Available online at www.sciencedirect.com
SCIENCE DIRECT®
ELSEVIER
C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006) 551–556
COMPTES RENDUS MATHEMATIQUE
http://france.elsevier.com/direct/CRASS1/

Analyse mathématique/Physique mathématique

Un théorème de décomposition pour les fonctions d'onde symétriques ou antisymétriques

François Alouges [a], Christophe Audouze [b]

[a] *Laboratoire de mathématique, bâtiment 425, université Paris-Sud, 91405 Orsay, France*
[b] *CEA-DAM/DIF/DSSI/SNEC, 91680 Bruyères-le-Châtel, France*

Reçu le 8 avril 2005 ; accepté après révision 22 février 2006

Disponible sur Internet le 20 mars 2006

Présenté par Pierre-Louis Lions

Résumé

Dans cette Note, nous prouvons un théorème de décomposition de fonctions symétriques ou antisymétriques de N variables. De telles fonctions sont utilisées en mécanique quantique pour décrire les états quantiques de bosons et de fermions respectivement. ***Pour citer cet article : F. Alouges, C. Audouze, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006).***

Abstract

A decomposition theorem for symmetric or skew-symmetric wave functions. In this Note, we prove a theorem for the decomposition of symmetric or skew-symmetric functions of N variables. In quantum mechanics, this kind of function is commonly used for the description of quantum states of bosons and fermions respectively. ***To cite this article: F. Alouges, C. Audouze, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006).***

Abridged English version

Let

$$L_s^2(\mathbb{R}^{3N}) = \{\phi(x_1, \dots, x_N) \in L^2(\mathbb{R}^{3N}) \text{ symmetric}\},$$

and

$$L_a^2(\mathbb{R}^{3N}) = \{\phi(x_1, \dots, x_N) \in L^2(\mathbb{R}^{3N}) \text{ skew-symmetric}\}.$$

The aim of this Note is to prove the following theorem.

Theorem 0.1. *Let $\phi \in L_s^2(\mathbb{R}^{3N})$ a symmetric function of N variables $(x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{3N}$. There exist a sequence of functions $(f_i)_{i\geqslant 1}$ normalized in $L^2(\mathbb{R}^3)$, $(\forall i \geqslant 1,\ \|f_i\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1)$, and a sequence $(\alpha_i)_i \in l^2$ such that*

Adresses e-mail : Francois.Alouges@math.u-psud.fr (F. Alouges), Christophe.Audouze@cea.fr (C. Audouze).

1631-073X/$ – see front matter
doi:10.1016/j.crma.2006.02.026

$$\phi(x_1,\dots,x_N)=\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i f_i(x_1)\cdots f_i(x_N), \tag{1}$$

$$\|\phi\|_{L^2}^2=\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i^2. \tag{2}$$

The proof follows two steps. In a first step we build the sequence (α_k, f_k) iteratively by solving minimization problems $(\mathcal{P}_{\theta_{k-1}})$ for all $k\geqslant 1$, of type (7). Here, θ_j is defined by

$$\theta_j(x_1,\dots,x_N)=\phi(x_1,\dots,x_N)-\sum_{i=1}^{j}\alpha_j f_j(x_1)\cdots f_j(x_N)$$

with the convention that $\theta_0=\phi$. The minimization problems are proven to have a solution by means of standard techniques, and we also get the equality

$$\forall j\geqslant 0,\quad \|\theta_j\|_{L^2}^2=\|\phi\|_{L^2}^2-\sum_{i=1}^{j}\alpha_i^2.$$

In a second step, the series $\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i f_i\cdots f_i$ is shown to converge strongly to ϕ in $L^2(\mathbb{R}^{3N})$, using an estimation coming from a careful study of the sequence of Euler–Lagrange equations.

The method explained for the symmetric case also applies in the skew-symmetric one and gives a decomposition of any skew-symmetric function ϕ as

$$\phi(x_1,\dots,x_N)=\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i \det\left(\chi_1^i,\dots,\chi_N^i\right), \tag{3}$$

$$\|\phi\|_{L^2}^2=\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i^2, \tag{4}$$

where $(\chi_j^i)_{i,j}$ are L^2 normalized functions that satisfy $\forall i,\ \int\chi_j^i\chi_k^i=\delta_{jk}$, which is a priori different from the known decomposition in Slater's determinants since the determinants involved in (3) are not necessary orthogonal.

