

FR 7700 30 9

IPNO-TH-76-20

EQUATIONS DE HARTREE-FOCK DEPENDANT DU TEMPS

D. VAUTHERIN

I. INTRODUCTION

Les équations de Hartree-Fock dépendant du temps ont été dérivées dès 1930 par Dirac [1]. Toutefois ce n'est que récemment qu'elles ont pu être intégrées numériquement [2], possibilité qui présente un très grand intérêt pour la physique des ions lourds. Ces équations sont une forme approchée des équations du mouvement dans laquelle on suppose qu'à chaque instant t le système est décrit par un déterminant de Slater

$$\Phi(r_1, r_2, \dots, r_A; t) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det \{\varphi_i(r_j)\} \quad (1)$$

A étant le nombre de nucléons et φ_i les orbitales à une particule. Une façon très commode d'obtenir ces équations consiste à observer que l'équation de Schrödinger peut être déduite du principe variationnel $\delta I / \delta \varphi_i^* = 0$, l'intégrale d'action I étant [3,4,5]

$$I = \int_{t_0}^{t_1} dt \langle \Phi(t) | i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \Phi(t) \rangle \quad (2)$$

Pour une fonction d'onde du type (1) cette intégrale d'action se réduit à

$$I = \int_{t_0}^{t_1} dt \left\{ i \hbar \left[\sum_{i=1}^A \int \varphi_i^*(r, t) \dot{\varphi}_i(r, t) d^3r \right] - E(\varphi_i^*, \varphi_i) \right\} \quad (3)$$

où E est l'énergie Hartree-Fock $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$. En écrivant que $\delta E / \delta \varphi_i^* = 0$ il vient

$$i \hbar \dot{\varphi}_i = \frac{\partial E}{\partial \varphi_i^*} = W \varphi_i \quad i=1, 2, \dots, A \quad (4)$$

l'opérateur W étant, par définition, l'hamiltonien de Hartree-Fock. Ces équations peuvent être écrites de façon plus compacte en introduisant la matrice densité ρ

$$\rho = \sum_{i=1}^A |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (5)$$

satisfaisant $\rho^2 = \rho$, $\text{Trace}(\rho) = A$, et dont la donnée est équivalente à celle du déterminant Φ . En utilisant le fait que l'opérateur W est hermitique on obtient l'équation du mouvement suivante

$$i \hbar \dot{\rho} = [W, \rho] \quad (6)$$

qui est appelée équation de Hartree-Fock dépendant du temps.

A titre d'exemple écrivons ces équations pour un noyau $N=Z$ saturé en spin i.e. tel que chaque orbitale $\varphi_\lambda(r)$ soit occupée par deux neutrons et deux protons de spins opposés. Supposons de plus que l'interaction à deux corps soit une force de Wigner $V=v(r_{12})$. L'énergie Hartree-Fock est alors donnée par $E=T+V$ où

$$V = \frac{1}{8} \int d\underline{r}_1 d\underline{r}_2 v(|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|) \{4 \langle \underline{r}_1 | \rho | \underline{r}_1 \rangle \langle \underline{r}_2 | \rho | \underline{r}_2 \rangle - |\langle \underline{r}_1 | \rho | \underline{r}_2 \rangle|^2\} \quad (7)$$

Par ailleurs la définition (4) entraîne que le champ de Hartree-Fock W est la dérivée fonctionnelle de E par rapport à ρ i.e.

$$\delta E = \text{Trace}(W \delta \rho) \quad (8)$$

L'expression (7) conduit ainsi au champ moyen suivant

$$W = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u \quad (9)$$

avec

$$\langle \underline{r} | u | \underline{r}' \rangle = u_D(\underline{r}) \delta(\underline{r} - \underline{r}') + \frac{1}{4} \langle \underline{r} | \rho | \underline{r}' \rangle v(|\underline{r} - \underline{r}'|) \quad (10)$$

le champ local u_D étant donné par

$$u_D(\underline{r}) = \int \langle \underline{r}' | \rho | \underline{r}' \rangle v(|\underline{r}' - \underline{r}|) d\underline{r}' \quad (11)$$

