

Résumé de thèse Jing Zhang

« Problèmes d'appariement neutron-proton simulés sur des ordinateurs quantiques. »

Le traitement des degrés de liberté de spin et de l'isospin (neutron et proton) sur un ordinateur quantique constitue un jalon pour les futures applications de cette technologie émergente dans la recherche en physique nucléaire.

Cette thèse examine la résolution du problème d'appariement neutron-proton à travers des méthodes développées sur ordinateurs quantiques, en mettant l'accent sur le développement d'algorithmes innovants permettant de décrire à la fois les propriétés de l'état fondamental et les états excités de basse énergie pour des systèmes formés de protons et de neutrons en interaction soumis à une interaction d'appariement.

Des études précédentes ont abordé un problème similaire pour des particules ayant uniquement une composante de spin en utilisant des méthodes variationnelles basées sur des fonctions d'onde autorisant des brisures de symétrie, suivi d'une restauration éventuelle de ces symétries. Cette même approche a été explorée dans cette thèse, avec la proposition de plusieurs ansatzes avec brisure de symétries utilisés pour déterminer l'état fondamental de l'Hamiltonien d'appariement proton-neutron. Il est montré que l'intégration des degrés de liberté d'isospin complexifie davantage le problème, posant des défis plus importants pour son traitement par une approche variationnelle de type hybride quantique-classique. De plus, bien que la restauration des symétries brisées reste réalisable, le nombre accru de symétries simultanément brisées augmente considérablement le coût numérique par rapport au cas impliquant uniquement le spin.

Pour surmonter ces défis, la thèse explore des stratégies alternatives préservant les symétries. Il est montré que l'algorithme variationnel adaptatif ADAPT-VQE permet efficacement d'atteindre l'état fondamental et peut surpasser les approches basées sur les brisures de symétries en termes de précision de l'énergie de l'état fondamental. Une convergence satisfaisante est obtenue pour la plupart des scénarios présentés, tandis que des méthodes dites « d'embedding » et « d'initialisation aléatoire » sont proposées et examinées pour les cas présentant des difficultés de convergence.

Une fois l'état fondamental décrit précisément, cette thèse propose d'utiliser les états générés lors de la convergence variationnelle comme base tronquée pour la diagonalisation dans un sous-espace, permettant ainsi le calcul classique des niveaux d'énergie excités au sein d'un espace de Hilbert considérablement réduit. Cette approche est validée non seulement pour les Hamiltoniens d'appariement, mais aussi pour des problèmes de dissociation moléculaire, illustrant ainsi son applicabilité étendue pour déterminer les spectres à basse énergie dans divers systèmes quantiques à N-corps.