1. Introduction

Dans cette Note, nous considérons des fonctions symétriques ϕ de N variables (respectivement antisymétriques), c'est-à-dire vérifiant $\phi(x_1,\dots,x_N)=\phi(x_{\sigma(1)},\dots,x_{\sigma(N)})$ pour toute permutation σ de l'ensemble $\{1,\dots,N\}$ (respectivement $\phi(x_1,\dots,x_N)=(-1)^{\mathrm{sgn}(\sigma)}\phi(x_{\sigma(1)},\dots,x_{\sigma(N)})$). De telles fonctions jouent un rôle crucial en physique quantique lorsque l'on considère des fonctions d'onde de bosons et de fermions respectivement. Pour simplifier l'exposé, les variables seront prises dans $\mathbb{R}^3$ (ce qui est le cas pertinent pour les applications), mais tous les résultats restent vrais si on les considère dans $\mathbb{R}^d$ pour d quelconque. De même, les fonctions d'onde considérées ne dépendent pas explicitement du spin et seront à valeurs réelles ; néanmoins, les méthodes ainsi que les résultats exposés ici s'étendent sans difficulté à des fonctions d'onde dépendant du spin ou à valeurs complexes.

On pose

$$L_s^2\left(\mathbb{R}^{3N}\right)=\left\{\phi(x_1,\dots,x_N)\in L^2\left(\mathbb{R}^{3N}\right)\text{ symétrique}\right\},$$

et

$$L_a^2\left(\mathbb{R}^{3N}\right)=\left\{\phi(x_1,\dots,x_N)\in L^2\left(\mathbb{R}^{3N}\right)\text{ antisymétrique}\right\}.$$

On propose de donner une preuve constructive au théorème suivant.

Théorème 1. *Soit $\phi\in L_s^2(\mathbb{R}^{3N})$ une fonction symétrique de N variables $(x_1,\dots,x_N)\in\mathbb{R}^{3N}$. Il existe une suite de fonctions $f_i\in L^2(\mathbb{R}^3)$, $\|f_i\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}=1$, ainsi que des coefficients $\alpha_i\in l^2$ tels que*

$$\phi(x_1,\ldots,x_N)=\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i f_i(x_1)\cdots f_i(x_N), \tag{5}$$

$$\sum_{i\geqslant 1}\alpha_i^2=\|\phi\|_{L^2}^2. \tag{6}$$

Remarque 1. Ce type de résultat n'est a priori pas évident puisque si (f_i) est une base Hilbertienne de $L^2(\mathbb{R}^3)$, $(f_i\otimes\cdots\otimes f_i)$ n'est pas une base Hilbertienne de $L_s^2(\mathbb{R}^{3N})$ (contrairement au cas antisymétrique, voir la remarque 3).

Remarque 2. Contrairement à ce que laisse penser la relation (6), les fonctions f_i intervenant dans (5) ne sont pas nécessairement orthogonales.

Ce type de résultat n'a pas pour vocation d'induire une nouvelle méthode numérique pour des problèmes issus de la chimie quantique. Il s'agit plutôt d'une remarque qui met en évidence la complexité de la description ainsi que la multitude de décompositions sous forme de multi-configurations de fonctions d'ondes symétriques ou antisymétriques générales. Par ailleurs, la preuve nous a semblé intéressante à communiquer.

2. Décomposition de fonctions d'onde symétriques

Pour prouver le Théorème 1, on se sert du lemme suivant :

Lemme 2. *Soit* $\phi\in L_s^2(\mathbb{R}^{3N})$ *tel que* $\forall f\in L^2(\mathbb{R}^3)$, $\int_{\mathbb{R}^{3N}}\phi(x_1,\ldots,x_N)f(x_1)\cdots f(x_N)\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_N=0$, *alors* $\phi=0$.