II. PROPRIETES DES EQUATIONS DE HARTREE-FOCK DEPENDANT DU TEMPS

1) Considérons une transformation de jauge $\Phi \rightarrow \tilde{\Phi}$ du déterminant (1) définie par la transformation des états à une particule

$$\varphi_i \rightarrow \tilde{\varphi}_i = e^{i\chi(r)} \varphi_i \quad (12)$$

Par cette transformation la densité $\rho(r)$, la densité d'énergie cinétique $\tau(r)$ et le courant $j(r)$ définis par

$$\begin{aligned} \rho(r) &= \sum_{i=1}^A |\varphi_i(r)|^2 & \tau(r) &= \sum_{i=1}^A |\nabla \varphi_i(r)|^2 \\ j(r) &= \frac{1}{2i} \sum_{i=1}^A \{ \varphi_i^*(r) \vec{\nabla} \varphi_i(r) - \varphi_i(r) \vec{\nabla} \varphi_i^*(r) \} \end{aligned} \quad (13)$$

deviennent respectivement les quantités $\tilde{\rho}$, $\tilde{\tau}$ et \tilde{j}

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(r) &= \rho(r) , & \tilde{\tau} &= \tau(r) + 2\vec{\nabla}\chi \cdot j + \rho(r) (\vec{\nabla}\chi)^2 \\ \tilde{j}(r) &= j(r) + \rho(r) (\vec{\nabla}\chi) \end{aligned} \quad (14)$$

Si $\langle \Phi | V | \Phi \rangle = \langle \tilde{\Phi} | V | \tilde{\Phi} \rangle$ quelque soit $\chi(r)$ nous dirons que $\langle V \rangle$ est invariante de jauge. Cette propriété contient comme cas particulier l'invariance de Galilée qui correspond à $\chi = k \cdot r$. Elle est vérifiée pour une force locale centrale, comme on peut le voir immédiatement sur l'équation (7), pour une force tenseur et pour une force spin-orbite.

L'invariance de jauge conduit pour les équations de Hartree-Fock dépendant du temps à une équation de continuité. En effet effectuons une petite variation des orbitales φ_i correspondant à une transformation du type (12). D'après l'hypothèse d'invariance de jauge et 13,14 on a pour χ suffisamment petit

$$\delta \langle \Phi | T+V | \Phi \rangle = \delta \langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \delta \int \tau(r) dr = \frac{\hbar^2}{m} \int \vec{\nabla}\chi \cdot j dr \quad (15)$$

Par suite la variation de l'action se réduit à

$$\delta I = \int dt dr \{ -\hbar \rho(r,t) \dot{\chi}(r,t) + \frac{\hbar^2}{m} \chi(r,t) \operatorname{div} \vec{j}(r,t) \} \quad (16)$$

et comme I doit être stationnaire il en résulte que

$$\dot{\rho}(r,t) + \frac{\hbar}{m} \operatorname{div} \vec{j}(r,t) = 0 \quad (17)$$

2) Comme W est hermitique les équations du mouvement entraînent que

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = 0 \quad (18)$$

3) L'énergie $E = \langle \phi | H | \phi \rangle$ est conservée car pour $\delta \rho = \dot{\rho} \delta t$ on a

$$\delta E = \operatorname{Trace} (W \delta \rho) = \frac{1}{i\hbar} \delta t \operatorname{Trace} (W[\dot{W}, \rho]) = 0 \quad (19)$$

4) Si une solution de l'équation du mouvement (6) est telle que quelque soit t, l'opérateur $\rho(t)$ est pair par renversement du temps, alors $\rho(t)$ est indépendant du temps et est égal à la matrice densité ρ_{HF} solution de l'équation de Hartree-Fock statique $[W, \rho_{\text{HF}}] = 0$. En effet l'hypothèse précédente implique que les deux membres de (6) ont une parité différente par rapport au renversement du temps.

