



HAL
open science

Développement d'une interaction nucléaire effective de nouvelle génération

Pierre Becker

► **To cite this version:**

Pierre Becker. Développement d'une interaction nucléaire effective de nouvelle génération. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université de Lyon, 2017. Français. NNT: 2017LYSE1153. tel-01699441

HAL Id: tel-01699441

<https://theses.hal.science/tel-01699441>

Submitted on 2 Feb 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



N° d'ordre NNT : 2017LYSE1153

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE LYON

opérée au sein de

l'Université Claude Bernard Lyon 1

École Doctorale ED52

Physique et Astrophysique de Lyon

Spécialité de doctorat : Physique Théorique

Discipline : Physique nucléaire

Soutenue publiquement le 18/09/2017, par :

Pierre Becker

**Développement d'une interaction nucléaire
effective de nouvelle génération**

Devant le jury composé de :

BENDER Michael, Directeur de Recherche CNRS, Université Lyon 1

Président du jury

COLÒ Gianluca, Professeur, Université de Milan

Rapporteur

PERU-DESENFANTS Sophie, Ingénieur de Recherche CEA, CEA Île-de-France

Rapporteuse

COURTIN Sandrine, Professeure, Université de Strasbourg

Examinatrice

NAVARRO Jesús, Directeur de recherche, Université de Valence

Examineur

PASTORE Alessandro, Maître de conférence, Université de York

Examineur

DAVESNE Dany, Professeur, Université Lyon 1

Directeur de thèse

RÉSUMÉ EN FRANÇAIS

Si le noyau atomique peut sembler à l'heure actuelle un système bien connu, sa description microscopique théorique comporte toujours des lacunes : décrire la structure nucléaire des noyaux tout le long de la charte des noyaux de manière satisfaisante par une seule interaction s'avère encore compliqué aujourd'hui. Les interactions les plus performantes et les plus utilisées pour atteindre ce but sont les interactions effectives. On peut généralement classer celles-ci en deux catégories : celles de portée finie et celles de portée nulle. L'interaction de Skyrme, dont il est principalement question dans ce manuscrit, appartient à la deuxième catégorie. Apparue dans les années 50 comme un développement en gradients à l'ordre 2, sa simplicité en a longtemps fait une interaction de choix. Une collaboration internationale, UNEDF, a toutefois montré que l'interaction en l'état était trop limitée pour reproduire correctement les données expérimentales actuelles et qu'il était nécessaire d'y trouver des extensions. Ce manuscrit propose une telle extension, décrivant le processus aboutissant à l'utilisation d'un développement en gradients jusqu'à l'ordre 6. Après avoir présenté les principales forces effectives utilisées dans le cadre de la structure nucléaire, nous montrerons le comportement de cette nouvelle interaction dans le modèle idéal de la matière infinie et son application dans la description des étoiles à neutrons. Nous verrons ainsi que les performances de notre interaction se sont avérées prometteuses. La comparaison des mêmes propriétés pour des potentiels de portée finie a validé ce constat. Notre extension à l'interaction de Skyrme offre a *minima* des performances comparables aux anciens modèles. Nous détaillons également dans le manuscrit la manière dont nous avons poursuivi le développement de notre nouvelle interaction en l'adaptant pour la description de noyaux sphériques. La dernière partie présente le processus d'ajustement de notre interaction, visant à une description des noyaux le long de la charte nucléaire. Une paramétrisation issue d'un tel ajustement est enfin proposée, validant ainsi l'intégralité de l'approche utilisée.

ABSTRACT

The nucleus may seem well known, but its microscopic description still isn't perfect. Describing accurately the nuclei along the nuclear chart remain complicated. Nowadays, the effective interactions are the best choice to achieve such a goal, and can be sorted in two categories : finite-range and zero-range. Skyrme interaction, the main subject of this report, belongs to the latter. Used since the 50s because of its simplicity, it is an expansion of gradients up to the 2th order. However, an international collaboration, UNEDF, showed recently that this interaction was too limited to describe all the nuclear constraints given by experimental datas. The conclusion was the necessity of Skyrme interaction extensions. This thesis is describing the process from the design of the interaction to its use in nuclei and in fitting procedures. First, we review the requirements and the construction of a general nuclear interactions, and the main interactions used in nuclear structure, both finite and zero range. We then show the behaviour of these interactions in a perfect model : the infinite nuclear matter. This is considered a preliminary test for every interaction aiming to describe nuclei, and the performances of our interactions are discussed, along the performances of the other models. The last part of the thesis is the adaptation of our extension for calculations of nuclei. Furthermore, the fitting procedure of our extended Skyrme interaction on both infinite nuclear matter and nuclei quantities is detailed. A resulting parametrisation is presented at the end of the thesis, aiming to describe more accurately the nuclear chart and the additional physic provided by the new terms.

Table des matières

1	Introduction	5
2	Interaction nucléon-nucléon et interaction effective	8
2.1	Du noyau à l'interaction nucléon-nucléon effective	8
2.1.1	Résoudre le problème à N-corps	8
2.1.2	Hamiltonien microscopique à N-corps	10
2.2	Forme générale d'un potentiel à deux corps	11
2.3	Pseudo-potentiels effectifs phénoménologiques	12
2.3.1	Pseudo-potential effectif de portée nulle : Skyrme	12
2.3.2	Pseudo-potential de portée finie : potentiel de Gogny	15
2.3.3	Pseudo-potential de portée finie : potentiel M ₃ Y	16
2.4	Extension de Skyrme en gradients jusqu'à l'ordre 6 (N ₃ LO)	18
3	Propriétés des potentiels effectifs dans la matière nucléaire infinie	21
3.1	Introduction à la matière nucléaire infinie symétrique	21
3.2	Equations d'états de Skyrme N ₃ LO dans la matière infinie	23
3.2.1	Matière infinie symétrique	23
3.2.2	Matière infinie de neutrons	25
3.2.3	Matière infinie asymétrique	26
3.2.4	Matière infinie polarisée	27
3.3	Pseudo-observables de la matière infinie	27
3.4	Étude préliminaire : ajustement des canaux nucléaires et des ondes partielles avec Skyrme N ₂ LO et N ₃ LO	31
3.4.1	Ajustement des canaux nucléaires avec Skyrme N ₂ LO et Skyrme N ₃ LO	32
3.4.2	Ajustement de la décomposition en ondes partielles de l'équation d'état avec Skyrme N ₂ LO et Skyrme N ₃ LO	36
3.5	Application de Skyrme N ₃ LO à l'astrophysique	39
3.5.1	Introduction aux étoiles à neutrons	39
3.5.2	Ajustement de Skyrme N ₃ LO	39
3.5.3	Propriétés résultant de l'ajustement	42
4	Comparaison du potentiel de Skyrme N₃LO avec les potentiels de Gogny et M₃Y	51
4.1	Equations d'états globales des potentiels à portée finie	51
4.2	Décomposition en canaux (S,T) des équations d'états pour les potentiels à portée finie	54
4.3	Décomposition des équations d'états des interactions M ₃ Y et Gogny en ondes partielles	57

4.4	Compléments sur la troisième gaussienne de l'interaction de Gogny	62
4.5	De la portée finie à la portée nulle	68
4.5.1	Invariance de jauge locale	69
4.5.2	Interaction M_3Y	70
4.5.3	Interaction de Gogny	72
4.5.4	Conclusion sur le lien entre portée finie et portée nulle	73
5	Utilisation de Skyrme N₂LO dans le cadre du champ moyen en symétrie sphérique	75
5.1	Introduction	76
5.2	Fonctionnelle de Skyrme N ₂ LO	77
5.3	Equation du champ-moyen de Skyrme N ₂ LO	81
5.3.1	Densités de Skyrme NLO en symétrie sphérique	82
5.3.2	Nouvelles densités de N ₂ LO en symétrie sphérique	83
5.3.3	Équation du champ-moyen de Skyrme N ₂ LO en symétrie sphérique	91
5.3.4	Comportement de la fonction d'onde du système à l'origine pour Skyrme N ₂ LO	96
5.3.5	Comportement des termes dépendants de la densité $\rho_0(r)$ à l'origine dans Skyrme N ₂ LO	97
5.4	Résolution numérique de Skyrme N ₂ LO à l'approximation Hartree-Fock : WHISKY ₂	99
5.4.1	Méthode de Hooverman	101
5.4.2	Application de la méthode de Hooverman au cas pratique de l'oscillateur harmonique	103
5.4.3	Utilisation d'une méthode à deux bases	106
5.4.4	Tests numériques effectués avec WHISKY ₂	108
5.4.5	Implémentation de l'appariement dans WHISKY ₂	116
5.5	Perspectives sur Skyrme N ₃ LO pour le calcul de noyaux	118
5.5.1	Fonctionnelle de Skyrme N ₃ LO	118
5.5.2	Densités de Skyrme N ₃ LO	119
6	Ajustement de Skyrme N₂Lo	121
6.1	Méthode d'ajustement	121
6.2	Contraintes d'ajustement	122
6.2.1	Matière infinie symétrique et asymétrique	123
6.2.2	Contraintes assurant la stabilité de l'interaction	124
6.2.3	Contraintes associées aux calculs de noyaux	126
6.3	Stratégie d'ajustement	127
6.4	Résultats	129
6.4.1	Propriétés de la matière infinie	130
6.4.2	Stabilité de l'interaction	133
6.4.3	Propriétés des noyaux	134
6.4.4	Perspectives générales pour un futur ajustement et note d'intention	139
7	Conclusions et Perspectives	141
A	Ondes partielles dans le potentiel de Skyrme	151
A.1	Contributions des ondes partielles dans le potentiel de Skyrme	151

B Compléments sur la matière infinie	153
B.1 Equation d'état de la matière infinie asymétrique	153
B.2 Compléments sur l'utilisation de Skyrme N ₃ LO pour les étoiles à neutrons	153
C Formulaire pour les interactions de Gogny et de M₃Y	155
C.1 Pseudo-observables de la matière infinie des potentiels à portée finie de Gogny et M ₃ Y	155
C.1.1 Equations d'état des potentiels de Gogny et M ₃ Y	155
C.1.2 Contributions des canaux (<i>S, T</i>) aux équations d'états de Gogny et M ₃ Y	156
C.2 Contributions des ondes partielles pour $L < 3$ aux équations d'états de Gogny et M ₃ Y	157
C.3 Relations de passage entre les paramètres de Skyrme N ₃ LO et les paramètres de l'interaction de Gogny et de M ₃ Y	160
C.3.1 Skyrme-Gogny	161
C.3.2 Skyrme-M ₃ Y	161
C.4 Compléments sur l'invariance de jauge du spin-orbite de portée finie	161
D Compléments sur l'interaction de Skyrme dans les noyaux	163
D.1 Constantes de couplages pour Skyrme N ₃ LO	163
D.2 Exemple de calcul en symétrie sphérique : calcul de $\rho(r)$	164

Publications

Ce travail a donné lieu à 6 publications acceptées :

- *Tools for incorporating a D-wave contribution in Skyrme EDF*
D.Davesne *et al*, Journal of Physics G, **41** 034001 (2015)
- *Extended Skyrme pseudo-potential deduced from infinite matter properties*
P. Becker *et al*, Phys. Rev. C, **91** 064303 (2015)
- *Partial-wave decomposition of the finite-range effective tensor interaction*
D.Davesne *et al*, Phys.Rev.C, **93** 064001 (2016)
- *Infinite matter properties and zero-range limit of non-relativistic finite-range interactions*
D.Davesne *et al*, Annals Phys., **375** 288-312 (2016)
- *Does the Gogny interaction need a third Gaussian ?*
D.Davesne *et al*, Acta Phys.Polon., **B48** 265 (2017)
- *Solution of Hartree-Fock-Bogoliubov equations and fitting procedure using the N₂LO Skyrme pseudopotential in spherical symmetry*
P.Becker *et al*, Phys.Rev.C, **96** 044330 (2017)

Pour contacter leurs auteurs pour des informations ou des retours sur le manuscrit (P.Becker) ou les articles :

- **P. Becker** : pierre.becker@york.ac.uk, becker_pierre@hotmail.fr
- D. Davesne : davesne@ipnl.in2p3.fr
- J. Meyer j.meyer@ipnl.in2p3.fr
- J. Navarro : navarro@ific.uv.es
- A. Pastore : alessandro.pastore@york.ac.uk

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Dany Davesne, aux côtés de qui j'ai passé ces trois années de thèse, pour sa grande disponibilité, son écoute, ses conseils et son optimisme à toute épreuve. Je le remercie aussi pour sa patience, son enthousiasme et son soutien constant dans le processus de gestation, parfois périlleux, de Skyrme N₂LO. Je retiendrais en particulier ce jour où, fébrile, je suis venu dans ton bureau avec notre premier ajustement stable en plein milieu de la rédaction du présent manuscrit. Sache que je retire de cette thèse à tes côtés un enrichissement sur le plan professionnel, dans mes méthodes de travail et la rigueur dont j'essaie de faire preuve, mais aussi un enrichissement sur le plan personnel, où j'ai appris entre autres qu'il était aussi possible (et préférable) d'être parfois optimiste. Comme je ne saurais faire une liste exhaustive de ce que tu m'as apporté, je me contenterais donc d'un merci, pour tout !

J'aimerais ensuite remercier le reste de notre collaboration internationale, Alessandro Pastore et Jesús Navarro. J'ai été amené à travailler en particulier avec Alessandro dans le développement de WHISKY et la partie de mon travail relié à l'astrophysique nucléaire. Ça a toujours été un plaisir de partager avec toi ces séances de *brainstorming* et de recherche de bugs. J'y ai beaucoup appris, et je maîtrise sans doute mieux l'aspect numérique grâce à toi. Avec nos nombreuses discussions, j'ai aussi pu mieux saisir, grâce à tes explications pédagogiques, des notions de physique, comme l'appariement par exemple. Je te remercie pour ta gentillesse, ton franc parler et la manière dont tu as toujours essayé de valoriser mes qualités et me les faire voir.

Je remercie également les autres membres du groupe de physique nucléaire théorique de Lyon. Jacques, tout d'abord, avec qui j'ai passé des heures et des heures à discuter, à noircir des pages pour vérifier les équations, à tester mes codes numériques. Je ne vous remercierais jamais assez pour tout le temps que vous m'avez accordé, et toutes les choses que vous m'avez appris. Quotidiennement, votre bonne humeur et votre gentillesse ont adouci même les plus compliquées de mes journées. Je remercie aussi Michael et Wouter, qui ont toujours été tous les deux disponibles pour mes questions et m'ont ouvert à de nouveaux horizons de la physique nucléaire. Merci encore à Wouter pour le temps qu'il a consacré à vérifier, à l'aide de MOCCA, que WHISKY était robuste, y compris pour les nouveaux termes de Skyrme N₂LO. Merci à Michael qui a toujours pris le temps de discuter avec moi et de lire ma thèse en détails pour me donner des corrections pertinentes (que j'espère avoir correctement incorporées). J'espère que nous serons encore amenés à collaborer à l'avenir. Je remercie enfin Karim, qui m'a permis d'avoir un point de départ pour le développement de WHISKY et de l'ajustement et a passé du temps à répondre à mes questions. Mes trois années dans le groupe ont réellement été stimulante, et travailler au milieu de personnes si passionnées et expérimentées va incontestablement me manquer.

Je n'oublie pas Yoann Lallouet qui a passé des semaines (y compris durant ses vacances) à vérifier les formules pour Skyrme N₂LO et Skyrme N₃LO, ainsi que toutes ses corrections de mon manuscrit. Dans ces

derniers mois de thèse, je te remercie pour cette aide qui a réellement été salvatrice.

Je remercie tous les membres de mon jury, en particulier Gianluca Coló et Sophie Peru-Desenfants qui ont accepté d'être mes rapporteurs. Merci pour leurs corrections avisées, en particulier Sophie dont l'appel téléphonique avant ma soutenance m'a permis de remettre en perspective certains aspects de mon travail, notamment sur l'interaction de Gogny. Merci enfin à Sandrine Courtin pour avoir accepté de faire partie de ce jury après m'avoir eu en cours durant mon cursus à Strasbourg.

