



Séminaire le mardi 24 mars 2009 à 11h

CEA-Saclay SPhN, Orme des Merisiers Bât. 703 Salle 135

---

**Théorie de la Fonctionnelle de la Densité « Intrinsèque »,  
pour la description des systèmes auto-liés.**

**Jérémie MESSUD**

*IRSAMC (Institut de Recherche sur les Systèmes Atomiques et Moléculaires Complexes, Toulouse)*

Le point de départ de la description des systèmes auto-liés nucléaires est traditionnellement un calcul de type champ moyen (Hartree-Fock) avec interaction effective. C'est d'ailleurs la seule manière viable d'étudier les noyaux lourds. Mais ce formalisme sacrifie la symétrie la plus triviale d'un système auto-lié isolé, l'invariance par translation (au bénéfice du principe de Pauli). En conséquence apparaît une vibration non physique du centre de masse, qui doit être supprimée par une méthode appropriée de projection. Malgré cela, le modèle du champ moyen nucléaire a connu d'innombrables succès, montrant sa pertinence. Comme la forme des équations correspondantes présente une analogie frappante avec celle des équations Kohn-Sham (KS) obtenues à partir de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), nous pouvons espérer qu'une justification plus fondamentale, ne nécessitant pas de briser l'invariance par translation, vienne de la DFT. Ces dernières années, des théoriciens ont remis au goût du jour les recherches dans ce sens [1]. Mais les conclusions de la DFT traditionnelle ne sont pas applicables aux systèmes auto-liés isolés (ce que nous démontrerons). D'autre part, c'est la densité fermionique intrinsèque (vue dans le référentiel lié au centre de masse) qui est d'intérêt expérimental (la densité vue dans le laboratoire étant constante pour de tels systèmes). Pour surmonter cela, nous avons formulé une DFT « Intrinsèque », qui permet d'affirmer que l'énergie totale d'un système auto-lié isolé peut s'écrire sous la forme d'une fonctionnelle de deux objets à 1 corps : la densité associée au centre de masse et la densité fermionique intrinsèque. Cela permet de dériver un schéma KS « Intrinsèque » consistant et ainsi de justifier des équations du type champ-moyen nucléaire tout en ayant traité correctement la symétrie par translation.

Avant de présenter ces aspects développés récemment, l'orateur reviendra succinctement sur la théorie du champ-moyen et le problème du centre de masse, et rappellera le formalisme de la DFT traditionnelle, afin d'explicitier les raisons profondes qui font qu'elle n'est pas applicable aux systèmes auto-liés. Dans un deuxième temps seront développés les formalismes DFT et KS « Intrinsèques ». La présentation prendra la forme d'une discussion ouverte.

[1] J. Engel, Phys. Rev. C 75 (2007) 014306