24
- [59] S. Zhang, J. Carlson, & J.E. Gubernatis, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3652 (1995). 24, 25, 89
- [60] S. Zhang, J. Carlson, & J.E. Gubernatis, *Phys. Rev. B* **55**, 7464 (1997). 24, 25, 30, 89
- [61] S. Zhang, dans *Quantum Monte-Carlo Methods in Physics and Chemistry*, Kluwer Academic, Dordrecht (1999). 24, 89
- [62] W. Purwanto & S. Zhang, *Phys. Rev. E* **70**, 056702 (2004). 30
- [63] O. Juillet & R. Frésard, *e-print : cond-mat/1208.6277*. 31, 38, 88, 90, 102
- [64] M. Goeppert Mayer, *Phys. Rev.* **75**, 1969 (1949). 32
- [65] O. Haxel, J. H. D. Jensen, & H. E. Suess, *Phys. Rev.* **75**, 1766 (1949). 32
- [66] P. Ring & P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, chapter 2, page 44, Springer-Verlag, New-York/Berlin (2003). 32
- [67] S. G. Nilsson, *Dan. Mat. Fys. Medd.* **29**, 16 (1955). 33
- [68] E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, J. Retamosa, & A. P. Zuker, *Phys. Rev. C* **59**, 2033 (1999). 33
- [69] E. Caurier, A. P. Zuker, A. Poves, & G. Martínez-Pinedo, *Phys. Rev. C* **50**, 225 (1994). 33
- [70] D. J. Dean, M. T. Ressel, M. Hjorth-Jensen, E. Koonin, K. Langanke, & A. P. Zuker, *Phys. Rev. C* **59**, 2474 (1999). 33, 65
- [71] K. A. Brueckner, C. A. Levinson, & H. M. Mahmoud, *Phys. Rev.* **95**, 217 (1954). 34
- [72] J. Goldstone, *Proc. Roy. Soc. A* **293**, 267 (1957). 34
- [73] L. Coraggio, A. Covello, A. Gargano, N. Itaco, & T. T. S. Kuo, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **62**, 135 (2009). 34
- [74] B. H. Wildenthal, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **11**, 5 (1984). 35, 46, 66, 77
- [75] M. Honma, T. Otsuka, B. A. Brown, & T. Mizusaki, *Phys. Rev. C* **65**, 061301 (2002). 35, 50, 67, 79
- [76] M. Honma, T. Otsuka, B. A. Brown, & T. Mizusaki, *Eur. Phys. J. A* **25**, (Suppl. 1) 499 (2005). 35, 50, 67, 79
- [77] R. Machleidt, *Adv. Nucl. Phys.* **19**, 189 (1989). 35
- [78] M. Dufour & A. P. Zuker, *Phys. Rev. C* **54**, 1641 (1996). 35
- [79] E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, & A. P. Zuker, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 427 (2005). 35
- [80] E. Caurier, G. Matinez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, & A. P. Zuker, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 427 (2005). 35, 46, 77
- [81] E. Caurier, *Shell Model Code ANTOINE*, IReS, Strasbourg (1989-2004). 35, 46, 77
- [82] E. Caurier & F. Nowacki, *Acta Phy. Pol. B* **30**, 705 (1999). 35, 46, 77
- [83] F. Nowacki & E. Caurier, *Coupled Code NATHAN*, IReS, Strasbourg (1995). 35
- [84] F. Nowacki, *Mémoire de thèse*, IReS, Université Louis Pasteur, Strasbourg (1996). 35
- [85] T. H. R. Skyrme, *Phil. Mag.* **1**, 1043 (1956). 37
- [86] K. W. Schmid, F. Grümmer, & A. Faessler, *Phys. Rev. C* **29**, 291 (1984). 37
- [87] K. W. Schmid & F. Grümmer, *Rep. Prog. Phys.* **50**, 731 (1987). 37, 41