Je finis mes remerciements par tous les gens avec qui j'ai passé ces trois années au quotidien. Les doctorants avec qui j'ai passé tant de midi à débattre et à décompresser. Je pense à Emeline, Anne-Laure, Solène, Nicolas D., Boris, Robin, Brice, Nicolas B., Albert, Tia, Alexandre ainsi qu'aux autres que j'ai pu oublier. Un grand merci à Bertrand, qui a partagé mon bureau pendant plus de deux longues années, avec qui j'ai aimé discuter, apprendre et partager des opinions pas toujours identiques, du thé pas toujours très bon et une plante verte. J'espère que tu t'occuperas dignement de notre bouilloire et de notre espace détente inachevé jusqu'à ton départ. Je n'oublie pas les autres personnes qui m'ont accompagné et avec qui j'ai partagé de bons moments durant ces trois ans : Astrid (ma consœur, désormais elle aussi docteure, de Master 2. On y est arrivé !), Hugues, Pierre et tous les autres.

Enfin, un merci tout particulier à Guillaume, avec qui j'ai partagé un appartement durant plus de trois ans, avec tout ce que ça implique de bonnes choses que je regretterais (en particulier nos fameuses mini-quiches, nos dégustations de bières et de fromages, nos soirées sushi quotidiennes et nos intermèdes ludiques...et quelqu'un pour faire la vaisselle). L'entraide au quotidien dans notre "colocation scientifique" a vraiment rendu cette épopée, d'étudiants à docteurs, plus qu'agréable pour moi et m'a aidé à toujours aller de l'avant, et la voilà donc immortalisée ici..

1

Introduction

LA PHYSIQUE qui régit la compréhension du noyau atomique n'a cessé d'évoluer depuis sa découverte en 1911, et si le nombre total de nucléons A et le nombre de protons Z suffit à identifier un noyau, comprendre la manière dont toutes ces particules interagissent est un problème bien plus épineux. Un tel système est en effet un problème à N -corps, le nombre de nucléons pouvant aller jusqu'à 300. Sa description est complexe en physique classique, mais s'avère impossible en physique quantique lorsque l'on veut résoudre l'équation de Schrödinger pour plus de 3 nucléons. Il faut donc envisager des approximations pour rendre le problème soluble.

Le modèle de la goutte liquide est l'un des premiers modèles ayant tenté d'obtenir une description du noyau atomique. Il postule que le noyau se comporte comme un fluide et, hormis le terme d'appariement, ne rend pas compte de sa nature. Ce modèle permet de bonnes prédictions sur les masses des noyaux et les propriétés de volume, mais échoue à rendre compte de phénomènes plus complexes comme les modes d'excitations.

Si l'on veut comprendre le noyau, il est donc pertinent de s'intéresser à la manière dont les nucléons qui le composent interagissent entre eux. A la lumière de leur nature composite, la manière la plus fondamentale de décrire l'interaction nucléon-nucléon serait de les voir comme des quarks échangeant des gluons. Cette approche est compliquée car le terme d'auto-interaction des gluons rend la chromodynamique quantique (QCD) hautement non-perturbative dans la gamme d'énergie relative aux noyaux.

A une échelle d'énergie un peu moins élevée, il devient possible de faire abstraction des éléments qui composent le nucléon. On peut alors étudier l'interaction *via* l'échange de mésons [1, 2]. Ces forces sont aujourd'hui phénoménologiques et leurs paramètres sont ajustés sur les déphasages obtenus par diffusion nucléon-nucléon à basse énergie (≤ 300 MeV). La diffusion neutron-neutron n'étant pas possible, il est nécessaire d'obtenir les valeurs pour l'interaction neutron-neutron par analyse de collisions avec un deutéron. Ces expériences permettent de connaître des propriétés sur l'interaction nucléon-nucléon hors du milieu, ou "nue", que l'on sait différente de celle à l'intérieur du milieu nucléaire. L'utilisation pratique de ces propriétés pour la description du milieu nucléaire, appelée calculs *ab initio*, est un défi technique, en raison de la forte répulsion à

courte distance, aussi nommée phénomène de cœur dur, et du grand nombre de particules. De plus, ces forces dites réalistes incorporent rarement un terme à trois corps réaliste en raison du manque de données expérimentales. Certaines utilisent donc un terme à trois corps ajouté phénoménologiquement, comme le potentiel d'Urbana [3]. Il existe aussi des calculs *ab-initio* plus récents, qui peuvent incorporer des potentiels à 3 et 4 corps issus de la théorie effective chirale (*Chiral EFT*). De telles méthodes décrivent actuellement des noyaux magiques jusqu'au ^{132}Ca [4, 5].

L'une des manières de contourner ces difficultés techniques est d'utiliser une approche microscopique phénoménologique. La démarche est la suivante : on constate expérimentalement qu'apparaît au centre des noyaux lourds un phénomène de saturation, qu'il existe des nombres de protons ou de neutrons appelés nombres magiques pour lesquels les noyaux sont plus stables et qu'une partie de l'énergie du noyau provient de contributions à trois corps. On construit alors une interaction, appelée interaction effective, dont l'objectif est de reproduire le plus grand nombre de ces observations. Pour ce faire, ces interactions sont composées des paramètres libres qui seront ajustés sur des données expérimentales. En se basant sur la valeur du libre parcours moyen du neutron, il est également possible de simplifier le problème à N-corps en postulant qu'une particule ne perçoit qu'un potentiel engendré par toutes les autres. Il s'agit de l'hypothèse du champ moyen.

L'une des méthodes les plus reconnues pour ensuite utiliser l'interaction effective construite est celle de la fonctionnelle de la densité de l'énergie. Elle est particulièrement utilisée en physique nucléaire pour traiter le problème à N-corps, et trouve son origine dans la physique atomique [6]. Celle-ci présente l'avantage de pouvoir décrire les noyaux lourds ou les noyaux de masses intermédiaires avec l'interaction appropriée. L'une des premières à avoir exploité une telle méthode est l'interaction de Skyrme [7] dans les années 70.

À l'origine, T.H.R. Skyrme a suggéré que l'interaction effective entre deux nucléons dans le milieu nucléaire pouvait être décrite en utilisant une interaction de contact (conférant à son interaction son caractère local) incluant des termes composés de gradients permettant de simuler une portée finie. Ainsi, cette interaction phénoménologique contenait initialement tous les termes permis en gradients jusqu'à l'ordre 2. D'autres termes, toujours de contact et pouvant incorporer des gradients, mais ajoutés pour décrire des phénomènes en particulier étaient incorporés dans l'interaction : un terme spin-orbite, un terme tenseur, un terme d'onde D (4ème ordre en gradient) et une contribution à 3 corps. L'implémentation de tous ces termes est motivée par des constatations expérimentales. Un terme phénoménologique imitant des contributions à 4 corps était également présent. Avec Vautherin et Brink [8], cette interaction a été simplifiée afin de pouvoir être utilisée en pratique : la partie à 3 corps a été remplacée par un terme à deux corps dépendant de la densité du milieu. L'onde D¹ a quant à elle été abandonnée. C'est cette formulation, parfois appelée Skyrme standard, qui est encore principalement utilisée de nos jours.

Récemment, la collaboration UNEDF² [9] est arrivée à la conclusion, après avoir testé toutes les paramétrisations possibles, que l'interaction de Skyrme en l'état avait atteint ses limites, et que des extensions de celle-ci étaient indispensables.

Une proposition d'extension est faite dans ce manuscrit. Celle-ci consiste à envisager un développement en gradients jusqu'à l'ordre 6, contenant donc à la fois les termes d'ondes D et d'ondes F. Ce travail a été initié par Raimondi *et al* [10, 11] dans un cadre général. Nous avons considéré une telle extension dans le cas particulier du respect de l'invariance de jauge, afin d'assurer la conservation de l'équation de continuité. Une telle interaction est appelée Skyrme N₃LO car celle-ci va jusqu'au "*next-to-next-to-next-to-leading-order*". Celle-ci est présentée dans le chapitre 2, ainsi que le contexte général dans lequel elle s'inscrit. Deux interactions de portée finie, Gogny [12] et M₃Y [13], sont également introduites afin d'offrir un état des lieux des principales

1. C'est à dire une contribution en gradient à l'ordre 4
2. Unified Nuclear Energy Density Functional

interactions de structure nucléaire. Elles permettront également d'explorer le lien entre interaction de portée finie et interaction de portée nulle (ou de contact). Un effort sera fait pour mettre en avant les avantages et inconvénients de chacune de ces interactions.

L'un des premiers tests généralement effectué dans le développement d'une interaction est de regarder son comportement dans le milieu nucléaire idéal de la matière infinie (symétrique et asymétrique). Le chapitre 3 introduira donc un tel modèle. Les "observables" théoriques, appelées pseudo-observables car issues d'un modèle parfait, que l'on peut extraire pour évaluer les performances d'une interaction seront également introduites. Le travail exploratoire mené pour Skyrme N₂LO et N₃LO dans la matière infinie y sera alors présenté. Nous montrerons notamment que Skyrme N₃LO offre une nouvelle flexibilité permettant de reproduire davantage de contraintes que Skyrme NLO (ou Skyrme standard). Cette flexibilité sera mise à contribution dans le cas pratique de la description d'une étoile à neutron à la fin du chapitre.

Nous avons également voulu comparer les performances de notre nouvelle interaction avec d'autres interactions effectives également employées en structure nucléaire. Le chapitre 4 contient les résultats obtenus pour les interactions de Gogny et M₃Y, deux interactions de portées finies présentées dans le chapitre 1. Ces résultats seront mis en perspective avec ceux obtenus par Skyrme N₃LO. Enfin, nous tenterons d'établir des relations entre ces interactions de portée finie et l'interaction de Skyrme de portée nulle.

Dans le chapitre 5, nous exposerons les développements ayant permis l'utilisation de notre interaction étendue à N₂LO pour le calcul de quantités associées à des noyaux, sous l'hypothèse de symétrie sphérique. Nous présenterons également les premiers développements pour permettre de tels calculs avec N₃LO. Tous les ingrédients nécessaires à l'implémentation d'une telle interaction dans un code Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) sous l'hypothèse de symétrie sphérique seront fournis dans le manuscrit. Les performances de notre code WHISKY₂ ainsi que la méthode permettant la résolution de l'équation de champ-moyen de Skyrme N₂LO seront également détaillées.

Le sixième et dernier chapitre de ce manuscrit présentera un ajustement réalisé avec l'interaction Skyrme N₂LO prenant en compte à la fois les contraintes de la matière infinie et des contraintes associées aux noyaux. La stabilité de l'interaction fera également l'objet d'une contrainte en incorporant la réponse linéaire [14], outil de la matière infinie permettant de détecter si la paramétrisation présente des instabilités, entraînant ainsi de mauvais comportements dans son utilisation pour les calculs de noyaux. Celle-ci sera également présentée dans ce chapitre. Nous y exposerons la manière dont l'ajustement a été réalisé, et les principaux résultats qui en découlent.

2

Interaction nucléon-nucléon et interaction effective

Nous allons, dans ce chapitre, rappeler les motivations qui nous conduisent à employer des forces nucléaires phénoménologiques et la manière dont celles-ci sont construites. Nous passerons ensuite en revue les trois principales interactions effectives phénoménologiques employées actuellement en structure nucléaire et qui seront ensuite utilisées dans la suite de l'exposé. Enfin, nous nous attarderons plus précisément sur une extension possible à l'une d'entre elles, le pseudo-potentiel de Skyrme, en envisageant un développement en gradient au delà de l'ordre 2.

2.1 Du noyau à l'interaction nucléon-nucléon effective

2.1.1 Résoudre le problème à N-corps

La physique nucléaire est un domaine vaste qui recouvre de nombreux phénomènes dont la physique peut-être très différente (collisions, diffusion, fusion, ...) mais dont le point commun est la description, d'une manière ou d'une autre, du noyau atomique. L'objectif principal de la structure nucléaire est d'aboutir à une meilleure description de l'état fondamental des noyaux, c'est-à-dire être en mesure d'obtenir à la fois leur masse, et les niveaux d'énergie de particules individuelles des nucléons qui les composent. Idéalement, un modèle doit également pouvoir reproduire ces observables sur l'ensemble de la charte des noyaux. Pour l'heure, on atteint une bonne description des propriétés des noyaux magiques pour lesquels les données expérimentales sont nombreuses, précises et connues depuis plus longtemps en raison de leur stabilité. Les noyaux lourds et/ou exotiques, qui se situent loin de la vallée de la stabilité, s'avèrent plus compliqués à reproduire et nécessitent de prendre en compte les déformations de tels noyaux.

Pour tenter de décrire le système nucléaire, plusieurs options s'offrent à nous :

- l'utilisation du modèle macroscopique de la goutte liquide évoqué dans l'introduction. La caractérisa-

tion du noyau comme une goutte de "matière nucléaire" uniforme permet de définir des énergies de volume, de surface, ...qui sont toutes régies par un paramètre déterminé phénoménologiquement. Ce modèle historique, qui a connu des raffinements par une approche microscopique-macroscopique (*mic-mac*) incluant mieux les propriétés quantiques comme l'appariement, permet de décrire correctement les énergies de liaisons avec une déviation standard de l'ordre de $\sigma = 0.54$ MeV [15]. Ce modèle a toutefois un faible pouvoir prédictif pour des noyaux exotiques et reproduit difficilement les énergies de particules individuelles des noyaux.

- l'utilisation de la chromodynamique quantique, qui caractérise l'interaction forte entre les nucléons. Cependant, la forme exacte de cette interaction n'est pas connue à l'heure actuelle, et l'utilisation de traitements perturbatifs dans la gamme d'énergie relative aux noyaux est irréalisable. Il semble toutefois possible de construire aujourd'hui un proton ou un neutron isolé [16, 17], et d'éventuellement avoir un état lié à deux nucléons. On comprend donc immédiatement que la description de systèmes avec plusieurs dizaines de nucléons semble compromise à court et moyen terme.
- une approche dite *ab-initio* ou réaliste se basant sur l'interaction nucléon-nucléon libre obtenue par diffusion, ou interaction "nue". Cette interaction est caractérisée par une courte portée répulsive en raison du principe de Pauli, une longue portée attractive et une moyenne portée faisant le lien entre les deux et généralement ajoutée phénoménologiquement [18]. On citera les potentiels de Nijmegen [19], Bonn Bonn, d'Hamada-Johnston [20], de Paris [21] ou d'Argonne [22, 23]. Notons que les deux premiers potentiels se basent sur l'échange de mésons, ce qui laisse moins de place à la phénoménologie que pour les autres potentiels cités. Ces méthodes décrivent l'interaction nucléon-nucléon dans le vide. Ils utilisent ensuite une approche perturbative du milieu nucléaire, où est construite une matrice G définie comme une série infinie de l'interaction à deux corps. Dans les noyaux finis, une telle matrice ne peut être considérée telle quelle et nécessite des approximations supplémentaires, telle celle de densité locale [24]. Celle-ci postule qu'il est possible d'obtenir la matrice G localement en effectuant un calcul de la matière nucléaire pour une valeur de densité identique à celle de la zone où l'on souhaite obtenir la matrice G . Le traitement de la divergence du au cœur dur de la courte portée et l'infinité de contributions de la matrice G nécessitent d'importantes ressources numériques qui limitent actuellement ces forces. Celles-ci sont également handicapées par l'impossibilité de réaliser expérimentalement une diffusion à trois nucléons, et donc d'obtenir une interaction à trois corps "nue" à implémenter dans les calculs. Pour pallier ce problème, certaines forces incorporent des forces à trois corps phénoménologiques, tel que le potentiel d'Urbana [3]. D'autres, comme les approches de type χEFT ont un trois corps qui apparaît naturellement avec l'échange de deux pions. Celles-ci permettent actuellement d'avoir des calculs qui convergent essentiellement pour des noyaux magiques, comme le ^{12}C [25] et plus récemment le calcium ^{40}Ca [4] et l'étain ^{132}Sn [5]. Il est possible de trouver une approche moderne des calculs *ab-initio* dans les références [17, 26]. Si le phénomène de saturation nucléaire y est effectivement reproduit, il ne l'est pas actuellement à la valeur obtenue expérimentalement. Nous verrons dans le chapitre suivant qu'il est malgré tout intéressant d'utiliser les résultats issus d'une interaction réaliste pour contraindre des forces phénoménologiques dans le cadre de la matière infinie.