Preuve. On raisonne par récurrence sur N. L'initialisation de la récurrence est évidente puisque

$$\int\phi(x_1)f(x_1)\,\mathrm{d}x_1=0,\quad \forall f\in L^2(\mathbb{R}^3)\Rightarrow\phi=0,$$

en prenant $f=\phi$. Supposons maintenant le résultat vrai au rang $N-1$, et montrons qu'il est vrai au rang N. Pour tous f et g dans $L^2(\mathbb{R}^3)$, et tout $\varepsilon\in\mathbb{R}$, on écrit :

$$\int\phi(x_1,\ldots,x_N)(f+\varepsilon g)(x_1)\cdots(f+\varepsilon g)(x_N)\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_N=0.$$

Puisque ϕ est symétrique, en divisant par ε et en faisant tendre ε vers 0, on obtient

$$N\int\phi(x_1,\ldots,x_N)g(x_1)f(x_2)\cdots f(x_N)\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_N=0,\quad \forall f,g\in L^2(\mathbb{R}^3).$$

En notant $\theta(x_2,\ldots,x_N)=\int\phi(x_1,\ldots,x_N)g(x_1)\,\mathrm{d}x_1$, on a $\theta=0$ par hypothèse de récurrence. Ceci permet d'écrire $\forall g\in L^2(\mathbb{R}^3)$, $\int\phi(x_1,\ldots,x_N)g(x_1)\,\mathrm{d}x_1=0$, p.p. $(x_2,\cdots,x_N)$, d'où l'on déduit que $\phi(\cdot,x_2,\ldots,x_N)=0$ p.p. $(x_2,\ldots,x_N)$ et donc $\phi=0$ p.p. □

Démonstration du Théorème 1. L'existence de la décomposition (5) du Théorème 1 est une conséquence directe du Lemme 2. Néanmoins nous proposons une preuve constructive qui fournit aussi l'égalité (6) et dont la preuve peut-être adaptée au cas antisymétrique (voir Section 3). La démonstration est décomposée en deux étapes : dans la première, on construit (par récurrence) la série du terme de droite et dans une deuxième étape, on montre que celle-ci converge fortement vers ϕ dans $L^2(\mathbb{R}^{3N})$.

Étape 1. Pour $\phi\in L_s^2(\mathbb{R}^{3N})$, on considère le problème de minimisation suivant :

$$(\mathcal{P}_\phi)\colon\ \min\bigl\{E_\phi(\alpha,f);\ f\in L^2(\mathbb{R}^3),\ \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}=1,\ \alpha\in\mathbb{R}\bigr\}, \tag{7}$$

où $E_\phi(\alpha,f)=\int|\phi(x_1,\ldots,x_N)-\alpha f(x_1)\cdots f(x_N)|^2\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_N$.

On va montrer que le problème (7) possède une solution $(\bar\alpha,\bar f)$ non nulle si ϕ est non nulle. Cette solution n'est pas forcément unique car pour N pair, on a $E_\phi(\alpha,f)=E_\phi(\alpha,-f)$. Considérons une suite minimisante $(\alpha^{(k)},f^{(k)})$. Par définition, $\|f^{(k)}\|_{L^2}=1$, et par Cauchy–Schwarz on a : $E_\phi(\alpha,f)\geqslant\int|\phi|^2-2|\alpha|\ \|\phi\|_{L^2}\|f\|_{L^2}^N+\alpha^2$. Comme

$E_\phi(\alpha^{(k)}, f^{(k)})$ est bornée, on en déduit que la suite $(\alpha^{(k)})$ l'est aussi. Quitte à extraire des sous-suites, on peut donc supposer que $\alpha^{(k)} \to \alpha^\infty$ et $f^{(k)} \rightharpoonup f^\infty$ dans $L^2(\mathbb{R}^3)$. La fonctionnelle E_ϕ étant semi continue inférieurement,[1] on a

$$E_\phi\big(\alpha^\infty, f^\infty\big) \leqslant \liminf E_\phi\big(\alpha^{(k)}, f^{(k)}\big). \tag{8}$$

Montrons d'abord que $f^\infty \neq 0$. D'après le Lemme 2, on sait qu'il existe une fonction f (que l'on peut supposer de norme L^2 égale à 1) telle que $\alpha = \int \phi(x_1, \ldots, x_N) f(x_1) \cdots f(x_N) \neq 0$. En calculant $E_\phi(\alpha, f)$, on trouve en supposant que $f^\infty = 0$

$$E_\phi(\alpha, f) = \int |\phi|^2 - \alpha^2 < E_\phi\big(\alpha^\infty, f^\infty\big) = \int |\phi|^2 \leqslant \inf_{\alpha,\, \|f\|_{L^2}=1} E_\phi(\alpha, f),$$

d'après (8), ce qui est contradictoire.