5) Soit

$$\rho_{\text{HF}} = \sum_{i=1}^A |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (20)$$

la solution de l'équation de Hartree-Fock statique. Alors quelque soit le vecteur \vec{v} les fonctions d'onde

$$\varphi_i(\vec{r}, t) = e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{v}t)} \psi_i(\vec{r} - \vec{v}t) \quad (21)$$

avec $\vec{k} = m\vec{v}/\hbar$ sont solutions de l'équation de Hartree-Fock dépendant du temps, propriété qui découle de l'invariance galiléenne

de la théorie [6]. Les solutions (21) sont telles que l'énergie est localisée quelque soit t . Elles sont donc des solutions de type "soliton" analogues à celles qui apparaissent généralement dans les équations aux dérivées partielles non-linéaires e.g. Sine-Gordon, Korteweg-de Vries ou Schrödinger non linéaire [7].

III. CAS DE LA FORCE DE SKYRME

Etant donné que l'interaction de Skyrme donne d'excellents résultats dans des calculs de Hartree-Fock statiques, elle est probablement bien adaptée dans le cas des équations de Hartree-Fock dépendant du temps qui est également une approximation de type champ moyen [8]. Cette interaction s'écrit $V=v_{12}+v_{123}$ [9,10] le terme à deux corps étant un polynôme du second degré dans l'espace des impulsions

$$\langle k | v_{12} | k' \rangle = t_0 (1 + x_0 P_\sigma) + \frac{1}{2} t_1 (k^2 + k'^2) + t_2 k \cdot k' \quad (22)$$

et v_{123} étant une force de contact à trois corps

$$v_{123} = t_3 \delta(r_1 - r_2) \delta(r_2 - r_3) \quad (23)$$

Dans l'équation (22) P_σ est l'opérateur d'échange de spin $(1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2)/2$. Pour simplifier nous allons considérer un noyau $N=Z$ saturé en spin. Dans ce cas la valeur moyenne de l'énergie pour un déterminant de Slater s'écrit

$$E = \int H(r) dr \quad (24)$$

la densité Hamiltonienne $H(r)$ étant donnée par l'expression

$$\begin{aligned} H(r) = & \frac{\hbar^2}{2m} \tau + \frac{3}{8} t_0 \rho^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho^3 + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) (\rho\tau - j^2) \\ & - \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) \rho \nabla^2 \rho \end{aligned} \quad (25)$$

avec $\rho(r)$, $\tau(r)$ et $\vec{j}(r)$ définis par l'équation 13. Dans l'expression précédente on peut remarquer que le courant \vec{j} n'apparaît qu'à travers la combinaison $\rho\tau - j^2$. Ceci suffit pour assurer l'invariance de jauge comme on peut le vérifier à partir de l'équation 14, et par suite l'invariance de Galilée de l'énergie d'interaction [11].

Pour calculer le champ de Hartree-Fock effectuons une variation $\delta\varphi_i^*$ des fonctions individuelles ce qui entraîne une variation $\delta\rho, \delta\tau, \delta\vec{j}$ des densités (13) et une variation δE de l'énergie

$$\delta E = \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*(r)} \delta\tau(r) + u(r)\delta\rho(r) + \vec{I}(r) \cdot \delta\vec{j}(r) \right\} \quad (26)$$

avec
$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2)\rho$$

$$u(r) = \frac{3}{4}t_0\rho + \frac{3}{16}t_3\rho^2 + \frac{1}{16}(3t_1+5t_2) + \frac{1}{16}(9t_1-5t_2)(\nabla\rho)^2$$

$$\vec{I} = -\frac{1}{8} (3t_1+5t_2)\vec{j}(r) \quad (27)$$

En explicitant les variations des densités et en intégrant par parties il vient

$$\delta E = \int dr \delta\varphi_i^*(r) W \varphi_i(r) \quad (28)$$

où W est l'opérateur

$$W = -\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2m^*(r)} + u(r) + \frac{1}{2i} \{ \vec{I} \cdot \vec{\nabla} + \vec{\nabla} \cdot \vec{I} \} \quad (29)$$