- [88] T. Hjelt, K. W. Schmid, E. Hammarén, & A. Faessler, *Eur. Phys. J. A* **7**, 201 (2000). 37
- [89] M. Hamermesh, *Group Theory and its Application to Physical Problems*, Addison Wesley (1964). 37
- [90] J. A. Sheikh & P. Ring, *Nucl. Phys. A* **665**, 71 (2000). 38
- [91] G. E. Scuseria, C. A. Jiménez-Hoyos, T. M. Henderson, K. Samanta, & J. K. Ellis, *J. Chem. Phys.* **135**, 124108 (2011). 38, 41
- [92] C. A. Jiménez-Hoyos, T. M. Henderson, T. Tsuchimochi, & G. E. Scuseria, *J. Chem. Phys.* **136**, 164109 (2012). 38, 41
- [93] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, & B. P. Flannery, *Numerical Recipes in FORTRAN; The Art of Scientific Computing 2nd*, Cambridge University Press, New York (1993). 43
- [94] B. Cederwall *et al.*, *Nature* **469**, 68 (2011). 46
- [95] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, & M. Rafalski, *Phys. Rev. C* **81**, 054310 (2010). 46
- [96] K. Langanke, D. J. Dean, S. E. Koonin, & P. B. Radha, *Nucl. Phys. A* **613**, 253 (1997). 46, 65
- [97] S. Cohen and D. Kurath, *Nucl. Phys.* **73**, 1 (1965). 50
- [98] S. Cohen and D. Kurath, *Nucl. Phys. A* **101**, 1 (1967). 50
- [99] A. Dijon, E. Clément, G. De France, P. Van Isacker, *et al.*, *Phys. Rev. C* **83**, 064321 (2011). 51, 52
- [100] A. Dijon, *Évolution de la collectivité autour du  $^{68}\text{Ni}$  : rôle des états intrus*, Mémoire de thèse, Université de Caen/Basse-Normandie, GANIL, Caen (2012). 51, 52
- [101] O. Sorlin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 092501 (2002). 52
- [102] G. H. Lang, C. W. Johnson, S. E. Koonin, & W. E. Ormand, *Phys. Rev. C* **48**, 1518 (1993). 63, 65, 66
- [103] S. P. Pandya, *Phys. Rev.* **103**, 956 (1956). 63
- [104] W. E. Ormand, dans *Proceedings of International Workshop on Structure and Dynamics of Quantum Many-Body Systems*, Aizn, Japon (1994). 65
- [105] C. W. Johnson & D. J. Dean, *Phys. Rev. C* **61**, 044327 (2000). 65, 66
- [106] Y. Alhassid, D. J. Dean, S. E. Koonin, G. Lang, & W. E. Ormand, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 613 (1994). 67, 68
- [107] G. Stoitcheva, W. E. Ormand, D. Neuhauser, & D. J. Dean, *e-print : nucl-th/0708.2945*. 65, 66, 68
- [108] K. Langanke, D.J. Dean, P. B. Radha, Y. Alhassid, & S.E. Koonin, *Phys. Rev. C* **52**, 718 (1995). 65
- [109] Y. Alhassid, L. Fang, & H. Nakada, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 082501 (2008). 65
- [110] P. B. Radha, D. J. Dean, S. E. Koonin, T. T. S. Kuo, J. Retamosa, & P. Vogel, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2642 (1996). 65
- [111] C. Özen, K. Langanke, G. Martinez-Pinedo, & D. J. Dean, *Phys. Rev. C* **75**, 064307 (2007). 65
- [112] A. Poves & A. P. Zuker, *Phys. Rept.* **70**, 235 (1981). 67
- [113] S. Rombouts, *A Monte-Carlo Method for Fermionic Many-Body Problems*, Mémoire de thèse, Université de Gent (1997). 68
- [114] N. Rom, D. M. Charutz, & D. Neuhauser, *Chem. Phys. Lett.* **270**, 382 (1997). 68

