

Journée Thématique EDP: Mathematical Analysis of Interacting Quantum Systems

Jeudi 16-03-2017, Salle 004 bâtiment 22-23

- 10:00-11:00 Fumio Hiroshima (Kyushu),
Feynman-Kac formula and its application to quantum physics.
- 11:10-12:10 Nizar Demni (IRMAR),
Laplaciens magnétiques à champ uniforme et mesures quasi-infiniment divisibles.
- 14:00-15:00 Francis Nier (Paris 13),
Multiscale Analysis and Quantum Mean Field Problems.
- 15:10-16:10 Marco Falconi (Roma Tre),
Potentiels effectifs dans l'approximation quasi-classique.
- 16:30-17:30 Sébastien Breteaux (BCAM),
Qualité de l'approximation de Hartree-Fock décrivant la dynamique des électrons d'une molécule.

Programme

10:00-11:00 Fumio Hiroshima,
Feynman-Kac formula and its application to quantum physics

Abstract: The Feynman-Kac formula describes the semigroup generated by a self-adjoint operator in terms of path measures. In my talk we introduce Feynman-Kac formula of various kinds of Schroedinger operators. In particular we consider a Schroedinger operator with spin, semi-relativistic Schroedinger operator and semi-relativistic Schroedinger operator with spin.

11:10-12:10 Nizar Demni,
Laplaciens magnétiques à champ uniforme et mesures quasi-infiniment divisibles.

14:00-15:00 Francis Nier,
Multiscale Analysis and Quantum Mean Field Problems.

Abstract: In the quantum mean field analysis which can be viewed as semiclassical analysis in infinite dimension, some additional defect of compactness defects, as compared to the finite dimensional semiclassical analysis, occur in relation with the infinite dimension of the phase-space. This has practical consequences while studying, example given, a bose gas separated in condensated and non condensated phases. As another issue, such defect of compactness always occur in the fermionic setting. I will explain how the introduction of two small parameters, $\epsilon=1/N$, N being the number of particles, and \hbar being a scaling parameter of 1-particle observables, allows to elucidate those phenomena in a physically relevant manner for both the bosonic and fermionic case.

15:10-16:10 Marco Falconi,
Potentiels effectifs dans l'approximation quasi-classique.

Résumé: On dérive l'action de potentiels extérieurs sur un système de particules quantiques induit par l'interaction des particules avec un

champ de radiation semiclassique. En particulier, on prouve la convergence de l'opérateur Hamiltonien réduit vers l'opérateur de Schrödinger correspondant, dans une topologie convenable. Pour des données initiales de champ cohérentes, on obtient des potentiels confinants. On discute enfin la convergence de l'énergie fondamentale du système complet vers la solution d'un problème variationnel sur les énergies fondamentales des opérateurs réduits.

16:30-17:30 Sébastien Breteaux,

Qualité de l'approximation de Hartree-Fock décrivant la dynamique des électrons d'une molécule.

Résumé: L'un des problèmes essentiels en chimie quantique est la description de la dynamique des électrons dans une molécule. Malheureusement ce problème s'avère extrêmement compliqué, tant d'un point de vue théorique que d'un point de vue numérique. On fait donc appel à des approximations, l'une des plus fondamentales étant l'approximation de Hartree-Fock. Bien qu'étant couramment utilisée par les chimistes, peu de résultats mathématiquement rigoureux permettent de justifier cette approximation.

Je vais exposer le résultat d'une collaboration avec V. Bach, S. Petrat, P. Pickl et T. Tzaneteas. J'introduirai le modèle mathématique pour une molécule avec N -électrons et l'approximation de sa dynamique par l'équation de Hartree-Fock dépendante du temps. Puis j'énoncerai notre résultat qui donne une estimation de la qualité de l'approximation, ainsi que certaines applications.