Les modèles que nous venons de mentionner ne nous permettent pas pour le moment la description de noyaux lourds tels que le ^{208}Pb , pourtant doublement magique et offrant de ce fait des données expérimentales très précises permettant de contraindre une interaction. Dans la mesure où nous souhaitons avoir une interaction unifiée capable de décrire le plus de noyaux possible de la charte nucléaire, ces voies ne sont pas les plus adaptées. Deux possibilités, fondées sur une approche microscopique et sur l'utilisation d'une force

effective, peuvent alors être utilisées :

- le modèle en couches, qui suppose que le noyau peut être décrit comme quelques nucléons de valence interagissant avec le champ moyen créé par un cœur inerte formé par les autres nucléons. Il peut aussi être possible de considérer tous les nucléons dans l'espace de valence. Cette approche phénoménologique s'applique donc à ajuster les paramètres de l'interaction sur les énergies de particules individuelles d'un noyau, et, une fois une paramétrisation trouvée, parvient à correctement décrire les noyaux qui lui sont proches dans la charte des noyaux. Cette méthode est ainsi particulièrement pertinente et efficace lorsqu'il s'agit d'étudier la spectroscopie et les états excités des noyaux. Pour autant, il est difficile de décrire correctement des noyaux de structure différente avec une interaction unifiée. Il est également compliqué de reproduire les données expérimentales concernant les énergies de particules individuelles de noyaux exotiques et lourds. En effet, les ressources numériques nécessaires pour un calcul croissent directement avec le nombre de nucléons de valence et la taille de l'espace de valence dans lequel ceux-ci évoluent. En conséquence, cette méthode reste essentiellement utilisée pour la description de noyaux jusqu'aux masses intermédiaires.
- le modèle de champ moyen postule que le nucléon d'un noyau ne perçoit pas les autres nucléons individuellement. Il ressent un potentiel moyen dans lequel il "baigne" qui est engendré par l'ensemble des autres nucléons. Un tel modèle permet de simplifier le système en considérant les nucléons comme des particules indépendantes et d'utiliser pour fonction d'onde globale du système un déterminant de Slater. Les interactions appartenant à cette catégorie sont appelées interactions effectives, et sont construites phénoménologiquement. Elles peuvent être classées en deux grandes catégories. Les interactions de portée nulle, qui présupposent un contact pour que les nucléons interagissent. Les interactions de portée finie, pour lesquels les nucléons interagissent jusqu'à une certaine distance. Des exemples de ces deux types d'interactions peuvent être trouvés dans la suite de ce chapitre. Celles-ci sont composées de paramètres libres qui sont généralement déterminés par un ajustement sur des données expérimentales en accord avec ce que l'on souhaite reproduire. C'est ce type d'interactions que nous utiliserons principalement dans ce manuscrit.

2.1.2 Hamiltonien microscopique à N-corps

Le système nucléaire est composé de A particules qui interagissent. Il est possible d'en écrire le Hamiltonien comme une somme des interactions à 1,2,3,..., A corps :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^A \hat{T}_i + \sum_{i<j}^A \hat{v}_{ij} + \sum_{i<j<k}^A \hat{v}_{ijk} + \dots \quad (2.1)$$

La partie à un corps correspond à la somme des énergies cinétiques de chacun des nucléons. La fonction d'onde d'un tel système est notée $|123\dots A\rangle$. Il faut alors résoudre le problème aux valeurs propres :

$$\hat{H} |123\dots A\rangle = E |123\dots A\rangle \quad (2.2)$$

La résolution analytique d'une telle équation en physique quantique ne peut se faire de manière exacte que pour un nombre de particules $A < 3$. L'autre obstacle auquel on est confronté est que les potentiels nucléaires v_{ij}, v_{ijl}, \dots ne sont pas connus exactement. On peut malgré tout deviner la forme que devrait avoir le potentiel nucléaire. Nous allons voir quelles sont les différentes propriétés à respecter.

2.2 Forme générale d'un potentiel à deux corps

Considérons le potentiel d'interaction nucléon-nucléon $\mathcal{V}(1,2)$ le plus général, où l'indice 1 est associé au premier nucléon et l'indice 2 au second nucléon. Chacun des nucléons est identifié par sa position \mathbf{r}_i , par son spin $\sigma_i = \pm\frac{1}{2}$ et son isospin $\tau_i = \pm\frac{1}{2}$. De plus, étant donné la nature de l'interaction nucléaire, un tel potentiel est aussi non local, et possède donc une dépendance en impulsion \mathbf{p}_i . Le potentiel prend donc la forme :

$$\mathcal{V}(1,2) = \mathcal{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \sigma_1, \tau_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2, \sigma_2, \tau_2) \quad (2.3)$$

D'après la nature des interactions nucléaires, un tel potentiel doit aussi respecter sept principes énumérés dans [27] :

1. Hermiticité
2. Invariance par échange des nucléons, $\mathcal{V}(1,2) = \mathcal{V}(2,1)$
3. Invariance par translation (conservation de l'impulsion)
4. Invariance par rotation dans l'espace des positions
5. Invariance galiléenne
6. Invariance par inversion de l'espace (parité)
7. Invariance par renversement du temps

Ces principes sont des guides lorsque l'on construit un potentiel phénoménologique. Ils permettent de savoir, parmi toutes les constructions possibles avec les briques élémentaires $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, s_1, s_2, t_1$ et t_2 , et les produits scalaires, vectoriels et tenseurs qui permettent de les associer, celles que l'on peut conserver. Il est également possible de définir d'autres critères permettant de restreindre le nombre de termes à considérer¹.

De manière générale, il est possible de séparer le potentiel en trois contributions :

$$\mathcal{V}(1,2) = V_C + V_T + V_{LS}, \quad (2.4)$$

à savoir la partie centrale, la partie tenseur et la partie de spin-orbite.

Le terme central est celui qui permet notamment la description des effets de volume, dont celui de la saturation nucléaire. Il est donc systématiquement incorporé. C'est aussi le cas du terme de spin-orbite, qui offre la possibilité d'inclure la dégénérescence de spin, et donc obtenir des niveaux d'énergies de particules individuelles davantage en adéquation avec les observations expérimentales, tout particulièrement pour les nombres magiques. Si des faits expérimentaux, comme le moment quadrupolaire du deutéron par exemple, laissent penser que le terme tenseur est aussi nécessaire à une bonne description du noyau, son incorporation au sein de paramétrisations reste plus rare car celui-ci est plus compliqué à contraindre. Il a été en effet montré [28] que, même dans des noyaux légers, il n'est pas aisé de parvenir à identifier une signature pure du tenseur.

Une fois que l'on a déterminé les termes que l'on veut incorporer, un autre choix à opérer est l'ordre maximum auquel on souhaite utiliser ces briques élémentaires. S'il est en effet possible d'avoir un terme comme $(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2)$, toutes les puissances d'un tel terme sont aussi autorisées par les postulats nucléaires. Il faut alors choisir où s'arrêter. Plus le nombre de termes incorporés est important, plus il faudra trouver de données expérimentales pour contraindre les différents termes. L'objectif est de pouvoir utiliser le moins de paramètres possibles pour décrire un système donné.

1. L'interaction proposée dans ce manuscrit n'est ainsi composée que de termes respectant l'invariance de jauge, afin que celle-ci satisfasse continuellement à l'équation de continuité.

Nous allons maintenant passer en revue les trois interactions effectives phénoménologiques à deux corps qui ont été construites de cette manière et dont il sera question dans cette thèse, à savoir l'interaction de Skyrme, de Gogny et M_3Y .

2.3 Pseudo-potentiels effectifs phénoménologiques

2.3.1 Pseudo-potential effectif de portée nulle : Skyrme

Le pseudo-potential de Skyrme [7] a été développé à la fin des années 50 afin de proposer une alternative au modèle en couches. L'idée de Skyrme était de considérer pour interaction un développement polynomial en gradient jusqu'à l'ordre 2² permis par les principes exposés dans la section 2.2. (incluant les termes tenseurs et le spin-orbite), mais aussi des termes phénoménologiques relatifs au quatrième ordre en gradient (onde D), et à l'interaction à 3 et 4 corps, que Skyrme estimait important à la bonne description des noyaux. C'est au début des années 70 que Vautherin et Brink ont remanié cette interaction [8]. Une analyse complète et détaillée de l'interaction de Skyrme standard peut-être trouvée dans l'article [29].

Interaction standard L'interaction de Skyrme standard, c'est-à-dire telle que proposée par Vautherin et Brink, est décrite par le pseudo-potential à deux corps suivant :

$$\mathcal{V}_{Sk}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}) \quad (2.5)$$

$$+ \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_\sigma) \left[\mathbf{k}'^2 \delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}) \mathbf{k}^2 \right] \quad (2.6)$$

$$+ t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \mathbf{k}' \cdot \delta(\mathbf{r}) \mathbf{k} \quad (2.6)$$

$$+ \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \rho^\alpha(R) \delta(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

$$+ iW_0 \sigma \cdot [\mathbf{k}' \times \delta(\mathbf{r}) \mathbf{k}] \quad (2.8)$$

où on adopte les notations usuelles [8] :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{k} = \frac{1}{2i}(\nabla_1 - \nabla_2), \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2 \quad (2.9)$$

\mathbf{k}' est le complexe conjugué de \mathbf{k} agissant à gauche et $P_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$ l'opérateur d'échange de spin. Comme on peut le voir par la présence des $\delta(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$, l'interaction de Skyrme est une interaction de portée nulle, ou de contact.

Les 10 paramètres qui composent ce pseudo-potential sont :

$$\{t_0, x_0, t_1, x_1, t_2, x_2, t_3, x_3, \alpha, W_0\} \quad (2.10)$$

Dans la suite de ce manuscrit, nous appellerons l'interaction de Skyrme présentée ci-dessus Skyrme NLO.

Le terme (2.5) est un terme central purement local. L'autre terme purement local (2.7), traduisant une contribution de la force à 3-corps, présente en outre la particularité de dépendre de la densité du milieu. Le

2. c'est à dire jusqu'au *next-to-leading order* (NLO) en gradient.

terme (2.6) est un terme de contact, mais généralement considéré comme "non-local" car il permet de simuler une portée finie par ses dépendances en gradient. Le terme (2.8), enfin, est le terme usuel de spin-orbite.

Terme dépendant de la densité On parle de pseudo-potential de Skyrme, et non de potentiel, car celui-ci présente une dépendance de la densité du milieu, ce qui ne devrait pas être le cas d'une "vraie interaction". Initialement, ce terme était incorporé par Skyrme comme une force à trois corps phénoménologique de contact sans dépendance en densité, mais cela ne permettait pas de reproduire les propriétés de saturation de la matière nucléaire, et entraînait un effondrement de la matière infinie polarisée. Un terme analogue à (2.7) a ensuite été envisagé, mais uniquement avec $\alpha = 1/3$. C'est notamment le cas de la paramétrisation SIII [30]. De telles interactions reproduisaient la saturation, mais l'incompressibilité de la matière nucléaire infinie était trop haute, et l'exposant de la densité a alors été ajouté afin de pouvoir mieux contrôler cette pathologie. Un tel exposant, lorsqu'il n'est pas entier, rompt définitivement le lien avec une interaction à trois corps, car il n'est plus possible de faire un développement de Taylor pour isoler les contributions à 3 corps, 4 corps, ... Il a été montré que l'exposant devait être inférieur à 1, et plus précisément compris entre 1/6 et 1/3, pour obtenir une reproduction satisfaisante [31–33] à la fois de l'incompressibilité et de la masse effective dans la matière infinie.

Un autre problème inhérent à ce terme est qu'il induit un terme ne respectant pas le principe de Pauli. L'utilisation du terme à 3 corps remplacé par un terme à deux corps de contact entraîne en effet l'hypothèse que les trois nucléons sont au même point \mathbf{r}_1 de l'espace. Ce terme est aussi celui qui empêche l'interaction de Skyrme d'être utilisée facilement au-delà du champ moyen. Pour ces raisons, des recherches sont menées afin de remplacer ce terme par une force à trois corps plus réaliste, comme par exemple [34]. Si ce terme est l'objet de nombreux débats et porte à lui seul une partie des faiblesses des interaction dites de Skyrme, on pourra argumenter qu'un exposant fractionnaire de la densité apparaît naturellement dans les calculs de la matière nucléaire infinie, où $k_F \propto \rho^{1/3}$. L'approximation de la densité locale, qui postule que l'on peut localement considérer les propriétés d'un système fini comme celle d'un système infini homogène, peut donc justifier l'utilisation d'un tel terme.

Termes tenseur À cette interaction s'ajoutent parfois les termes tenseurs [28] jusqu'au deuxième ordre en gradient,

$$\mathcal{V}_{Sk}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')_T = \frac{1}{2}t_e T_e(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \frac{1}{2}t_o T_o(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad (2.11)$$

où les fonctions T_e et T_o sont appelées ainsi car respectivement paire (*even*) et impaire (*odd*) par renversement du temps. Les expressions pour T_e et T_o sont :

$$T_e(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k}')(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}') + 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}) - (\mathbf{k}'^2 + \mathbf{k}^2)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2), \quad (2.12)$$

$$T_o(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k}')(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}) + 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}') - 2(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2). \quad (2.13)$$

La partie tenseur ajoute deux paramètres t_e et t_o à l'interaction de Skyrme. La motivation expérimentale pour l'introduction d'un tel terme est généralement le moment quadripolaire du deuteron, et le rôle essentiel joué par la force tenseur dans l'existence de l'état lié de ce dernier. Dans l'interaction de Skyrme, ces termes ajoutent de nouvelles contributions pour la description d'un noyau. Dans le cas spécifique d'un noyau

3. C'est d'ailleurs pour cette raison historique que le terme est toujours écrit tel que $t_3/6$.

sphérique, ils ne contribuent qu'à une contribution pré-existante dans Skyrme NLO reliée au paramètre de spin-orbite. Ils agissent donc principalement au niveau des énergies de particules individuelles et induisent naturellement une nouvelle répartition des contributions des différents paramètres, en particulier celui du spin-orbite. Il est donc compliqué d'introduire le tenseur perturbativement [35] et celui-ci doit être ajusté en même temps que tous les autres paramètres. C'est le cas des paramétrisations T_{ij} [28], grâce auxquelles une étude systématique du comportement des énergies de particules individuelles avec et sans terme tenseur pour Skyrme NLO a été réalisée. Ces dernières, malheureusement, se sont avérées instables⁴. Cela est en partie due au fait qu'il s'agit de forces basées sur SLy5, instable elle aussi [36], et sur le protocole SLy [37] qui ne contraint pas la stabilité. Précisons toutefois que ces instabilités de tailles finies apparaissent uniquement dans le calcul de noyaux déformés. Nous montrerons dans la section 6.2.2 qu'a été développée récemment la réponse linéaire, permettant de détecter ces instabilités [38]. L'interaction SLy5 a ainsi été réajustée en incorporant de telles contraintes[39]. Il serait peut-être possible d'obtenir des interactions de Skyrme, comportant les termes tenseurs et stables. Les conclusions de l'article [35] confirment néanmoins que les contributions spin-orbite et tenseurs sont très corrélés. De plus, en étudiant l'interaction SLy4T [14], il a été montré que l'ajustement d'une telle interaction sur une observable spécifique à une zone de la charte nucléaire (séparation des énergies de particules individuelles de certains noyaux) détériore le pouvoir prédictif de l'interaction en dehors de cette zone.