Précisons que dans cette expression les opérateurs gradients doivent agir sur tout ce qui se trouve à leur droite e.g. $(\vec{\nabla} \cdot \vec{I})\varphi$ doit être interprété comme $\vec{I} \cdot \text{grad}\varphi + \varphi \text{div}\vec{I}$.

IV. RESOLUTION NUMERIQUE

Pour simplifier l'exposé de la méthode nous allons considérer une force de Skyrme telle que $t_1=t_2=0$. De plus nous nous limiterons au cas de l'hélium 4 pour lequel il existe une seule orbite $\varphi(r,t)$ et nous étudierons les vibrations monopolaires dans ce noyau i.e. les solutions du type

$$\varphi(\vec{r},t) = \frac{1}{r} R(r,t) Y_{00}(\theta\varphi) \quad (30)$$

Les équations du mouvement se réduisent dans ce cas à

$$i \hbar \frac{\partial R}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + u(r,t) \right\} R(r,t) \quad (31)$$

avec $u = \frac{3}{4} t_0 \rho + \frac{3}{16} t_3 \rho^2$ et $\rho(r,t) = |R(r,t)|^2 / \pi r^2$.

Nous prendrons dans cet exemple $t_0 = -1000 \text{ MeV} \times \text{fm}^3$ et $t_3 = 15000 \text{ MeV} \times \text{fm}^3$ ce qui donne une description raisonnable du rayon carré moyen et de l'énergie de l'hélium dans un calcul de Hartree-Fock statique.

La méthode de résolution usuelle pour une équation du type 31 consiste à l'approximer par une équation aux différences finies. Pour ce faire on remplace les deux variables continues r et t par des variables discrètes

$$t_i = i \times \Delta t \quad r_j = j \times \Delta r \quad (32)$$

les pas Δr et Δt étant choisis suffisamment petits pour que $R(r,t)$ varie peu d'un point du réseau (32) à l'un quelconque de ses voisins. Désignons par \vec{R} le vecteur colonne

$$\vec{R} = \begin{pmatrix} R(r_1) \\ R(r_2) \\ \vdots \\ R(r_N) \end{pmatrix} \quad (33)$$

La méthode la plus simple à laquelle on puisse penser est d'approximer (31) par l'équation aux différences finies suivantes

$$i \hbar \frac{\vec{R}(t+\Delta t) - \vec{R}(t)}{\Delta t} = W \vec{R}(t) \quad (34)$$

W étant la matrice

$$W_{jk} = -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta r)^2} (\delta_{j,k+1} + \delta_{j,k-1} - 2\delta_{jk}) + u(r_j, t) \delta_{jk} \quad (35)$$

connaissant \vec{R} au temps t on obtient ainsi $\vec{R}(t+\Delta t)$ par la relation de récurrence

$$\vec{R}(t+\Delta t) = \left(1 + \frac{i\hbar}{\Delta t} W(t) \right) \vec{R}(t) \quad (36)$$

Malheureusement cette méthode n'est pas applicable car W étant hermitique, l'opérateur $1+i\hbar W/\Delta t$ a toutes ses valeurs propres plus grandes que 1 en module. En pratique ceci entraîne que la norme de \vec{R} diverge exponentiellement avec t , alors qu'elle devrait rester égale à un, comme nous l'avons vu au paragraphe 2. Un moyen d'échapper à cette difficulté consiste à utiliser la méthode de Crank-Nicholson [2,12] qui au lieu de l'équation 36 fait intervenir la relation de récurrence

$$\vec{R}(t+\Delta t) = \frac{1 + \frac{i\hbar}{2\Delta t} W(t)}{1 - \frac{i\hbar}{2\Delta t} W(t)} \vec{R}(t) \quad (37)$$