- [115] R. Baer, M. Head-Gordon, & D. Neuhauser, *J. Chem. Phys.* **109**, 6219 (1998). 68
- [116] N. Rom, E. Fattal, A. K. Gupta, E. A. Carter, & D. Neuhauser, *J. Chem. Phys.* **109**, 8241 (1998). 68
- [117] W. E. Ormand, *Nuclear Physics : the Monte-Carlo Way*, Final Report : 06-LW-013, Lawrence-Livermore National Laboratory (url : <https://e-reports-ext.llnl.gov/pdf/370625.pdf>) (2009). 68
- [118] G. Puddu, *Eur. Phys. J. A* **9**, 171 (2000). 68
- [119] G. Puddu, *Phys. Rev. C* **67**, 051304 (2003). 68
- [120] G. Puddu, *Eur. Phys. J. A* **21**, 227 (2004). 68
- [121] G. Puddu, *Acta Phy. Pol. B* **35**, 2121 (2004). 68
- [122] M. Honma, T. Mizusaki, & T. Otsuka, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1284 (1995). 68
- [123] M. Honma, T. Mizusaki, & T. Otsuka, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3315 (1996). 68
- [124] T. Mizusaki, M. Honma, & T. Otsuka, *Phys. Rev. C* **53**, 2786 (1996). 68
- [125] T. Otsuka<sup>1</sup>, M. Honma, & T. Mizusaki, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1588 (1998). 68, 69
- [126] T. Otsuka, Y. Utsuno, T. Mizusaki, & M. Honma, *Nucl. Phys. A* **682**, 155 (2001). 68, 69
- [127] N. Shimizu, T. Abe, Y. Tsunoda, Y. Utsuno, T. Yoshida, T. Mizusaki, M. Honma, & T. Otsuka, *e-print : nucl-th/1207.4554*. 68
- [128] H. F. Trotter, *Proc. Am. Math. Soc.* **10**, 545 (1959). 72
- [129] M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **51**, 183 (1976). 72
- [130] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. M. Teller, & E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953). 74
- [131] W. K. Hastings, *Monte-Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications*, *Biometrika* 57, 97, Berlin (1970). 74
- [132] T. Aimi & M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 084709 (2007). 74
- [133] M. C. Buonaura & S. Sorella, *Phys. Rev. B* **57**, 11446 (1998). 74
- [134] P. R. Corboz, *Simulations of Strongly Correlated Fermions and Bosons*, *Mémoire de thèse*, Institute for Theoretical Physics, ETH Zurich (2008). 74, 94, 97
- [135] L. Devroye, *Non-Uniform Random Variate Generation*, chapitre 5, Springer-Verlag, New York (1986). 76
- [136] S. Pittel & B. Thakur, *Rev. Mex. Fís.* **55**, 108 (2009). 79, 83
- [137] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. (London)* **276**, 238 (1963). 86
- [138] M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963). 86
- [139] J. Kanamori, *Prog. of Theor. Phys. (Kyoto)* **30**, 275 (1963). 86
- [140] F. F. Assaad & M. Imada, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3176 (1996). 87
- [141] A. B. Harris & R. V. Lang, *Phys. Rev.* **157**, 295 (1967). 87
- [142] K. Yosida, *Theory of Magnetism*, Springer-Verlag, Berlin (1998). 87
- [143] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, & M. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996). 87
- [144] A. Avella & F. Mancini (ed.), *Theoretical methods for Strongly Correlated Systems*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (2011). 87
- [145] M. Raczkowski, R. Frésard, & A. M. Oleś, *Eur. Phys. Lett.* **76**, 128 (2006). 87
- [146] A. Barbieri, D. M. Deaven, & D. S. Rokhsar, *Phys. Rev. B* **45**, 288 (1992). 87
- [147] T. Giamarchi & C. Lhuillier, *Phys. Rev. B* **76**, 128 (1990). 87
- [148] M. Dzierzawa & R. Frésard, *Z. Phys. B* **91**, 245 (1993). 87

- [149] B. Edegger, V. N. Muthukumar, & C. Gros, *Adv. Phys.* **56**, 927 (2007). 87
- [150] D. Tahara & M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 114701 (2008). 87
- [151] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, & S. Uchida, *Nature* **375**, 561 (1995). 88
- [152] E.H. Lieb and F.Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968). 89
- [153] S. Zhang, J. Carlson, & J.E. Gubernatis, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4486 (1997). 89
- [154] C.-C. Chang & S. Zhang, *Phys. Rev. B* **80**, 165101 (2008). 89
- [155] P. R. Corboz, A. Kleine, F. F. Assaad, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, & M. Troyer, *Phys. Rev. B* **77**, 085108 (2008). 97, 100
- [156] O. Juillet, *Workshop : The stochastic Schrödinger equations in selected physics problems*, L'Espace de Structure Nucléaire Théorique, CEA/SPhN, Gif-sur-Yvette (2011). 98, 100
- [157] S. Kotz & S. Nadarajah, *Extreme Value Distributions : Theory and Applications*, Imperial College Press, Londres (2000). 98
- [158] V. Sotiropoulos & Y. N. Kaznessis, *J. Chem. Phys.* **128**, 014103 (2008). 100
- [159] F. F. Assaad, P. Werner, P. Corboz, E. Gull, & M. Troyer, *Phys. Rev. B* **72**, 224518 (2005). 100
- [160] T. Aimi & M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 113708 (2007). 100
- [161] T. Aimi & M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 084709 (2007). 100
- [162] M. Pervin, S. C. Pieper, & R. B. Wiringa, *Phys. Rev. C* **76**, 064319 (2007). 101

---

---

# Remerciements

ÉTRANGEMENT, l'expérience montre que les remerciements constituent bien souvent la première partie d'une thèse — et parfois même la seule — à être lue. Il s'agit probablement de la raison pour laquelle d'aucuns mettent à profit cette tribune pour faire part de leur conception de la science ou du monde, ou pour y faire passer des messages plus personnels, des anecdotes, n'ayant généralement de sens que pour le public visé. Au risque de décevoir le lecteur avide de ce genre de prose, je ne tenterai aucunement ici de faire preuve d'esprit ou d'originalité et me contenterai d'utiliser ce chapitre pour sa fonction première, à savoir exprimer simplement ma reconnaissance envers les personnes sans lesquelles ce travail ne serait pas ce qu'il est.