Une étude complète et détaillée de l'utilisation des termes tenseurs peut-être trouvée dans l'article [40]

Dans le reste de la thèse, le terme tenseur est utilisé uniquement lorsque l'on effectuera l'ajustement des ondes partielles, mais n'est pas encore présent dans l'ajustement que l'on présentera dans le chapitre 6.

Avantages et inconvénients L'interaction de Skyrme est souvent utilisée à cause de sa portée nulle qui permet d'obtenir des expressions analytiques. Nous verrons dans le chapitre suivant le cas de la matière infinie, où des pseudo-observables peuvent être directement exprimées en fonction des paramètres de l'interaction. Dans le chapitre 4, nous constaterons que la fonctionnelle de la densité d'énergie est également analytique, contrairement à celle des potentiels de portée finie. Cette propriété permet en particulier à l'interaction de Skyrme d'être moins gourmande en ressources numériques, et d'effectuer des calculs de noyaux plus rapidement que la plupart des interactions effectives.

Les inconvénients sont pour la plupart reliés à la partie dépendante de la densité qui rend plus compliquée l'utilisation de l'interaction au delà du champ moyen. Celle-ci ne respectera pas alors strictement le principe de Pauli et sera contaminée par des effets d'auto-interaction. Il est néanmoins possible de tenter une régularisation de l'interaction [31, 32, 41, 42]. Comme il s'agit d'une force phénoménologique, son pouvoir prédictif au-delà des régions dans lesquelles elle a été ajustée est limité. C'est notamment l'une des raisons qui fait que la description de noyaux plus exotiques, nécessitant un traitement au-delà du champ moyen à cause de déformations complexes, reste un défi pour les interactions de Skyrme. En effet, les données expérimentales nécessaires pour contraindre les paramètres pour de tels noyaux restent aujourd'hui relativement rares. D'autre part, la présence de la portée nulle engendre, par transformée de Fourier dans l'espace des impulsions, un espace de très grande taille qui complique l'implémentation de l'appariement. Il est alors nécessaire, contrairement aux interactions de portée finie, de mettre en place une coupure pour réaliser les calculs.

Si cette interaction possède de réelles possibilités pour décrire les énergies de l'état fondamental, les premiers états excités ou les rayons de charge de noyaux lourds et de masses intermédiaires, des efforts sont encore à fournir concernant la description de noyaux plus exotiques. C'est la conclusion de la collaboration

4. On entend ici par instable une paramétrisation dont les calculs ne convergent pas pour certains noyaux, ou dont l'énergie totale diverge.

internationale [9] visant à trouver une fonctionnelle de la densité de l'énergie en physique nucléaire la plus performante possible. Nous allons donc tenter de proposer ici une extension à cette interaction dans la section 2.4.

2.3.2 Pseudo-potentiel de portée finie : potentiel de Gogny

Forme standard L'interaction de Gogny est apparue dans les années 70 et vise le même but que l'interaction de Skyrme, à savoir décrire les propriétés statiques des noyaux sphériques et déformés. Dans sa forme standard [43], on trouve également un terme central, un terme de spin-orbite et un terme dépendant de la densité :

$$\mathcal{V}_G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i=1}^2 [W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau] e^{-(r/\mu_i^C)^2} \quad (2.14)$$

$$+ iW_0(\sigma_1 + \sigma_2) \cdot [\mathbf{k}' \times \delta(\mathbf{r})\mathbf{k}] \quad (2.15)$$

$$+ t_{DD}(1 + x_{DD}P_\sigma)\rho^\alpha(\mathbf{R})\delta(\mathbf{r}). \quad (2.16)$$

Le pseudo potentiel incorpore au total 14 paramètres :

$$\{W_1, B_1, H_1, M_1, \mu_1, W_2, B_2, H_2, M_2, \mu_2, t_{DD}, x_{DD}, \alpha, W_0\} \quad (2.17)$$

Le terme central (2.14) est la somme de deux gaussiennes, chacune ayant une portée μ_i^C dépendante de la paramétrisation. Les termes de spin-orbite (2.15) et dépendant de la densité (2.16) sont les mêmes que ceux de l'interaction standard de Skyrme [30]. Bien que le potentiel de Gogny soit dit de portée finie à cause de la portée de ses termes centraux, il incorpore pourtant un terme de contact.

Les conventions sont ici les mêmes que précédemment citées pour Skyrme (2.9). Tout particulièrement, si les paramètres du terme dépendant de la densité étaient notés t_0 et x_0 dans l'article de Gogny d'origine [43], dans le reste de cet exposé, j'utiliserai la notation t_{DD} et x_{DD} , afin d'éviter toute confusion avec le terme de Skyrme. En effet, si la structure est identique, il existe un facteur 1/6 entre les paramètres t_3 et t_{DD} .

Termes tenseurs L'inclusion d'un terme tenseur explicite a été proposée par les auteurs des articles [44, 45]. Nous utiliserons quant à nous la forme la plus récente [46, 47] pour le reste du manuscrit :

$$\mathcal{V}_G^T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (V_{T1} + V_{T2}P_\tau)e^{-(r/\mu^T)^2} r^2 S_{12}, \quad (2.18)$$

où l'on définit l'opérateur tenseur comme

$$S_{12} = 4 [3(\mathbf{s}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\mathbf{s}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) - \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2], \quad (2.19)$$

et où $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$ sont les opérateurs de spin des nucléons. Pour établir un lien avec le terme tenseur de Skyrme présenté dans l'Eq.(2.11), on précise que $s_i = \sigma_i/2$.

Les nouveaux paramètres V_{T1}, V_{T2} n'ont pas été ajustés avec les autres paramètres, mais ajoutés perturbativement sans modification des termes centraux. Comme pour le pseudo-potentiel de Skyrme, les termes tenseurs et spin-orbite sont liés, l'ajout du terme tenseur entraîne donc la modification du paramètre W_0 associé au spin-orbite [46].

Avantages et inconvénients Le grand avantage de l'interaction de Gogny est d'avoir été créée en ayant à l'esprit la nécessité d'incorporer l'appariement. Cet appariement est incorporé dans le canal particule-particule avec la même interaction, à l'exception du terme dépendant de la densité. Toutes les propriétés liées à ce phénomène sont ainsi généralement prises en compte par les différentes paramétrisations. La présence de la portée finie de l'interaction de Gogny rend les calculs analytiques plus lourds que ceux de l'interaction de Skyrme. Cet inconvénient se retrouve ensuite de la même manière lors de traitement numérique de l'interaction, où il est impossible de traiter l'interaction de Gogny par la méthode de la fonctionnelle de la densité d'énergie. De plus, les calculs avec l'interaction de Gogny se font traditionnellement sur une base d'oscillateurs harmoniques. Cette méthode nécessite la gestion d'un paramètre supplémentaire qui est la taille de la base. Il a été aussi montré que les calculs effectués sur une telle base rendaient plus difficile la détection d'instabilités de taille finie [48]. Enfin, lors du calcul de déformations, il est nécessaire d'avoir une idée préalable de la déformation car la base doit être choisie avec les mêmes propriétés pour de meilleurs résultats.

A l'instar de Skyrme, de nombreuses paramétrisations ont été ajustées [43, 49, 50] afin de reproduire des propriétés de noyaux magiques (énergies de liaisons, les tailles, les niveaux d'énergie, les propriétés de l'appariement, la matière de neutron,...).

Une nouvelle interaction, nommée D2, comportant une dépendance en densité de portée finie, a été récemment développée [51].

2.3.3 Pseudo-potential de portée finie : potentiel M₃Y

L'interaction M₃Y [52] a été construite à l'origine pour étudier les diffusions inélastiques, cherchant à utiliser les interactions nucléon-nucléon nues au travers des éléments de leur matrice G. Celle-ci est ajustée comme une somme de fonction de Yukawa. Cette interaction effective a été récemment étendue à la description de la structure nucléaire par Nakada [13, 53, 54] avec notamment l'addition d'un terme dépendant de la densité analogue à celui de Skyrme pour obtenir une valeur correcte de la saturation dans la matière nucléaire symétrique. C'est cette version qui sera utilisée dans cette thèse.

Comme pour les deux interactions précédentes, M₃Y contient une partie centrale (avec termes dépendants de la densité), une partie tenseur et une partie spin-orbite :

$$\mathcal{V}_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{V}_N^C + \mathcal{V}_N^T + \mathcal{V}_N^{LS}, \quad (2.20)$$

où l'indice N signifie Nakada.

Terme central Le terme central est la somme de trois fonctions de Yukawa

$$\mathcal{V}_N^C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i=1}^3 \left[t_i^{(SE)} P_{SE} + t_i^{(TE)} P_{TE} + t_i^{(SO)} P_{SO} + t_i^{(TO)} P_{TO} \right] \frac{e^{-r \mu_i^C}}{r \mu_i^C} + \mathcal{V}_N^{DD}, \quad (2.21)$$

où l'on retrouve la coordonnée relative $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, et les opérateurs de projection P_{SE}, P_{TE}, \dots sur les états à deux corps singulet-pair, triplet-pair, . . . Ces opérateurs peuvent être exprimés en fonction des opérateurs

d'échange de spin et d'isospin P_σ et P_τ :

$$\begin{aligned} P_{SE} &= \frac{1}{4}(1 - P_\sigma)(1 + P_\tau), & P_{TE} &= \frac{1}{4}(1 + P_\sigma)(1 - P_\tau), \\ P_{SO} &= \frac{1}{4}(1 - P_\sigma)(1 - P_\tau), & P_{TO} &= \frac{1}{4}(1 + P_\sigma)(1 + P_\tau). \end{aligned}$$

Chacune de ces projections est conditionnée par un paramètre, pour chacune des trois fonctions de Yukawa, offrant donc 12 paramètres, auxquels on ajoute les trois portées. Ces portées μ_i^C ont été fixées, contrairement à celles de l'interaction de Gogny, dans Ref. [55] en ajustant l'interaction M₃Y-Po sur les résultats du potentiel de Paris. Précisons également que contrairement à l'interaction de Gogny, les portées de M₃Y ont une signification physique. Elles sont reliées aux masses de trois mésons, permettant de couvrir des courtes, moyennes et longues portées ($\mu_1^{-1} = 0.25$ fm (m=790 MeV), $\mu_2^{-1} = 0.4$ fm (m=490 MeV), $\mu_3^{-1} = 1.414$ fm (m=140 MeV)). Le terme dépendant de la densité est un terme de portée nulle analogue à ceux utilisés dans l'interaction de Skyrme et de Gogny :

$$\mathcal{V}_N^{DD}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = t^{(DD)}(1 + x^{(DD)}P_\sigma)\rho^\alpha(\mathbf{r}_1)\delta(\mathbf{r}). \quad (2.22)$$

On obtient donc un total de 18 paramètres à fixer :

$$\left\{ t_1^{(SE)}, t_1^{(TE)}, t_1^{(SO)}, t_1^{(TO)}, \mu_1^C, t_2^{(SE)}, t_2^{(TE)}, t_2^{(SO)}, t_2^{(TO)}, \mu_2^C, t_3^{(SE)}, t_3^{(TE)}, t_3^{(SO)}, t_3^{(TO)}, \mu_3^C, t^{(DD)}, x^{(DD)}, \alpha \right\} \quad (2.23)$$

Les plus récentes paramétrisations [13] utilisent une combinaison de deux termes dépendant de la densité ρ , avec des puissances de la densité différentes pour les contributions singulet-pair et triplet-pair [54].

Termes tenseurs et spin-orbite Les termes tenseurs et spin-orbite sont aussi des sommes de fonctions de Yukawa :

$$v_N^T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i=1}^2 \left[t_i^{(TNE)}P_{TE} + t_i^{(TNO)}P_{TO} \right] \frac{e^{-r\mu_i^T}}{r\mu_i^T} r^2 S_{12}, \quad (2.24)$$

$$v_N^{LS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i=1}^2 \left[t_i^{(LSE)}P_{TE} + t_i^{(LSO)}P_{TO} \right] \frac{e^{-r\mu_i^{LS}}}{r\mu_i^{LS}} \mathbf{L}_{12} \cdot (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2). \quad (2.25)$$

Les portées des fonctions de Yukawa pour le terme spin-orbite μ_n^T, μ_n^{LS} ne sont pas les mêmes que celle présentes dans le terme central [53]

Il est intéressant de noter qu'un terme dépendant de la densité a aussi été ajouté au terme spin-orbite [56] afin de reproduire les effets des interactions à trois nucléons. Ce terme ne sera pas traité dans cette thèse.

Avantages et inconvénients Les interactions du type M₃Y ont l'avantage d'avoir été construites à l'interface de calculs *ab-initio*, et ont donc un lien avec la physique des collisions. Les premiers points des ondes partielles obtenues par des calculs Brueckner-Hartree-Fock (BHF) ont été incorporés au protocole d'ajustement à cet effet. Contrairement à l'interaction de Gogny, dont la signification des portées est uniquement spatiale (courte, moyenne ou longue portée), M₃Y utilise des portées qui ont une signification physique. Les fonctions de Yukawa de l'interaction autorisent également un meilleur comportement des queues de fonction d'ondes de M₃Y que de celles de Gogny ou de Skyrme car celle-ci décroissent moins vite et peuvent donc rendre compte d'une plus longue portée d'interaction. Ces fonctions de Yukawa sont néanmoins plus délicates à uti-

liser pour l'appariement, et rendent les calculs plus lourds que pour les deux autres interactions considérées et incorporent un nombre plus important de paramètres. Ces interactions présentent malgré tout l'avantage d'être les premières interactions de portée finie à avoir inclus le paramètre tenseur non perturbativement.

2.4 Extension de Skyrme en gradients jusqu'à l'ordre 6 (N₃LO)

On rappelle que l'objet de cette thèse est le développement d'une extension à l'interaction de Skyrme en considérant les termes en gradients d'ordre supérieur.

Motivation La collaboration internationale *Unified Nuclear Energy Density Functional* (UNEDF) a montré, en utilisant diverses techniques de minimisation, et en utilisant une large variété de données (spectre des énergies de particules individuelles et énergies de liaisons de noyaux à couches fermées, écarts en états de particules individuelles, barrières de fissions, . . .), que l'interaction de Skyrme avait atteint ses limites dans la description de la structure nucléaire et qu'il était nécessaire de lui trouver des extensions [9]. L'onde D, comme le soulignait déjà Skyrme dans son article [?], possède une importance toute particulière. En effet, dans l'interaction standard telle que présentée dans la section précédente, aucun des termes ne contient de contributions d'ondes D mais uniquement des ondes S et P. Or, il a été prouvé expérimentalement par diffusion nucléon-nucléon qu'il y avait une contribution non-négligeable des ondes D. Si l'on se base sur des calculs *ab-initio* effectués par Baldo dans le modèle idéal de la matière infinie symétrique [57], et dont les contributions à l'énergie totale ont été tracées sur la figure 2.1, on peut voir que l'ordre de grandeur des ondes D au niveau de la densité de saturation ($k_F \simeq 1.3\text{-}1.4 \text{ fm}^{-1}$)⁵ est comparable à celui des ondes P.

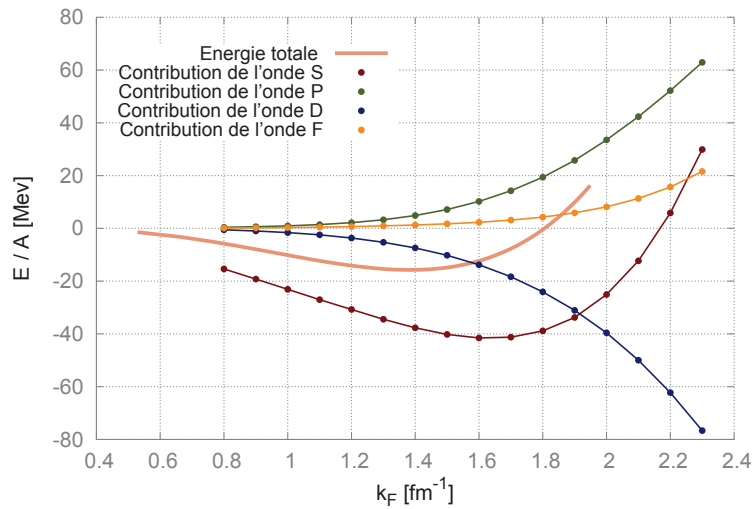


Figure 2.1 – Contributions des ondes partielles obtenues par calcul *ab-initio* dans l'équation d'état de la matière infinie symétrique.