Dans ce cas l'opérateur apparaissant au second membre est manifestement unitaire et la norme de \vec{R} est bien conservée au cours du temps. La méthode précédente nécessite une inversion de matrice. Toutefois comme la matrice du dénominateur est tri-diagonale, son inversion peut être effectuée très simplement et avec une grande précision par la méthode d'élimination de Gauss [12]. En pratique on observe que la précision de l'algorithme 37 peut être améliorée sensiblement en utilisant $W(t+\Delta t/2)$ au lieu de $W(t)$ au second membre. Une excellente approximation de $W(t+\Delta t/2)$ s'obtient en le construisant à partir des fonctions approchées $\vec{R}(t+\Delta t/2)$ déduites de 37.

V. RESULTATS

1) La méthode précédente a été appliquée en plaçant à $t=0$ le noyau d'hélium-4 dans son fondamental Hartree-Fock $R_0(r)$ et en lui donnant une impulsion à symétrie sphérique de type

$$R(r,t=0) = e^{i\chi(r)} R_0(r) \quad (38)$$

avec $\chi(r)=\alpha^2 r^2/2$. Cette condition initiale correspond à une distribution initiale de moment

$$\hbar \vec{j}(r) = \hbar \rho(r) \vec{\nabla} \chi = \hbar \alpha^2 \rho(r) \vec{r} \quad (39)$$

L'énergie cinétique associée, d'après les équations 14, est égale à

$$T = E(R) - E(R_0) = \frac{\hbar^2}{2m} \int \rho_0(r) (\nabla\chi)^2 dr = \frac{\hbar^2}{2m} A \langle r^2 \rangle \alpha^4 \quad (40)$$