Ensuite, en posant $\bar\alpha = \alpha^\infty \|f^\infty\|_{L^2}^N$ et $\bar f = f^\infty / \|f^\infty\|_{L^2}$, on a

$$E_\phi\big(\bar\alpha, \bar f\big) = E_\phi\big(\alpha^\infty, f^\infty\big) \leqslant \inf_{\alpha,\, \|f\|_{L^2}=1} E_\phi(\alpha, f)$$

et donc $(\bar\alpha, \bar f)$ est une solution du problème. Enfin, en écrivant que $\bar\alpha$ est solution de $\min_\alpha E_\phi(\alpha, \bar f)$, on obtient $\bar\alpha = \int \phi \bar f \cdots \bar f$ et

$$E_\phi\big(\bar\alpha, \bar f\big) = \|\phi\|_{L^2}^2 - \bar\alpha^2 < \|\phi\|_{L^2}^2. \tag{9}$$

On construit ensuite récursivement (α_k, f_k) en considérant les problèmes de minimisation successifs :

$$(\mathcal{P}_{\theta_{k-1}}):\ \min\big\{E_{\theta_{k-1}}(\alpha, f);\ f \in L^2\big(\mathbb{R}^3\big),\ \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1,\ \alpha \in \mathbb{R}\big\} \tag{10}$$

où $\theta_j = \phi - \sum_{i=1}^j \alpha_i f_i \cdots f_i$ pour $j \geqslant 0$ (avec la convention $\theta_0 = \phi$). Si $\theta_{k-1} \neq 0$, il existe un minimum non nul (α_k, f_k) de $(\mathcal{P}_{\theta_{k-1}})$. On a $\alpha_k = \int \theta_{k-1} f_k \cdots f_k \neq 0$, et par récurrence d'après (9)

$$\|\theta_k\|_{L^2}^2 = \left\| \phi - \sum_{i=1}^k \alpha_i f_i \cdots f_i \right\|_{L^2}^2 = \|\phi\|_{L^2}^2 - \sum_{i=1}^k \alpha_i^2 \geqslant 0, \tag{11}$$

et la série $\sum_{i \geqslant 1} \alpha_i^2$ converge.

Étape 2. Dans un premier temps on montre la convergence faible $\theta_k \rightharpoonup 0;\ L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Grâce à (11), $(\theta_k)_k$ est bornée dans L^2, et quitte à extraire une sous-suite, on peut supposer $\theta_k \rightharpoonup \theta_\infty$ faiblement dans $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. On considère ensuite le problème $(\mathcal{P}_{\theta_{k-1}})$, de solution (α_k, f_k). Grâce à la symétrie de θ_k, les équations d'Euler associées au problème $(\mathcal{P}_{\theta_{k-1}})$ se simplifient et deviennent

$$\int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} \theta_{k-1}(x_1, \ldots, x_N) f_k(x_2) \cdots f_k(x_N)\, \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_N = \beta_k f_k(x_1), \quad \forall k \geqslant 1, \tag{12}$$

avec

$$\beta_k = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \theta_{k-1}(x_1, \ldots, x_N) f_k(x_1) \cdots f_k(x_N)\, \mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_N = \alpha_k, \quad \forall k \geqslant 1. \tag{13}$$

En écrivant $E_{\theta_{k-1}}(\alpha_k, f_k) \leqslant E_{\theta_{k-1}}(\int \theta_{k-1} f \cdots f, f)$ pour $f \in L^2$ quelconque tel que $\|f\|_{L^2} = 1$, on obtient, grâce à (13)

$$\left(\int \theta_{k-1} f \cdots f\right)^2 \leqslant \alpha_k^2. \tag{14}$$

Comme $\alpha_k \to 0$ on obtient $\int \theta_\infty f \cdots f = 0,\ \forall f \in L^2(\mathbb{R}^3)$ et $\theta_\infty = 0$ d'après le Lemme 2. Pour obtenir la convergence forte, il faut montrer $\|\omega_k\|_{L^2} \to \|\phi\|_{L^2}$, où l'on a posé $\omega_k = \sum_{i=1}^k \alpha_i f_i \cdots f_i$. De (11), on tire $\|\omega_k\|_{L^2}^2 =$