On peut également montrer que les contributions des ondes S et P, qui sont les seules présentes dans Skyrme N₁LO, ne permettent pas de reproduire correctement l'équation d'état globale en regardant la figure 2.2. On y a tracé les contributions cumulées de chacune des ondes partielles calculées avec des calculs *ab-initio*. On voit qu'il est nécessaire d'incorporer jusqu'aux ondes D (voir figure 2.1) pour obtenir une approximation

5. On prend ici en compte le décalage du aux calculs *ab-initio*.

correcte de l'équation d'état autour de la saturation. Nous choisissons donc de borner notre développement en gradient à l'ordre 6, les contributions des ondes partielles à l'énergie globale dans la matière infinie au-delà des ondes F étant négligeables.

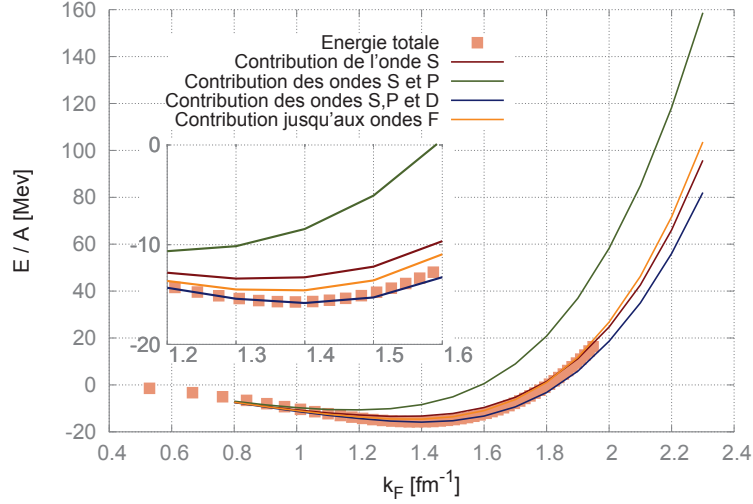


Figure 2.2 – Contributions cumulées des ondes partielles obtenues par calcul *ab-initio* dans l'équation d'état de la matière infinie symétrique.

Forme de l'extension Après avoir considéré toutes les combinaisons possibles des gradients autorisées par les symétries et lois d'invariances du potentiel nucléaire [58], puis avoir uniquement conservé les termes satisfaisant l'invariance de jauge⁶, nous avons obtenu des termes en gradient d'ordre 4 et d'ordre 6 de la forme⁷:

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}_{Sk, N3LO} = & \mathcal{V}_{Sk} + \frac{1}{4} t_1^{(4)} (1 + x_1^{(4)} P_\sigma) \left[(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)^2 + 4(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2 \right] \\
& + t_2^{(4)} (1 + x_2^{(4)} P_\sigma) (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) (\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2) \\
& + \frac{1}{2} t_1^{(6)} (1 + x_1^{(6)} P_\sigma) (\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2) \left[(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)^2 + 12(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2 \right] \\
& + t_2^{(6)} (1 + x_2^{(6)} P_\sigma) (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) \left[3(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)^2 + 4(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2 \right]. \quad (2.26)
\end{aligned}$$

L'onde D apparaît ici entre autres au travers du terme $(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2$ qui fait apparaître un $\cos^2(\omega)$, que l'on retrouve ensuite dans le polynôme de Legendre $P_2(\cos \omega)$, décomposable en harmonique sphérique de moment orbital $\ell = 2$. De la même manière, le terme en $(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^3$ contribuera à l'onde F.⁸ Notons également que ces nouveaux termes comportent également de nouvelles contributions aux ondes S et P.

Il a été choisi de garder dans leur structure de ces nouvelles contributions une grande analogie avec les précédents termes de l'interaction de Skyrme. Ceux-ci sont de portée nulle et composés de termes directs t_i et de termes d'échange $t_i x_i$. Il est également notable que le terme de spin-orbite (2.8) ne possède de nouvelles

6. De plus amples détails sont donnés dans la section 4.5.1 dans le cadre d'une comparaison avec les potentiels de portée finie.

7. Les $\delta(\mathbf{r})$ n'ont pas été placés par souci de clarté.

8. Pour plus de précisions, se référer à l'annexe A.1.

contributions ni au quatrième ordre, ni au sixième ordre. Celles-ci ne respectent en effet pas l'invariance de jauge. Avec l'ajout de cette extension, le nombre total de paramètres atteint 18.

Termes tenseur N₂LO et N₃LO Il est également possible de définir un terme tenseur pour Skyrme N₃LO, définit tel que :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\text{N}_3\text{LO}}^T = & \mathcal{V}_{\text{Sk}}^T + t_e^{(4)} \left[(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2) T_e(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + 2(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) T_o(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right] \\ & + t_o^{(4)} \left[(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2) T_o(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + 2(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) T_e(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right] \\ & + t_e^{(6)} \left[\left(\frac{1}{4}(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)^2 + (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2 \right) T_e(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + (\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) T_o(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right] \\ & + t_o^{(6)} \left[\left(\frac{1}{4}(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)^2 + (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2 \right) T_o(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + (\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) T_e(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right], \quad (2.27) \end{aligned}$$

où T_e and T_o sont définis à l'Eq. (2.13).

Ces termes interviendront essentiellement dans la décomposition en ondes partielles de l'équation d'état dans la matière infinie et dans la comparaison avec les potentiels à portée finie, mais ne sont pas encore présents dans le calcul des noyaux du chapitre 3.

Avantages et inconvénients Un aspect intéressant de cette nouvelle contribution avec l'onde D est qu'elle est, contrairement à celle proposée par Skyrme, invariante de jauge par construction. De la même manière, le terme N₃LO est lui aussi invariant de jauge. Cette invariance de jauge, qui généralise l'invariance galiléenne, doit être obligatoirement satisfaite pour une interaction locale [59] sous peine de ne pas satisfaire l'équation de continuité [58]. Dans le prochain chapitre, on présentera les résultats obtenus avec l'interaction de Skyrme N₃LO dans le modèle idéal de la matière infinie. Ils nous permettront de mettre en évidence de nouveaux avantages et inconvénients d'une telle extension. Nous verrons également dans le chapitre 4 que cette extension permet d'établir un lien plus direct entre l'interaction de Skyrme et les interactions de portée finie Gogny et M₃Y.

3

Propriétés des potentiels effectifs dans la matière nucléaire infinie

Lors du développement de l'interaction jusqu'à Skyrme N3LO, nous avons effectué en parallèle une étude dans la matière infinie, en ayant à l'esprit que celle-ci pourrait ensuite servir de contrainte dans le processus d'ajustement. Ce chapitre présente donc les différentes propriétés (équation d'état de différentes matières nucléaires, pression, ...) qui ont été obtenues avec cette nouvelle interaction. Enfin, l'obtention d'une paramétrisation de Skyrme N3LO pour les étoiles à neutrons, dont les modèles sont en partie régis par la matière nucléaire infinie, clôturera le chapitre.

3.1 Introduction à la matière nucléaire infinie symétrique

Motivation L'utilisation de la matière nucléaire infinie, notamment symétrique, est en premier lieu motivée par le phénomène de saturation de la densité de particule que l'on observe au centre des noyaux lourds. On obtient expérimentalement par diffusion électronique [60] (ou plus récemment muonique [61]) la densité de charge d'un noyau, qui permet ensuite de calculer la densité totale ρ_0 de ce noyau. On observe alors que la densité obtenue est quasiment constante ($\rho_0 = 0.16 \pm 0.01 \text{ fm}^{-3}$) au centre du noyau et ne dépend que peu du nombre de nucléons pour des noyaux lourds. Des résultats analogues peuvent aussi être obtenus par ajustement d'une formule de type goutte liquide [62]. L'interaction nucléon-nucléon étant de portée très courte, cela implique que les nucléons du coeur perçoivent essentiellement les effets de volume, et non les effets de taille finie. Le système s'apparente alors à un gaz de Fermi, où le moment de Fermi est relié à la densité d'équilibre ρ_0 .

Comme nous le verrons, il est possible de considérer des matières infinies non symétriques, qui permettent de partiellement décrire d'autres systèmes, notamment les étoiles à neutrons.

Propriétés La matière infinie symétrique est un système idéal composé de nucléons qui possède les propriétés suivantes :

- la densité de protons et de neutrons est la même : $N=Z$
- système infini (pas d'effets surfaciques)
- pas d'interaction coulombienne entre les protons (en moyenne nulle)
- les fonctions d'ondes sont des ondes planes, car la nature infinie du milieu impose l'invariance par translation et par rotation.
- densité ρ_0 constante à l'équilibre
- pas de corrélation d'appariement entre les nucléons ¹

Utilisation Ce modèle est utilisé par la plupart des interactions nucléon-nucléon en structure nucléaire depuis de nombreuses années afin d'obtenir un premier aperçu du comportement de l'interaction avant son développement pour l'application aux noyaux finis, et est même utilisé comme contraintes dans certains ajustements. La possibilité de réaliser des calculs *ab-initio* dans cette matière est alors exploitée. La nature des fonctions d'ondes simplifie les calculs analytiques, en particulier pour l'interaction de Skyrme, où un certain nombre de termes ne contribuent pas à toutes les quantités. Les mêmes calculs pour les forces de portées finies sont plus compliqués.

Afin d'étudier l'interaction dans la matière nucléaire infinie, on détermine l'équation d'état, c'est-à-dire l'énergie par nucléon, dans le milieu en fonction de la densité ρ . Pour ce faire, on détermine la valeur moyenne du potentiel entre deux états de matière nucléaire infinie, à laquelle on ajoute l'énergie cinétique. C'est au moment de choisir ces deux états que l'on choisit de faire le calcul pour la matière nucléaire symétrique, de neutron, polarisée ou non. Comme nous le verrons, il est aussi possible d'utiliser une matière asymétrique, dont les limites sont les matières symétrique ou de neutron, mais les développements sont alors plus complexes.

Canaux nucléaires et ondes partielles Au-delà de l'équation d'état globale considérée habituellement, il est également possible de calculer les composantes de cette équation, à savoir les canaux nucléaires (S,T). Les propriétés de ces canaux, s'ils ne sont pas directement des observables, ont été reliées à des phénomènes apparaissant dans les noyaux. Par exemple, le canal (S=0,T=1) est associé à l'appariement. Le canal (S=1,T=0) est lui le reflet du seul état lié à deux nucléons, le deutéron, qui s'exprime dans ce canal *via* les ondes partielles $3S_1 + 3D_1$. De plus, il a été montré, comme nous le verrons dans la section 6.2.2 que si certaines propriétés ne sont pas vérifiées dans la matière infinie, il est très probable de voir apparaître des instabilités dans les noyaux.

On classe généralement les différents états à deux nucléons dans quatre canaux de spin-isospin [63] :

$$S = 0, T = 0 \quad ; \quad S = 0, T = 1 \quad ; \quad S = 1, T = 0 \quad ; \quad S = 1, T = 1. \quad (3.1)$$

Ces canaux correspondent aux 4 façons dont interagissent les nucléons.

Ondes partielles Il est aussi possible d'effectuer directement le calcul pour un état dans une base où intervient directement le bon moment angulaire J. Dans cette base, les paramètres tenseurs et spin-orbite

1. Il est possible d'ajouter de l'appariement mais on se restreint au cas le plus simple

apparaissent et permettent de lever la dégénérescence d'ondes partielles comme les ondes ${}^3P_0 + {}^3P_1 + {}^3P_2$ qui demeurent autrement couplées.

Un tel couplage, dans le référentiel du centre de masse, est réalisé en couplant le moment orbital relatif \mathbf{L} avec leur spin total $\boldsymbol{\sigma}$. On note traditionnellement le moment angulaire résultant \mathbf{J} , où $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. D'après les règles de couplage, c'est à dire la formule du triangle, on doit toujours avoir $|L - S| \leq J \leq L + S$. Ainsi, comme le spin total de deux nucléons ne peut-être que 0 ou 1, deux cas s'offrent à nous :

- si $J = 0$, alors on a forcément $L = S$ et donc $L = 0$ ou $L = 1$ dans notre cas.
- si $J > 0$, les valeurs de L possibles sont celles qui répondent à la formule du triangle.
Vu autrement, si $S = 0$, alors $L = J$. Si $S = 1$, alors L peut prendre les trois valeurs $J - 1, J, J + 1$.

On note habituellement les états à deux nucléons couplés à un bon J , $(2S+1)[L]_J$, où L prend les valeurs S, P, D relatives à la notation spectroscopique usuelle tandis que le facteur $(2S+1)$ permet d'indiquer s'il s'agit d'un état singulet ou d'un état triplet. C'est cet état qui est alors noté onde partielle.

Par ailleurs, on sait que les états à 2 nucléons, d'après le principe de Pauli, doivent être anti-symétriques par l'échange de deux particules. Ainsi, puisque l'échange de deux nucléons induit un facteur $(-1)^L$ (à cause de l'harmonique sphérique contenue dans la fonction d'onde), et des facteurs $(-1)^{S+1}$ et $(-1)^{T+1}$ concernant l'échange de spin et d'isospin, on doit satisfaire l'égalité :

$$(-1)^{L+S+T} = -1, \quad (3.2)$$

ce qui fait que la condition $S+T+L$ impair doit toujours être vérifiée. Par conséquent, toutes les ondes partielles ne sont pas permises. La conséquence est que les canaux $(S=0, T=0)$ et $(S=1, T=1)$ sont composés d'ondes partielles avec un L impair, tandis que les contributions des deux autres viennent d'ondes partielles avec un moment orbital pair.

3.2 Equations d'états de Skyrme N₃LO dans la matière infinie

3.2.1 Matière infinie symétrique

Nous allons brièvement voir les principales étapes conduisant à l'obtention de l'équation d'état dans la matière symétrique en passant par les canaux nucléaires. Bien entendu, un tel raisonnement est transposable aussi bien aux interactions de portée nulle que de portée finie. Notons également qu'il est possible d'obtenir ces équations d'états en partant de la fonctionnelle de la densité d'énergie que nous verrons dans le chapitre suivant.

On considère l'interaction à deux nucléons que l'on a choisie (2.26 pour Skyrme N₃LO) et on calcule l'équation d'état en prenant la valeur moyenne de l'interaction sur une base $|ij\rangle$ des états à deux nucléons, caractérisés par leurs états quantiques dans les bases couplées L, S et T :

$$\left(\frac{E}{A}\right)_{(SNM)} = \frac{E_c}{A} + \frac{\langle \mathcal{V}_{Sk} \rangle}{A} = \frac{E_c}{A} + \frac{1}{2A} \sum_{i,j} \langle ij | \mathcal{V}_{Sk} (1 - P_x P_\sigma P_\tau) | ij \rangle, \quad (3.3)$$

où P_x, P_σ, P_τ sont respectivement les opérateurs d'échange des positions, d'échange de spin et d'échange d'isospin, et permettent l'antisymétrisation de la fonction d'onde grâce à la présence du terme $(1 - P_x P_\sigma P_\tau)$.

On utilise ainsi un traitement Hartree-Fock. E_c est l'énergie cinétique du système :

$$E_c = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2. \quad (3.4)$$

Comme les espaces du moment orbital, du spin et de l'isospin sont ici des espaces découplés, on peut facilement traiter le calcul. Concernant la contribution de l'opérateur de parité P_x , on la rajoute à la main en tenant compte du fait que les termes en $t_0, t_1, t_3, t_1^{(4)}$ et $t_1^{(6)}$ sont des termes en L pair (ondes S ou D) tandis que les termes en $t_2, t_2^{(4)}$ et $t_2^{(6)}$ sont en L impairs (ondes P ou F).