Mes tous premiers remerciements s'adressent à Jean-Claude Steckmeyer et Dominique Durand, directeurs successifs du LPC, pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire et permis de mener ma thèse à son terme dans de si bonnes conditions.

Je tiens également à exprimer ma gratitude envers chacun des membres du jury : Dany Davesne pour l'avoir présidé, Kris Heyde et Thomas Duguet pour avoir rapporté mon travail, ainsi que Piet Van Isacker pour l'avoir examiné et pour nos échanges. Je les remercie sincèrement d'avoir accepté cette tâche, du temps qu'il ont consacré à étudier le présent manuscrit, et de tous leurs commentaires et suggestions.

Ma plus profonde reconnaissance va bien sûr à Olivier Juillet, simplement pour avoir été le directeur de thèse qu'il a été : je n'aurais pu espérer être mieux encadré. Sans m'attarder d'avantage sur ses qualités scientifiques et humaines évidentes, j'ai en effet trouvé en lui un interlocuteur ouvert à toutes mes questions et sollicitations, qui a toujours assouvi mon goût de la discussion, et dont la rigueur a constitué et constituera une ligne de conduite à suivre, une philosophie. Nos conversations ont été pour moi, depuis le stage de Master 1 (et même avant), aussi enrichissantes que passionnantes. Au regard de tout ce qu'il m'a apporté, ma dette envers lui sera longue à rembourser, et ces quelques mots ne sauraient exprimer avec justesse la gratitude que j'éprouve à son égard. J'ose seulement espérer avoir été digne de la confiance qu'il m'a accordée.

Je désirerais ensuite rendre hommage à tous les membres du LPC pour faire de ce laboratoire un cadre professionnel si agréable et plaisant, et dont certains sont devenus plus que des collègues. Sans nécessairement avoir besoin de chercher bien longtemps, je pourrais aisément trouver une raison de nommer chacun ici, que ce soit pour son rôle (même le plus secondaire) dans mon travail, ou simplement pour des discussions agréables, diverses, voire anodines. Je vais évidemment m'abstenir. J'aimerais néanmoins adresser une pensée particulière aux thésards dont j'ai eu l'occasion de croiser la route à un moment ou un autre ; spécialement à ceux qui ont cheminé à mes côtés durant ces huit années à l'université de Caen, notamment Arnaud,

Thomas, Florent (a.k.a. Kiki), Claire, Sylvain, Olivier ; ainsi qu'à ceux qui ont partagé mon bureau, Benjamin, Charlotte, Élodie, Matthieu et plus récemment Jérémie. Par ailleurs, je profite de ce paragraphe pour souhaiter bon courage à mon « successeur » (si j'ose dire) Alexandre.

Une autre personne méritant amplement de voir son nom cité dans ce chapitre est Henni Ouerdane, aussi bien pour m'avoir fait profiter de son expérience et délivré tant de conseils utiles, que pour son soutien moral et ses encouragements. Je remercie également toutes les personnes n'entrant dans aucune des catégories précédentes, par exemple les habitués de la pause rencontrés au fil des journées devant le noyau central, peu importe la météo. Merci (et désolé) aussi à ceux que j'oublie mais qui mériteraient de figurer dans ces quelques lignes.

Mes remerciements les plus nourris et les plus chaleureux sont bien évidemment destinés à ma famille, pour m'avoir offert la possibilité de faire mes propres choix, et pour m'avoir toujours soutenu et encouragé à suivre ma voie. J'éprouve également, pour les mêmes raisons, une sincère gratitude envers mes beaux-parents : un énorme merci à eux pour leurs encouragements ainsi que d'avoir constamment cru en moi.