[1] Ceci n'est pas complètement évident. Posant $A = \{\phi \in L^2(\mathbb{R}^{3N}),\ \phi(x_1, \ldots, x_N) = \sum_i \beta_i u_1^i(x_1) \ldots u_N^i(x_N)\}$, il est connu que A est dense dans $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Ainsi si $\phi \in A$, alors $\int \phi(x_1, \ldots, x_N) f^{(k)}(x_1) \cdots f^{(k)}(x_N) \to \int \phi(x_1, \ldots, x_N) f^\infty(x_1) \cdots f^\infty(x_N)$ et par densité ce dernier résultat est encore vrai pour $\phi \in L^2(\mathbb{R}^{3N})$.

$2\int\phi\omega_k - \sum_{i=1}^k \alpha_i^2 \to 2\|\phi\|_{L^2}^2 - \sum_{i\geqslant 1}\alpha_i^2$, car $\omega_k \rightharpoonup \phi$ faiblement dans L^2. Or $\int\phi\omega_k = \sum_{i=1}^k \alpha_i \int \phi f_i \dots f_i = \sum_{i=1}^k \alpha_i^2 + \sum_{i=1}^k\sum_{j=1}^{i-1}\alpha_i\alpha_j(f_i, f_j)_{L^2}^N$, d'après (13). Si on montre que $\lim_{k\to\infty}(\sum_{i=1}^k\sum_{j=1}^{i-1}\alpha_i\alpha_j(f_i, f_j)_{L^2}^N) = 0$, alors $\int\phi\omega_k \to \sum_{i\geqslant 1}\alpha_i^2 \Rightarrow ||\phi||_{L^2}^2 = \sum_{i\geqslant 1}\alpha_i^2 \Rightarrow ||\omega_k||_{L^2} \to ||\phi||_{L^2}$, permettant ainsi d'obtenir la décomposition (5) de ϕ. Soit donc $l < k$; en prenant $f = f_l$ dans (14), on a $\alpha_k^2 \geqslant (\int(\phi - \omega_{k-1}) f_l \cdots f_l)^2 = (\sum_{j=l+1}^{k-1}\alpha_j(f_j, f_l)_{L^2}^N)^2$, et

$$\sum_{l\leqslant k}\left|\sum_{l<j\leqslant k}\alpha_l\alpha_j(f_j, f_l)_{L^2}^N\right| \leqslant \left(\sum_{l\leqslant k}\alpha_l^2\right)^{1/2}\left(\sum_{l\leqslant k}\left(\sum_{l<j\leqslant k}\alpha_j(f_j, f_l)_{L^2}^N\right)^2\right)^{1/2} \leqslant \|\phi\|_{L^2}\left(k\alpha_{k+1}^2\right)^{1/2}. \tag{15}$$

Puisque $\sum\alpha_k^2$ converge,

$$\forall\varepsilon > 0,\ \forall N_0 \in \mathbb{N},\ \exists N > N_0,\ \text{tel que } N\alpha_{N+1}^2 < \varepsilon$$

et la série de gauche dans (15) converge normalement vers 0. □

3. Décomposition de fonctions d'onde antisymétriques

L'approximation d'une fonction d'onde antisymétrique par un seul déterminant de Slater permet de dériver des modèles de type Hartree–Fock à partir des équations de Schrödinger. L'approximation par une somme finie de déterminants donne les modèles de type multi-configurations. Plusieurs techniques sont disponibles (voir le chapitre 4 de [4] pour la description physique et [1–3] pour l'analyse mathématique), dont la plus connue consiste à écrire ϕ sous la forme

$$\phi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i_1\neq\cdots\neq i_N}\alpha_{i_1\cdots i_N}\det(\chi_{i_1}, \dots, \chi_{i_N}). \tag{16}$$

Remarque 3. Si la famille $(\chi_j)_j$ forme une base Hilbertienne de $L^2(\mathbb{R}^3)$, alors il est facile de voir que la famille $(\det(\chi_{i_1}, \dots, \chi_{i_N}))$ forme une base Hilbertienne de $L_a^2(\mathbb{R}^{3N})$ et ainsi $\|\phi\|_{L^2(\mathbb{R}^{3N})}^2 = \sum_{i_1\neq\cdots\neq i_N}\alpha_{i_1\cdots i_N}^2$.