On peut écrire, pour séparer le calcul en deux contributions, le potentiel de sorte que :

$$\mathcal{V}_{Sk} = V^{S,T} f_L(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (3.5)$$

où la fonction f_L est simplement la partie en impulsion. On a alors d'une part une contribution avec phases et facteur de dégénérescence dans le $V^{S,T}$ tandis que la moyenne sur la fonction f_L va nous donner un facteur multiplicatif dépendant de l'impulsion de Fermi notée k_F .

Lorsque l'on doit effectuer la sommation des impulsions \mathbf{k} et \mathbf{k}' sur les états i et j à la fin du calcul, les états $|k_i k_j\rangle$ de l'espace des phases n'étant que des ondes planes dans la matière nucléaire infinie, on effectue les remplacements :

$$\mathbf{k} \rightarrow (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)/2 = \mathbf{k}_{ij}/2, \quad \mathbf{k}' \rightarrow (\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j)/2 = \mathbf{k}_{ij}/2 \quad (3.6)$$

On écrit enfin la somme sur les états i et j comme une intégrale sur les états d'impulsions \mathbf{k}_i et \mathbf{k}_j de l'espace des phases. Le calcul de l'Eq.(3.3) revient donc à calculer l'énergie moyenne de l'interaction entre deux ondes planes de moment \mathbf{k}_i et \mathbf{k}_j

Nous avons ainsi obtenu les équations d'état dans chacun des canaux spin-isospin (S,T) pour Skyrme N₃LO [64] :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}^{(0,0)} &= \frac{3}{160} t_2^{(2)} (1 - x_2^{(2)}) \rho k_F^2 + \frac{9}{560} t_2^{(4)} (1 - x_2^{(4)}) \rho k_F^4 \\ &+ \frac{1}{15} t_2^{(6)} (1 - x_2^{(6)}) \rho k_F^6, \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}^{(0,1)} &= \frac{3}{16} t_0 (1 - x_0) \rho + \frac{1}{96} t_3 (1 - x_3) \rho^{\alpha+1} + \frac{9}{160} t_1^{(2)} (1 - x_1^{(2)}) \rho k_F^2 \\ &+ \frac{27}{560} t_1^{(4)} (1 - x_1^{(4)}) \rho k_F^4 + \frac{1}{5} t_1^{(6)} (1 - x_1^{(6)}) \rho k_F^6, \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}^{(1,0)} &= \frac{3}{16} t_0 (1 + x_0) \rho + \frac{1}{96} t_3 (1 + x_3) \rho^{\alpha+1} + \frac{9}{160} t_1^{(2)} (1 + x_1^{(2)}) \rho k_F^2 \\ &+ \frac{27}{560} t_1^{(4)} (1 + x_1^{(4)}) \rho k_F^4 + \frac{1}{5} t_1^{(6)} (1 + x_1^{(6)}) \rho k_F^6, \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}^{(1,1)} &= \frac{27}{160} t_2^{(2)} (1 + x_2^{(2)}) \rho k_F^2 + \frac{81}{560} t_2^{(4)} (1 + x_2^{(4)}) \rho k_F^4 \\ &+ \frac{3}{5} t_2^{(6)} (1 + x_2^{(6)}) \rho k_F^6. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ces expressions représentent la contribution de chaque canal (S,T) à l'énergie potentielle totale dans la matière nucléaire infinie symétrique (SNM). Précisons également qu'il existe une relation dans la matière infinie symétrique entre ρ et k_F provenant de l'approximation de densité locale [65] qu'il faut garder à l'esprit :

$$\rho = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3. \quad (3.11)$$

On remarque que des symétries apparaissent ici entre les canaux (o,o) et (1,1) ainsi qu'entre les canaux (o,1) et (1,o). Tout d'abord, dans chacun de ces regroupements, les mêmes termes contribuent. Ainsi, pour les canaux (o,o) et (1,1), on constate que seules les ondes impaires jouent un rôle car celles-ci sont régies par les paramètres $t_2, t_2^{(4)}$ et $t_2^{(6)}$. Pour les canaux (1,o) et (o,1), le reste des paramètres joue un rôle, ce sont donc cette fois les ondes à moment orbital pair qui participent. D'autre part, on voit que pour passer d'un canal à son canal "partenaire", il suffit de changer le signe des paramètres d'échange (et de prendre en compte le facteur de dégénérescence).

Notons que les termes tenseur et spin-orbite ne donnent pas de contributions aux canaux nucléaires.

Par sommation sur ces 4 canaux, on obtient l'équation d'état globale du système :

$$\begin{aligned} \frac{E}{A} |_{SNM} &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 + \frac{3}{8} t_0 \rho + \frac{1}{16} t_3 \rho^{1+\alpha} + \frac{3}{80} [3t_1 + (5 + 4x_2)t_2] \rho k_F^2 \\ &+ \frac{9}{280} [3t_1^{(4)} + (5 + 4x_2^{(4)})t_2^{(4)}] \rho k_F^4 + \frac{2}{15} [3t_1^{(6)} + (5 + 4x_2^{(6)})t_2^{(6)}] \rho k_F^6 \end{aligned} \quad (3.12)$$

On a ici rajouté à la somme des quatre canaux le premier terme qui est le terme d'énergie cinétique. On remarquera également que l'équation d'état finale présente la particularité de ne pas dépendre de certains paramètres d'échanges ($x_0, x_3, x_1, x_1^{(4)}$ et $x_1^{(6)}$); c'est-à-dire tous ceux dans des termes à moment orbital pair, ne contenant ainsi que 13 paramètres sur les 18 initiaux.

3.2.2 Matière infinie de neutrons

Nous avons également calculé la matière de neutron pour Skyrme N₃LO. Contrairement à la matière symétrique, celle-ci ne sature pas. Elle est pour autant intéressante car elle permet de s'assurer du bon comportement dans la matière riche en neutron, ce qui permettra d'éviter qu'une séparation entre neutrons et protons n'intervienne pas dans le calcul du noyau.

Le calcul est analogue à celui de la section précédente, excepté la relation entre ρ et k_F qui devient maintenant

$$\rho = \frac{1}{3\pi^2} k_F^3, \quad (3.13)$$

étant donné que l'on perd la dégénérescence d'isospin².

On peut cette fois choisir de décomposer les calculs sur les deux canaux de spin, S=0 et S=1 :

2. On se place en effet dans le cas où l'isospin total T=1

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}^{(S=0)} &= \frac{1}{4}t_0(1-x_0)\rho + \frac{1}{34}t_3(1-x_3)\rho^{1+\alpha} + \frac{3}{40}t_1(1-x_1)\rho k_{F_n}^2 \\
&+ \frac{9}{140}t_1^{(4)}(1-x_1^{(4)})\rho k_{F_n}^4 + \frac{4}{5}t_1^{(6)}(1-x_1^{(6)})\rho k_{F_n}^6,
\end{aligned} \tag{3.14}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}^{(S=1)} &= \frac{9}{40}t_2(1-x_2)\rho k_{F_n}^2 + \frac{27}{140}t_2^{(4)}(1-x_2^{(4)})\rho k_{F_n}^4 \\
&+ \frac{4}{5}t_2^{(6)}(1-x_2^{(6)})\rho k_{F_n}^6.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

De manière analogue à la matière infinie symétrique, on obtient l'équation d'état globale dans la matière de neutrons en sommant les deux canaux :

$$\begin{aligned}
\frac{E}{N}|_{PNM} &= \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}k_F^2 + \frac{1}{4}t_0(1-x_0)\rho + \frac{1}{24}t_3(1-x_3)\rho^{1+\alpha} \\
&+ \frac{3}{40}[t_1(1-x_1) + 3t_2(1+x_2)]\rho k_F^2 \\
&+ \frac{9}{140}[t_1^{(4)}(1-x_1^{(4)}) + 3t_2^{(4)}(1+x_2^{(4)})]\rho k_F^4 \\
&+ \frac{4}{15}[t_1^{(6)}(1-x_1^{(6)}) + 3t_2^{(6)}(1+x_2^{(6)})]\rho k_F^6
\end{aligned} \tag{3.16}$$

On remarque que l'on a cette fois une contribution de tous les paramètres hormis ceux associés au spin-orbite et au tenseur.

3.2.3 Matière infinie asymétrique

Il est possible d'unifier les équations d'états de la matière symétrique et de la matière de neutrons en calculant une équation d'état dans une matière dite asymétrique (ANM). Dans la mesure où on cherche à décrire des noyaux dont le nombre de protons et de neutrons n'est pas identique, un tel développement peut présenter un intérêt. Elle permet également, et nous le verrons dans la section 3.5, d'avoir des indications sur le comportement de la matière dans des étoiles à neutrons, et même de rendre compte de propriétés de celles-ci, comme la masse et son rayon. La forme et les détails concernant cette équation d'état peuvent être trouvés dans l'Appendice B.1.

Pour la suite de ce manuscrit, il est nécessaire d'introduire le paramètre d'asymétrie en isospin, noté Y , tel que :

$$Y = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho_n + \rho_p} = 1 - 2Y_p, \tag{3.17}$$

où Y_p est ici la fraction de protons. Ainsi, si $Y = 0$, la matière infinie sera symétrique, tandis que si $Y=1$, il s'agira d'une matière infinie de neutrons. Cette notation sera utilisée lorsque nous aborderons l'application de notre interaction à l'astrophysique, ainsi que pour l'obtention d'une pseudo-observable de la matière infinie, l'énergie de symétrie.

3.2.4 Matière infinie polarisée

La matière polarisée sera abordée dans la section 3.5. L'intérêt est de s'assurer que la matière polarisée ne s'effondre pas et reste toujours au dessus de la matière symétrique. En effet, si la courbe de la matière polarisée était en dessous, cela signifierait qu'elle est favorisée énergétiquement et qu'il y a donc une transition ferromagnétique. Une telle transition induit des problèmes de convergences dans les calculs de noyaux, et n'est pas conforme aux propriétés de la matière nucléaire aux densités habituelles. Les formules utilisées sont ici données à titre indicatif.

Matière infinie symétrique polarisée La matière polarisée symétrique correspond à une matière dans laquelle les spins des protons et des neutrons sont tous alignés dans la même direction.

$$\begin{aligned}
\frac{E}{A}|_{PolSNM} &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 + \frac{1}{4} t_0 (1 + x_0) \rho + \frac{1}{24} t_3 (1 + x_3) \rho^{1+\alpha} \\
&+ \frac{3}{40} [t_1 (1 + x_1) + 3t_2 (1 + x_2)] \rho k_F^2 \\
&+ \frac{9}{140} [t_1^{(4)} (1 + x_1^{(4)}) + 3t_2^{(4)} (1 + x_2^{(4)})] \rho k_F^4 \\
&+ \frac{4}{15} [t_1^{(6)} (1 + x_1^{(6)}) + 3t_2^{(6)} (1 + x_2^{(6)})] \rho k_F^6
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Matière infinie de neutrons polarisée La matière polarisée de neutrons correspond à une matière dont les neutrons ont tous leurs spins alignés dans la même direction. C'est une quantité qui est particulièrement utilisée dans la description des étoiles à neutrons.

$$\begin{aligned}
\frac{E}{N}|_{PolPNM} &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 + \frac{3}{10} t_2 (1 + x_2) \rho k_F^2 \\
&+ \frac{9}{35} t_2^{(4)} (1 + x_2^{(4)}) \rho k_F^4 + \frac{16}{15} t_2^{(6)} (1 + x_2^{(6)}) \rho k_F^6
\end{aligned} \tag{3.19}$$

3.3 Pseudo-observables de la matière infinie

À ce stade, nous avons déterminé les équations d'état des canaux nucléaires pour Skyrme N₃LO dans la matière infinie symétrique, ainsi que l'équation d'état globale de la matière de neutrons. L'ajustement d'une interaction de Skyrme en prenant en compte à la fois les contraintes de l'équation d'état globale, ainsi que celle des canaux (S,T), sur une gamme étendue en densité, n'avait jamais été réalisé avec succès. Nous avons donc entrepris de réaliser un tel ajustement. La motivation de celui-ci étant de montrer que l'utilisation de Skyrme N₃LO conférerait une nouvelle flexibilité, susceptible d'être mise à contribution dans les noyaux, tout en répondant en plus à des contraintes comme celle de la matière infinie.

Pour évaluer la qualité d'un ajustement, ou pour le contraindre (chapitre 6), il existe dans la littérature un certain nombre de pseudo-observables pour la matière infinie. Nous allons passer en revue quelques une d'entre elles.

Notations Dans cette sous-partie, on utilisera les combinaisons de paramètres suivantes

$$C_0^{(n)} = 3t_1^{(n)} + (5 + 4x_2^{(n)})t_2^{(n)}, \quad (3.20)$$

$$C_1^{(n)} = -(2x_1^{(n)} + 1)t_1^{(n)} + (2x_2^{(n)} + 1)t_2^{(n)}, \quad (3.21)$$

ainsi que le coefficient $a = (3\pi^2/2)^{1/3}$.

Saturation de la matière nucléaire infinie Pour rappel, la densité totale au coeur des noyaux lourds est approximativement constante, avec une valeur généralement admise dans la littérature de :

$$\rho_0 = 0.16 \pm 0.01 \text{ fm}^{-3}. \quad (3.22)$$

Il est possible pour obtenir cette valeur de chercher le minimum de l'équation (3.12) ou de s'intéresser au zéro de sa dérivée, dérivée qui est en réalité proportionnelle à la pression du fluide nucléaire. Dans la matière nucléaire infinie, une telle pression n'a pas de raison d'être, le milieu étant insensible aux effets de surface, et doit donc naturellement toujours être nulle. Comme on souhaite avoir une saturation pour permettre à des noyaux de pouvoir se former, une telle condition est automatiquement satisfaite.

Notons également que les calculs sur lesquels nous effectuerons l'ajustement des équations d'états de Skyrme N₃LO proviennent de méthodes connues pour fournir une valeur de la densité de saturation sensiblement plus haute (0.18 fm⁻³) que celle énoncée plus haut. C'est donc cette saturation que l'ajustement reproduira. Le but d'un tel ajustement est uniquement de montrer que Skyrme N₃LO dans la matière infinie parvient à reproduire ces courbes alors que d'autres interactions, à l'image de Skyrme NLO ou Gogny, n'y parviennent pas. Il s'agit d'une preuve illustrant la flexibilité nouvelle de notre interaction. Obtenir une valeur de (0.16 fm⁻³) est nécessaire lorsque l'on souhaite utiliser l'interaction dans les noyaux, ce qui n'est pas encore le cas des paramétrisations dans la matière infinie.

Energie par nucléon à la densité de saturation La valeur de l'énergie au point de saturation se révèle également bien connue :

$$\frac{E}{A}|_{SNM}(\rho_0) = -16.0 \pm 0.2 \text{ MeV} \quad (3.23)$$

Les valeurs expérimentales de ρ_0 et E/A ont été validées par différentes observations, parmi lesquelles la diffusion d'électrons [61], et les masses des noyaux qui peuvent être ajustés par des formules de masses suffisamment raffinées [66].

Incompressibilité de la matière nucléaire infinie L'incompressibilité de la matière infinie est reliée à la courbure, et donc à la dérivée seconde de l'équation d'état de la matière symétrique :

$$K_\infty = 9\rho_0^2 \left(\frac{d^2 E}{d\rho^2} \frac{E}{A}(\rho) \right)_{\rho=\rho_0} \quad (3.24)$$

Dans le cadre de Skyrme N₃LO, cette équation s'écrit :

$$\begin{aligned} K_\infty = & -\frac{6}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 + \frac{9}{16} \alpha(\alpha + 1) t_3 \rho^{\alpha+1} + \frac{3}{8} C_0^{(2)} \rho k_F^2 \\ & + \frac{9}{10} C_0^{(4)} \rho k_F^4 + \frac{2}{15} C_0^{(6)} \rho k_F^6 \end{aligned} \quad (3.25)$$

Aux basses densités, cette pseudo-observable rend compte, comme son nom l'indique, de la "dureté" de l'interaction. On s'intéressera cependant également à la valeur de ce coefficient pour de hautes densités. En effet, le coefficient d'incompressibilité est directement relié à la vitesse du son dans le milieu [62, 67] :

$$\frac{v_S}{c} = \sqrt{\frac{K_\infty}{9m}}. \quad (3.26)$$

Il a en effet été montré que le phénomène de supra-luminosité (c'est-à-dire que la vitesse du son dans le milieu est supérieure à celui de la lumière), entraînant la rupture du principe de causalité, pouvait apparaître dans le cadre de certaines interactions de Skyrme [68]. Nous verrons que dans la section 3.5 que la paramétrisation de Skyrme N₃LO appliquée aux étoiles à neutrons respecte le principe de causalité.