Enfin, je terminerai par la personne dont le rôle a sans conteste été le plus déterminant, pas seulement durant ces trois années de thèse, mais depuis le début. Sans elle, je suis intimement convaincu que ce travail ne serait pas ce qu'il est, et moi non plus. Elle a toujours été présente, m'a accompagné dans les bons moments comme les mauvais, depuis les révisions des cours de mécanique quantique jusqu'à la rédaction de ce manuscrit. Elle n'a eu de cesse de me soutenir, de m'encourager, de me reconforter, et a d'ailleurs été régulièrement contrainte de supporter mon humeur « changeante ». Je m'en excuse et l'en remercie du fond du cœur. Ce que je lui dois dépasse largement le cadre professionnel : je lui suis profondément reconnaissant de partager ma vie au quotidien. Sa présence à mes côtés a continuellement constitué une source de force pour moi. Plus que des remerciements, cette thèse lui est dédiée.



## Approches Monte-Carlo quantiques à chemins contraints pour le modèle en couches nucléaire

Le modèle en couches constitue aujourd'hui un cadre théorique de référence pour appréhender les propriétés des noyaux à basse énergie. Son applicabilité demeure toutefois limitée par une croissance rédhibitoire de la dimension de l'espace des états aussi bien avec le nombre de couches de valence qu'avec le nombre de nucléons. Les méthodes Monte-Carlo quantiques (QMC) permettent *a priori* de contourner une telle difficulté en offrant une alternative à la diagonalisation du hamiltonien. Elles reposent sur une reformulation stochastique de l'équation de Schrödinger qui ramène le problème à  $N$ -corps à un ensemble de problèmes à un corps, numériquement solubles, et décrivant des particules indépendantes évoluant chacune dans un champ extérieur fluctuant. L'originalité de l'échantillonnage QMC proposé dans ce mémoire réside dans l'utilisation d'une approche variationnelle, avec restauration des symétries avant variation, pour guider le mouvement brownien et pour le contraindre afin de contrôler le problème de phase inhérent aux schémas QMC pour des fermions en interaction. Dans les couches *sd* et *fp* et avec les interactions résiduelles réalistes, nous avons ainsi pu obtenir une spectroscopie « *yrast* » en excellent accord avec les résultats issus de la diagonalisation du hamiltonien.

En outre, une ouverture vers les systèmes d'électrons fortement corrélés est présentée au travers de nouveaux schémas QMC récemment suggérés pour le modèle de Hubbard en géométrie bidimensionnelle. Contrairement aux échantillonnages traditionnels, ils garantissent des trajectoires à poids positifs quel que soit le régime considéré. Nous avons prouvé que ces méthodes sont en réalité reliées à l'approche stochastique mise en œuvre pour le modèle en couches. L'origine des erreurs systématiques qu'exhibent ces schémas, pourtant exempts de problème de signe avec le hamiltonien de Hubbard, est par ailleurs élucidée.

**Mots clés :** Structure nucléaire, Méthodes Monte-Carlo quantiques, Problème de signe/phase, Approches variationnelles, Symétries brisées (physique), Modèle en couches (physique nucléaire), Modèle de Hubbard.

---

### A Constrained-Path Quantum Monte-Carlo approach for the Nuclear Shell Model

The shell model is a powerful theoretical framework for studying the nuclear structure. Unfortunately, the exponential scaling of the many-body space with the number of nucleons or the number of valence levels strongly restricts its applicability. The Quantum Monte-Carlo (QMC) methods may then be considered as a possible alternative to the direct diagonalization of the Hamiltonian. They are based on a stochastic reformulation of the Schrödinger equation to reduce the many-body problem to a set of one-body problems, numerically tractable, describing independent particles that evolve in fluctuating external fields. The originality of the QMC scheme proposed in the present thesis is the use of a variational approach, with symmetry restoration before variation, to guide the Brownian motion and to constrain it in order to control the sign/phase problem that generally occurs in the QMC samplings for fermions. The “*yrast*” spectroscopy we obtain for *sd*- and *fp*-shell nuclei with realistic residual interactions agree remarkably well with the results from an exact diagonalization of the Hamiltonian.

Moreover, an openness towards strongly correlated electronic systems is presented through new QMC schemes recently developed for the two-dimensional Hubbard model. In contrast with the traditional samplings, they guarantee positive-weighted trajectories regardless the on-site interaction strength or the doping of the lattice. We demonstrate that these schemes are in fact related to the stochastic approach applied to the nuclear shell model. The origin of the systematic errors that emerge in these methods, although free from sign/phase problem with the Hubbard Hamiltonian, is also discussed.

**Keywords :** Nuclear structure, Quantum Monte-Carlo methods, Sign/phase problem, Variational approaches, Broken symmetries (physics), Nuclear shell theory, Hubbard model.

---

**Discipline :** Constituants élémentaires et physique théorique

---