La nouvelle approche que nous proposons consiste à obtenir la décomposition souhaitée de la même façon que pour les fonctions symétriques en considérant directement des problèmes de minimisation du type

$$\min\left\{E_\phi(\alpha, g_1, \dots, g_N);\ g_i \in L^2\left(\mathbb{R}^3\right),\ (g_i, g_j)_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \delta_{ij},\ \alpha \in \mathbb{R}\right\}, \tag{17}$$

où $E_\phi(\alpha, g_1, \dots, g_N) = \int_{\mathbb{R}^{3N}}|\phi(x_1, \dots, x_N) - \alpha\det(g_{i_1}\cdots g_{i_N})|^2\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_N$. La démonstration produite dans le cas symétrique s'adapte facilement dans ce nouveau cadre et fournit une décomposition

$$\phi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i\geqslant 1}\alpha_i\det\left(\chi_1^i, \dots, \chi_N^i\right), \tag{18}$$

avec $\|\phi\|_{L^2(\mathbb{R}^{3N})}^2 = \sum_{i\geqslant 1}\alpha_i^2$, mais où, de manière un peu originale, les fonctions $\det(\chi_1^i, \dots, \chi_N^i)$ intervenant dans (18) ne sont pas nécessairement orthogonales (bien que pour tout i, les $(\chi_j^i)_j$ le soient). En outre, la décomposition obtenue vérifie le théorème suivant qui n'est pas sans rappeler les décompositions en états doublement excités [1,4] :

Théorème 3. *Les fonctions χ_j^i vérifiant* (18) *satisfont*

$$\forall i,\quad \dim\left(\mathrm{vect}\left(\chi_1^i, \dots, \chi_N^i, \chi_1^{i+1}, \dots, \chi_N^{i+1}\right)\right) \geqslant N + 2. \tag{19}$$

Preuve. Quitte à remplacer ϕ par $\phi - \sum_{j<i}\alpha_j\det(\chi_1^j, \dots, \chi_N^j)$, on peut supposer sans restriction que $i = 1$. On remarque alors que l'Éq. (11) du cas symétrique devient ici

$$\int\left|\phi - \alpha_1\det\left(\chi_1^1, \dots, \chi_N^1\right) - \alpha_2\det\left(\chi_1^2, \dots, \chi_N^2\right)\right|^2 = \|\phi\|_{L^2}^2 - \alpha_1^2 - \alpha_2^2 < \|\phi\|_{L^2}^2 - \alpha_1^2$$
$$= \int\left|\phi - \alpha_1\det\left(\chi_1^1, \dots, \chi_N^1\right)\right|^2.$$

Lorsque (19) n'est pas satisfaite, il est facile de construire une famille orthonormée $(\chi_i^3)_i$ et $\beta \in \mathbb{R}$ tels que

$$\alpha_1 \det(\chi_1^1, \ldots, \chi_N^1) + \alpha_2 \det(\chi_1^2, \ldots, \chi_N^2) = \beta \det(\chi_1^3, \ldots, \chi_N^3), \tag{20}$$

et la contradiction vient du caractère optimal de α_1 et des $(\chi_i^1)_i$. $\square$

Références

[1] C. Le Bris, A general approach for multiconfiguration methods in quantum molecular chemistry, Ann. Inst. H. Poincaré 11 (4) (1994) 441–484.

[2] M. Lewin, The multiconfiguration methods in quantum chemistry: Palais–Smale condition and existence of minimizers, C. R. Math. Acad. Sci. Paris, Ser. I 334 (4) (2002) 299–304.

[3] M. Lewin, Solutions of the multiconfiguration equations in quantum chemistry, Arch. Rational Mech. Anal. 171 (1) (2004) 83–114.

[4] A. Szabo, N.S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Mac Graw Hill Press, New York, 1989.