L'étude de la résonance géante mono-polaire isoscalaire avec des calculs Hartree-Fock et une approximation RPA [69] permet de fixer ce coefficient à

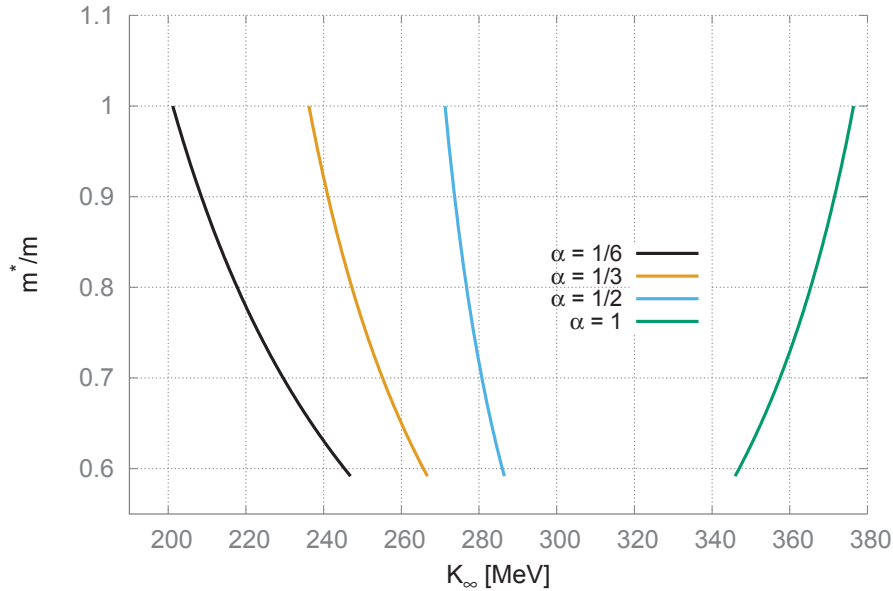
$$K_\infty = 210 \pm 30 \text{ MeV}. \quad (3.27)$$

Il est toutefois compliqué de parvenir à obtenir une telle valeur, en raison notamment de l'anti-corrélation [37] entre K_∞ et la masse effective. Il est en effet possible d'écrire pour Skyrme NLO :

$$K_\infty = -9(\alpha + 1) \frac{E}{A}(\rho_0) + \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \left(3(3\alpha - 1) - 2(3\alpha - 2) \frac{m}{m^*} \right) \quad (3.28)$$

Cette corrélation est représentée sur la figure 3.1 pour différentes valeurs du paramètre α dans le cadre de Skyrme NLO (avec une dépendance en densité).

Figure 3.1 – Corrélation entre masse-effective et incompressibilité pour différentes valeurs du paramètre α représentée par les courbes de couleur dans le cas de Skyrme NLO.



Précisons que pour deux dépendances en densité avec un paramètre α différent, il a été montré que cette corrélation disparaissait [70].

Pour cette raison, nous avons adopté dans un premier temps une valeur à reproduire de 230 MeV lors de notre ajustement avec Skyrme N2LO.

À la suite de l'ajustement, nous nous sommes rendus compte que K_∞ semblait choisir préférentiellement une valeur plus basse. En examinant la corrélation entre K_∞ et la masse effective, nous avons constaté que nous avons un degré de liberté supplémentaire nous permettant d'avoir une meilleure valeur de K_∞ sans détériorer la masse effective. La corrélation peut en effet s'écrire pour Skyrme N2LO :

$$K_\infty = -9(\alpha + 1) \frac{E}{A}(\rho_0) + \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \left(3(3\alpha - 1) - 2(3\alpha - 2) \frac{m}{m^*} \right) + \frac{3}{140} C_0^{(4)} \rho k_F^4 (3\alpha + 10), \quad (3.29)$$

Il est alors possible de "piloter" la corrélation avec Skyrme N2LO en faisant varier les paramètres qui induisent alors un décalage des courbes de la figure 3.1 vers la droite ou vers la gauche. On peut donc espérer une amélioration de ces propriétés dans de futurs ajustements. Notons enfin que Skyrme N3LO ajoute encore un degré de liberté supplémentaire pour diminuer l'impact de cette corrélation.

Masse effective Dans la matière nucléaire infinie, on peut décomposer l'énergie d'une particule individuelle d'impulsion p en deux contributions, à savoir son énergie cinétique et son énergie d'interaction avec le milieu :

$$\epsilon_p = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \epsilon_{inter}(\mathbf{p}, \epsilon_p). \quad (3.30)$$

Cette équation auto-cohérente confère au second terme le nom de *self-énergie*. On peut ré-écrire l'équation (3.30) comme l'énergie d'une particule libre, mais dont la masse n'est plus celle du nucléon nu³ m , mais une masse effective notée m^* . Celle-ci est exprimée comme :

$$\frac{m^*}{m} = \frac{m}{\rho} \frac{d\epsilon_p}{dp} \quad (3.31)$$

Le calcul de la masse effective dans le cadre de Skyrme N3LO nous donne, à la densité de saturation :

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\rho_0}{16} \left[C_0^{(2)} + 2C_0^{(4)} k_F^2 + \frac{72}{5} C_0^{(6)} k_F^4 \right]. \quad (3.32)$$

Nous avons choisi d'examiner la masse effective car celle-ci est directement reliée à la densité de niveaux à la surface de Fermi dans les noyaux finis. L'une des particularités de notre interaction par rapport à l'interaction standard de Skyrme est la présence de termes en gradients, et donc en impulsion, plus élevés [71]. La masse effective étant définie comme une dérivée par rapport à l'impulsion, on voit donc l'apparition, dans la masse effective, de nouvelles contributions. Ainsi, ces nouveaux termes pourraient permettre de décrire plus finement les énergies de particules individuelles autour de l'énergie de Fermi dans les noyaux. D'autre part, on pourrait voir apparaître, avec ces ajouts, des masses effectives dont les courbes sont piquées à la surface, synonymes de meilleures propriétés spectroscopiques.

On peut établir un lien direct entre masse effective et données expérimentales à travers le mode de résonance quadrupolaire isoscalaire E2 [69, 72]. Cela conduit à une valeur de 0,8. Cependant, une valeur plus conservatrice de $0,7 \pm 0,02$, généralement utilisée en structure nucléaire, a été retenue dans notre ajustement.

3. c'est-à-dire sans les effets de milieu

Énergie de symétrie L'énergie de symétrie $\epsilon_T(\rho)$ à la densité de saturation correspond au coefficient a_I présent dans la formule de la goutte liquide. Il s'agit de la variation de la courbure de l'équation d'état en fonction du facteur d'asymétrie Y ,

$$a_I = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dY^2} \frac{E}{A}(Y, \rho) \Big|_{Y=0}. \quad (3.33)$$

Il s'agit autrement dit de la contribution à l'ordre 2 dans un développement de l'équation d'état asymétrique par rapport au facteur d'asymétrie,

$$\frac{E}{A}(\rho, Y)|_{asym} = \frac{E}{A}(\rho, 0)|_{asym} + \epsilon_T(\rho)Y^2 + \dots \quad (3.34)$$

Avec la formule précédente, on obtient alors une énergie de symétrie qui se présente sous la forme :

$$\begin{aligned} \epsilon_T(\rho) = & \frac{\hbar^2}{6m} a^2 \rho^{2/3} + \frac{1}{8} C_1^{(0)} \rho + \frac{1}{16} a^2 \left\{ \frac{1}{3} C_0^{(2)} + C_1^{(2)} \right\} \rho^{5/3} \\ & + \frac{1}{32} a^4 \left\{ \frac{4}{3} C_0^{(4)} + \frac{8}{3} C_1^{(4)} \right\} \rho^{7/3} + \frac{1}{32} a^6 \left\{ \frac{48}{5} C_0^{(6)} + 16 C_1^{(6)} \right\} \rho^{10/3}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

La valeur de l'énergie de symétrie à saturation est évaluée entre 28 MeV et 32 MeV selon les méthodes de calculs utilisées. Celle-ci est usuellement notée J dans la littérature. Nous verrons dans la section (3.5) que ce terme joue également un rôle dans la description des étoiles à neutrons, et peut aussi être défini comme la différence entre la matière symétrique et la matière de neutrons.

On peut voir dans l'Eq.(3.33) que l'énergie de symétrie est en réalité une compressibilité. Elle rend compte de la manière dont évolue la matière symétrique vers une matière de neutrons. On sait notamment que la densité de saturation a tendance à se décaler vers l'origine à mesure que le paramètre Y augmente, jusqu'à la matière de neutrons où il n'y a plus aucune saturation. La contrainte de l'énergie de symétrie à saturation permet donc de s'assurer que ce comportement est respecté.

La pente en ρ de l'énergie de symétrie, notée L , est également parfois utilisée pour un ajustement. Celle-ci rend compte de l'épaisseur de la couche de neutrons dans les noyaux où $N > Z$ et permet de mieux contraindre l'évolution de la matière symétrique par rapport à celle de neutrons [73]. Toutefois, celle-ci est mal contrainte par les données expérimentales. Nous avons donc choisi de ne pas la considérer pour l'ajustement de Skyrme N2LO, lui préférant la matière de neutrons.

3.4 Étude préliminaire : ajustement des canaux nucléaires et des ondes partielles avec Skyrme N2LO et N3LO

Dans cette partie, nous allons voir dans un premier temps que Skyrme N2LO et N3LO permettent par un ajustement de reproduire les canaux (S,T) de la matière symétrique fournis par des calculs *ab-initio* jusqu'à une densité de $\rho = 0.8 \text{ fm}^{-3}$. Afin de tester davantage la flexibilité apportée par les nouveaux termes de l'interaction, nous avons calculé ensuite les équations d'états des ondes partielles dans la matière infinie jusqu'au moment angulaire $L=3$. Nous montrons que celles-ci permettent notamment de donner une contrainte inédite sur le signe d'un des termes tenseurs.

3.4.1 Ajustement des canaux nucléaires avec Skyrme N2LO et Skyrme N3LO

Méthode et procédure d'ajustement Afin de procéder à l'ajustement des paramètres de notre interaction dans le but de reproduire les canaux nucléaires et de l'équation d'état globale, nous avons choisi une procédure standard de minimisation du χ^2 .

Dans un premier temps, nous avons ajusté les équations d'état des canaux (S,T) de Skyrme NLO, N2LO et N3LO sur des calculs Brueckner-Hartree-Fock (BHF) de Baldo *et al.* [57]. Les données consistent en 16 points pour chacun des canaux allant de $k_F=0.8 \text{ fm}^{-1}$ (0.03 fm^{-3}) à $k_F=2.3 \text{ fm}^{-1}$ (0.8 fm^{-3})⁴. Ceux-ci sont issus d'une interaction nucléon-nucléon microscopique Argonne v_{14} , laquelle contient un terme à trois corps phénoménologique dit potentiel d'Urbana. On choisit pour valeurs initiales des paramètres des valeurs que l'on considère être proches du minimum, et qui ont déjà été obtenues dans un article précédent [74]. Durant l'ajustement, chacun des paramètres a un poids identique. Le résultat d'un tel ajustement peut-être observé sur la figure 3.2 pour Skyrme N2LO, Skyrme NLO et SLy5 pour les basses densités (proches de la densité de saturation ρ_0). Skyrme N3LO n'y est pas représenté pour ne pas surcharger la figure, mais offre des résultats comparables à Skyrme N2LO.

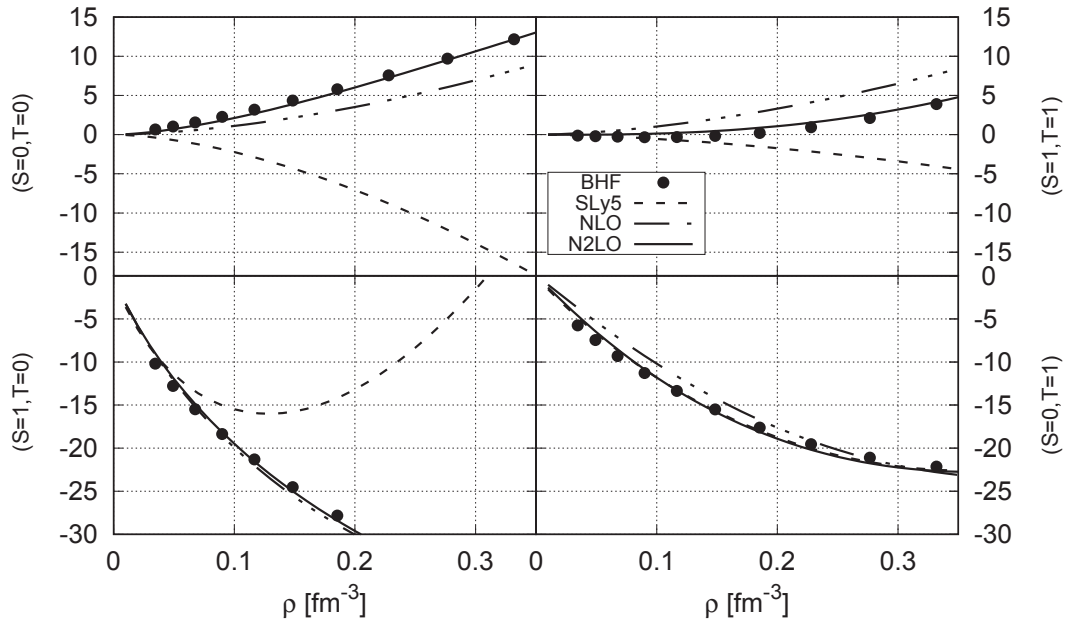


Figure 3.2 – Comparaison de l'ajustement des énergies dans les canaux (S,T) avec Skyrme NLO et Skyrme N2LO sur des calculs *ab-initio* (voir texte pour le détail). Les points correspondent aux calculs BHF [57]. La courbe tiret-point alternée et la courbe pleine correspondent respectivement à notre ajustement avec Skyrme NLO et Skyrme N2LO. SLy5, qui incorpore des contraintes liées aux noyaux est représenté en pointillés.

Notre ajustement confirme tout d'abord que Skyrme NLO peut reproduire l'équation d'état globale, mais n'a pas assez de degrés de liberté pour reproduire les équations d'états dans les canaux (S,T). Tout particulière-

⁴. La densité d'équilibre $\rho_0 = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ correspond à un moment de Fermi de $1,33 \text{ fm}^{-1}$ environ.

ment, Skyrme NLO éprouve des difficultés à reproduire les canaux correspondant aux ondes paires, ($S=0, T=0$) et ($S=1, T=1$). Skyrme NLO parvient toutefois à reproduire correctement les calculs BHF jusqu'à la densité de saturation. Il est également possible de voir qu'une forme de Skyrme NLO ajustée sur des noyaux, comme SLy5, ne reproduit pas correctement les canaux nucléaires. Il a été montré que si l'on rajoute à l'interaction standard de Skyrme des contraintes pour décrire les noyaux, comme c'est le cas pour l'interaction SLy5, il n'est pas possible de reproduire en même temps les deux informations [75]. Les dix paramètres de l'interaction ne suffisent pas pour répondre à la fois aux contraintes expérimentales et à des contraintes importantes issues du modèle de la matière nucléaire infinie comme les canaux (S, T). Si l'on ajoute les termes en gradients jusqu'à l'ordre 4, on voit qu'un ajustement de ces mêmes canaux est désormais possible. Cela montre que notre interaction possède une nouvelle flexibilité pouvant reproduire davantage de contraintes que Skyrme NLO.

