

Stage M2 année 2018-2019

Nom du Laboratoire : Laboreatoire de Physique Théorique	
Code d'identification CNRS : UMR 5152	
Nom du responsable de stage : Mohamed Belkacem	
E-mail : belkacem@irsamc.ups-tlse.fr	Téléphone : 05 61 55 65 01
Page web : http://www.lpt.ups-tlse.fr/	
Lieu du stage : LPT - IRSAMC, Université Paul Sabatier, 118 Route de Narbonne, 31400 Toulouse	
Stage pouvant déboucher sur une thèse.	
Gratification de stage	

Validation de STDHF par comparaison à MCTDHF

Contexte scientifique :

L'approche STDHF, pour "Stochastic-Time-Dependent-Hartree-Fock", développée par le groupe Agrégats du laboratoire de physique théorique de Toulouse, est une approche qui va au-delà des approches champ-moyen type TDDFT (Time-Dependent-Density-Functional-Theory) dans l'approximation LDA (Local-Density-Approximation) en incorporant des corrélations dynamiques par un traitement stochastique d'un ensemble de trajectoires champ-moyen. Cette approche, développée formellement il y a plus de deux décennies, a été reformulée récemment en terme de fonctions d'ondes, ce qui a permis l'application de cette dernière à plusieurs cas test dans des modèles simplifiés à une dimension. L'approche STDHF, quoique validée dans un modèle exactement soluble à très hautes énergies d'excitation, manque de confrontation et de validation à des résultats exacts dans des cas réels.

Par ailleurs, l'approche MCTDHF, pour "Multi-Configuration-Time-Dependent-Hartree-Fock", est une approche qui tend à résoudre l'équation de Schrödinger dans le cas du problème à N corps de manière exacte (numériquement parlant). En utilisant une fonction d'onde multi-configurationnelle, la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps par une méthode variationnelle donne lieu à un ensemble d'équations du mouvement couplées pour les coefficients et pour les fonctions de base utilisés dans l'expansion de la fonction d'onde multi-configurationnelle. Cette méthode est exacte par construction dans la mesure où suffisamment de fonctions de base sont utilisées dans l'expansion. Elle est également formellement proche de STDHF qui peut être vu comme une approximation de cette théorie.

Le but du stage est de procéder à des calculs MCTDHF qui seront utilisés pour confrontation et/ou validation avec l'approche STDHF. Pour cela, un code MCTDHF fourni par une partie tiers sera adapté au modèle simplifié à une dimension utilisé dans l'approche STDHF, et les résultats de cette approche seront confrontés aux résultats produits par STDHF.

- [1] E. Suraud, P.G. Reinhard, New J. Phys. 16 (2014) 063066
- [2] L. Lacombe, P.G. Reinhard, E. Suraud, P. M. Dinh, Ann. Phys. (NY) 373 (2016) 216
- [3] D. Hochstuhl, C.M. Hinz, and M. Bonitz, Eur. Phys. J. Special Topics 223 (2014) 177