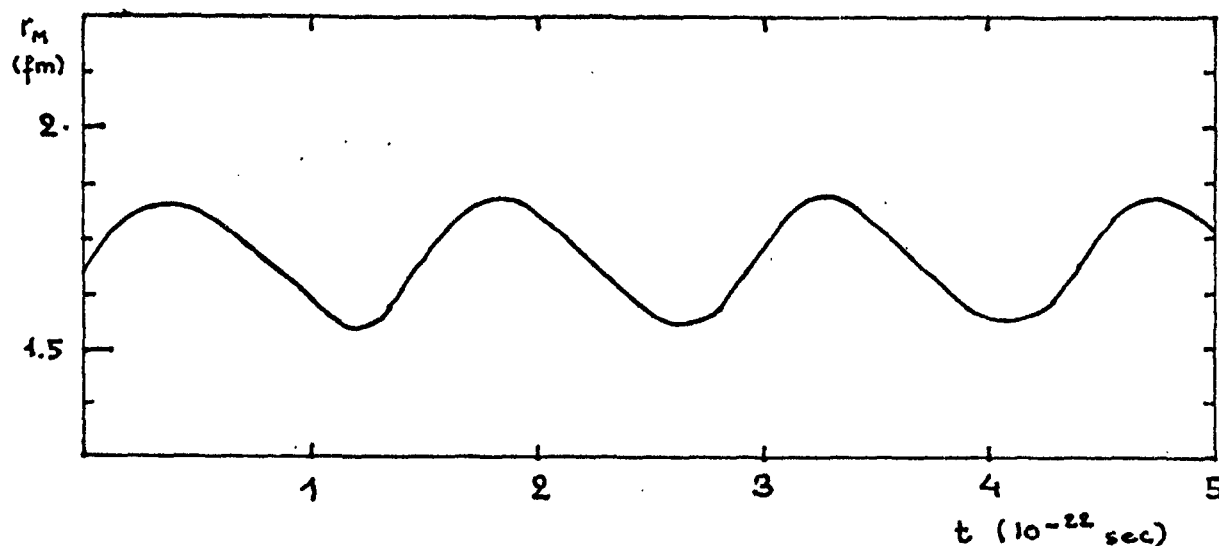


Figure 1 : Variation en fonction du temps du rayon de l'hélium-4 pour la condition initiale 38 avec $\alpha=0.25 \text{ fm}^{-1}$. L'interaction est une force de Skyrme pour laquelle $t_1=t_2=0$, $t_0=-1000 \text{ MeV}\times\text{fm}^3$, $t_3=15000\times\text{MeV fm}^3$.

Sur la figure 1 nous avons tracé la variation du rayon carré moyen de masse r_M défini par

$$Ar_M^2 = \int \rho(r)r^2 dr \quad (41)$$

en fonction du temps pour une condition initiale de type (38) avec $\alpha=0.25 \text{ fm}^{-1}$ soit $T=1 \text{ MeV}$. L'intégration numérique a été effectuée en prenant

$$\Delta r = 0.2 \text{ fm} \quad \Delta t = 0.5 \times 10^{-23} \text{ sec} \quad (42)$$

ce qui suffit pour conserver l'énergie à 0.04 MeV près tout au long de ce calcul. Sur la figure 1 on peut voir que le rayon oscille de façon pratiquement périodique avec une période $\theta=14.5 \times 10^{-23} \text{ sec}$ ce qui correspond pour la résonance monopolaire à une énergie

$$\hbar\omega = \hbar 2\pi/\theta = 28.5 \text{ MeV}$$

VI. PERSPECTIVES

Une des applications les plus intéressantes de la méthode de Hartree-Fock dépendant du temps concerne les collisions de deux ions lourds. De tels calculs ont été effectués dans la référence [2] pour des ions à une dimension. Il a été montré ainsi que l'on peut décrire une très grande variété de phénomènes dynamiques, allant de la fusion de deux ions ou la formation d'un noyau composé à la propagation d'ondes de choc et la fragmentation des ions. L'extension au calcul de la collision de deux noyaux d'oxygène-16 a été obtenue récemment par Koonin [13]. Nous mentionnerons également que la méthode de Hartree-Fock dépendant du temps a été appliquée à l'étude des résonances géantes monopolaires et quadrupolaires couplées par Flocard [14].

Références

- 1) P.A.M. Dirac, Proc. Camb. Phil. Soc. 26 (1930) 376.
- 2) P. Bonche, S. Koonin and J.W. Negele, Phys. Rev. C13 (1976) 1226.
- 3) P.M. Morse and H. Feshbach, Methods in Theoretical Physics, Mc Graw-Hill, New-York, p.314.
- 4) L.I. Schiff, Quantum Mechanics, Mc Graw-Hill, New-York, 1955, paragraphe 46.
- 5) D.M. Brink, M.J. Giannoni and M. Veneroni, Nucl. Phys. A258 (1976) 237.
- 6) D.J. Thouless and J.G. Valatin, Nucl. Phys. 31 (1962) 211.
- 7) A. Scott, F. Chu and D. Mc Laughlin, Proceedings IEEE 61 (1973) 1443.
- 8) G.E. Brown, Conf. on photo-nuclear reactions, Asilomar, 1973, CONF-730301.
- 9) T.H.R. Skyrme, Nucl. Phys. 9 (1959) 615 .
- 10) D. Vautherin and D.M. Brink, Phys. Rev. C5 (1972) 626.
- 11) Y.M. Engel, D.M. Brink, K. Goeke, S.J. Krieger and D. Vautherin, Nucl. Phys. A249 (1975) 215.
- 12) G.E. Forsythe and W.R. Wasow, Finite difference methods for partial differential equations, Wiley, New-York, 1960, paragraphes 13.3 et 13.4.
- 13) S. Koonin, Phys. Lett. 61B (1976) 227.
- 14) H. Flocard, communication privée.