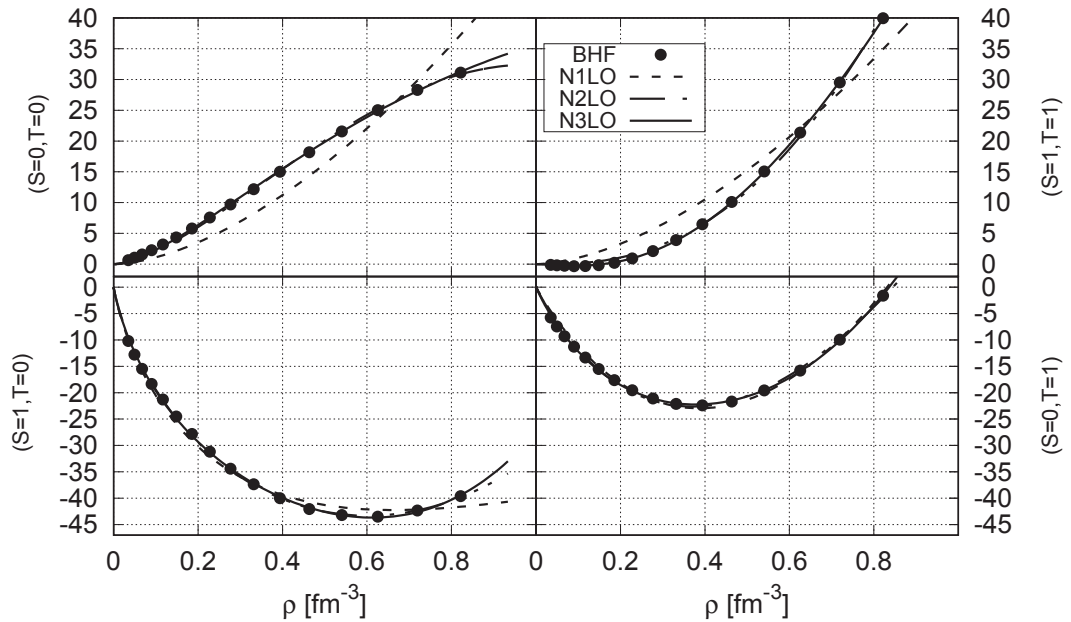


Figure 3.3 – Comparaison de l'ajustement des énergies dans les canaux (S, T) avec Skyrme NLO et Skyrme N2LO sur des calculs *ab-initio* (voir texte pour le détail). Les points correspondent aux calculs BHF [57]. Les courbes en pointillé, tiret-point alternée et pleine correspondent respectivement à notre ajustement avec Skyrme NLO, Skyrme N2LO et Skyrme N3LO.

Nous avons également ajusté Skyrme N3LO sur les calculs BHF. Le résultat peut-être observé sur la figure 3.3. Les courbes sont cette fois représentées sur l'ensemble des points. On peut y voir que les performances de Skyrme N2LO et N3LO sont comparables. Les termes de Skyrme N3LO permettent néanmoins d'améliorer le contrôle de l'interaction à haute densité. Cette propriété sera mise à contribution dans le cadre des étoiles à neutrons dans la section 3.5. Bien entendu, dans la mesure où l'équation d'état globale est la somme de ces quatre canaux, et que Skyrme NLO était déjà en mesure de la reproduire, celle-ci reste également satisfaite. Comme nous le verrons dans le chapitre 6, nous avons mis la flexibilité de Skyrme N2LO au service d'un ajustement prenant en compte à la fois des données de la matière infinie et des noyaux.

L'une de nos constatations majeures est qu'il est tout à fait possible de réaliser un ajustement des canaux

(S,T) sans le terme dépendant de la densité. Nous avons néanmoins décidé de le conserver pour la version définitive de l'ajustement car son absence ne nous permettait pas d'obtenir une masse effective supérieure à 0.4. Bien que la masse effective (Eq. 3.32) de Skyrme N₃LO ne dépende pas des paramètres t_3, x_3 et α qui interviennent dans le terme dépendant de la densité, l'introduction d'un tel terme induit une réorganisation des autres paramètres [76–78]. Notons également que nous avons pu fournir des paramétrisations pour N₂LO et N₃LO avec le paramètre α égal à 1/3 et à 1/6.

L'une des caractéristiques des calculs *ab-initio* est que ceux-ci sont souvent en accord jusqu'à la densité de saturation, mais présentent des comportements à hautes densités différents. Nous avons donc également réalisé un ajustement sur des points issus de méthodes de calculs *ab-initio* différentes, comme l'illustre la figure 3.4.

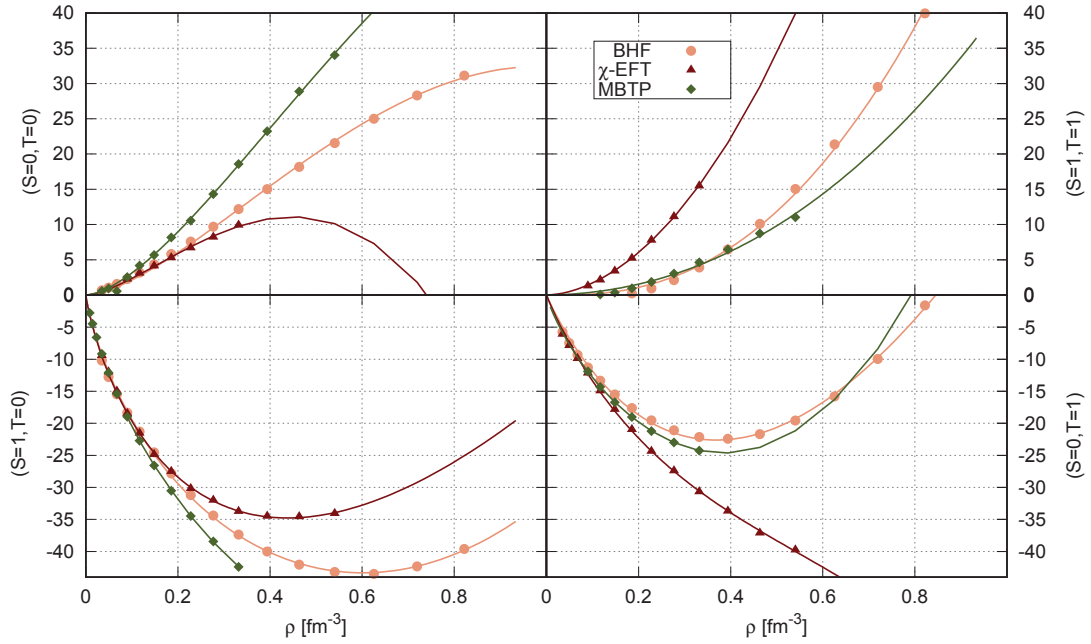


Figure 3.4 – Ajustement des quatre canaux nucléaires avec Skyrme N₂LO sur des calculs BHF (rond) [57], χ -EFT (triangle)[79] et MBTP (losange) [80, 81]

Skyrme N₂LO permet de reproduire les différents comportements de telles interactions à hautes densités. Bien entendu, cela reste vrai pour Skyrme N₃LO, dont les courbes se superposent à celles de la figure 3.4. Les paramétrisations obtenues en ajustant les données BHF sur les équations d'états sont présentées dans le tableau 3.1. Seuls les paramètres centraux sont concernés pour le moment, les paramètres de spin-orbite et tenseurs n'intervenant pas dans les équations à ce stade.

L'une des tendances qui se dégage est que les termes directs t_i de Skyrme N₃LO sont plus petits, en valeur absolue, que les termes analogues de Skyrme N₂LO, eux même plus petits que ceux de Skyrme. Étant donné qu'il s'agit d'un développement aux ordres supérieurs en gradients, cela est un indice de la bonne convergence de ce développement. Cela est aussi en accord avec le principe de hiérarchie naturelle [82] (*naturalness*) que nous nous attendions à observer en allant aux ordres supérieurs, c'est-à-dire que l'on retrouve un ordre de grandeur entre les paramètres d'ordres successifs.

On remarque également que les paramètres $t_2^{(i)}$ associés aux ondes impaires ne sont pas modifiés d'une pa-

Table 3.1 – Paramètres des pseudo-potentiels VLyB6 l et VLyB3 l . n.a signifie que le paramètre n'a pas été ajusté.

Paramètres		VLyB62	VLyB32	VLyB63	VLyB33
t_0	[MeV.fm ³]	-2394.15	-1491.46	-2500.49	-1660.94
x_0		0.632433	0.409966	0.598658	0.395793
t_1	[MeV.fm ⁵]	-19.381	133.037	337.793	702.317
x_1		35.182	-3.97968	-2.18967	-0.534133
t_2	[MeV.fm ⁵]	513.2670	513.2670	587.22	587.22
x_2		-1.01914	-1.01914	-1.08109	-1.08109
$t_1^{(4)}$	[MeV.fm ⁷]	9.63577	-14.6617	-116.489	-215.685
$x_1^{(4)}$		3.65615	-0.745637	-0.477614	0.201958
$t_2^{(4)}$	[MeV.fm ⁷]	-65.3664	-65.3664	-108.342	-108.342
$x_2^{(4)}$		-1.22006	-1.22006	-1.33548	-1.33548
$t_1^{(6)}$	[MeV.fm ⁹]			2.84983	4.54218
$x_1^{(6)}$				-0.161801	0.271071
$t_2^{(6)}$	[MeV.fm ⁹]			1.23644	1.23644
$x_2^{(6)}$				-1.51102	-1.51102
t_3	[MeV.fm ^{3(1+α)}]	13763	8000	13763	8000
x_3		1.0	1.0	1.0	1.0
α		1/6	1/3	1/6	1/3
t_o	[MeV.fm ⁵]	401.816	401.816	608.126	608.126
t_e	[MeV.fm ⁵]	n.a	n.a	n.a	n.a
$t_o^{(4)}$	[MeV.fm ⁷]	-12.0604	-12.0604	-72.78	-72.78
$t_e^{(4)}$	[MeV.fm ⁷]	294.851	-225.429	-504.419	-221.001
$t_o^{(6)}$	[MeV.fm ⁹]			20.7379	107.776
$t_e^{(6)}$	[MeV.fm ⁹]			107.776	57.3209
W_0	[MeV.fm ⁵]	245.741	245.741	241.748	241.748
<hr/>					
"Pseudo-observables" après ajustement		VLyB62	VLyB32	VLyB63	VLyB33
ρ_{sat}	[fm ⁻³]	0.179	0.185	0.169	
E/A	[MeV]	-15.50	-15.73	-15.72	
m^*/m		0.789	0.728	0.762	
K_∞	[MeV]	220.8	247.0	201.9	

ramétrisation à une autre avec un α différent. Par contre, les autres paramètres se réarrangent pour permettre à nouveau une saturation correcte. On notera toutefois que Skyrme N₃LO conserve, d'un terme dépendant de la densité à un autre, le même signe et le même ordre de grandeur, ce qui semble indiquer que le degré de liberté offert par les paramètres supplémentaires lui permet d'être plus stable dans l'ajustement. Cette moindre dépendance sur le terme dépendant de la densité est l'une des raisons qui nous permet de parvenir à obtenir une saturation sans ce dernier.

Néanmoins, lorsque l'on passe de Skyrme N₂LO à Skyrme N₃LO avec α fixé, on se rend compte qu'un important réarrangement peut apparaître pour un paramètre donné, comme celui intervenant sur le paramètre t_1 de VLyB62 à VLyB63. Celui-ci change d'ordre de grandeur, et même de signe. Cela est dû au fait que le comportement asymptotique de l'interaction n'est plus assuré par le même paramètre. Lorsque l'on ajuste Skyrme N₂LO, $t_1^{(4)}$ est le paramètre rendant compte de ce comportement, tandis qu'il s'agit de $t_1^{(6)}$ lorsque l'on ajuste Skyrme N₃LO. Le paramètre $t_1^{(4)}$ peut alors rendre compte plus finement des variations des courbes sur les densités intermédiaires.

Concernant les "pseudo-observables de la matière infinie présentées dans la section précédente, on voit dans le tableau 3.1 qu'il est possible d'obtenir des valeurs raisonnables. Rappelons que nous ajustons nos données sur des calculs Brueckner-Hartree-Fock qui donnent une saturation à 0.18 fm^{-3} , et c'est pour cette raison que des disparités apparaîtront vis à vis des valeurs présentées précédemment.

Une fois cet ajustement réalisé, nous avons cherché, puisque Skyrme N₂LO et N₃LO parvenaient à reproduire correctement la physique des canaux (S,T), un moyen de tester la flexibilité nouvelle offerte par notre extension à l'interaction de Skyrme. Dans une logique analogue à la décomposition de l'équation globale en canaux, il est possible de décomposer celle-ci plus finement en ondes partielles. De plus, les canaux sont indépendants de paramètres comme le spin-orbite ou les termes tenseurs. Or, pour voir apparaître des contributions de ces termes, il faut décomposer les canaux(S,T) en ondes partielles. Enfin, certaines interactions, à l'image de M₃Y, ont incorporé les points BHF de ces quantités à basse densité afin de rendre compte de propriétés de diffusion. Nous avons donc cherché à savoir s'il n'était pas possible de reproduire également les différentes ondes partielles qui composent les canaux avec Skyrme N₃LO.

3.4.2 Ajustement de la décompositon en ondes partielles de l'équation d'état avec Skyrme N₂LO et Skyrme N₃LO

Nous avons donc tenté, par un développement analogue au calcul de l'équation d'état, mais en projetant cette fois le potentiel sur Skyrme sur une base du sous-espace (J,L,S,T), où J est le moment angulaire total et L le moment angulaire orbital. Le calcul est analogue à ce qui est fait pour les canaux (S,T). Le détail des expressions analytiques des équations d'états de toutes les ondes partielles, singulets et triplets peut-être trouvé dans [83].

Il est possible de sommer toutes ces ondes partielles pour obtenir les canaux (S,T). Ceux-ci ne dépendent ni du spin-orbite, ni des termes tenseurs, tout comme les ondes partielles correspondant à des singulets. Ainsi, l'ajustement que nous avons effectué sur les termes centraux fixe ces dernières. Nous nous attachons donc à l'ajustement des ondes partielles correspondant à des triplets, qui eux dépendent de nouveaux paramètres, et permettent de lever la dégénérescence pour un J donné.

Bien entendu, comme Skyrme N₃LO contient des ondes partielles jusqu'à $L = 3$, nous n'avons accès qu'aux équations de ces ondes partielles avec notre interaction. Comme nous l'avons brièvement montré dans la figure 2.1 avec les calculs BHF, les ondes partielles à partir de $L=3$ sont négligeables.

Les ondes partielles correspondant à des triplets que nous utilisons pour notre discussion sont donc :

$$\begin{aligned}\mathcal{V}({}^3S_1) &= \frac{3}{16}t_0^{(0)}(1+x_0^{(0)})\rho + \frac{9}{160}t_1^{(2)}(1+x_1^{(2)})\rho k_F^2 \\ &+ \frac{9}{280}t_1^{(4)}(1+x_1^{(4)})\rho k_F^4 + \frac{1}{10}t_1^{(6)}(1+x_1^{(6)})\rho k_F^6, \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{V}({}^3P_0) &= \frac{3}{160}t_2^{(2)}(1+x_2^{(2)})\rho k_F^2 + \frac{9}{560}t_2^{(4)}(1+x_2^{(4)})\rho k_F^4 \\ &+ \frac{3}{50}t_2^{(6)}(1+x_2^{(6)})\rho k_F^6 + \frac{1}{40}W_0\rho k_F^2 \\ &- \frac{3}{80}t_o\rho k_F^2 - \frac{9}{140}t_o^{(4)}\rho k_F^4 - \frac{17}{750}t_o^{(6)}\rho k_F^6, \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{V}({}^3P_1) &= \frac{9}{160}t_2^{(2)}(1+x_2^{(2)})\rho k_F^2 + \frac{27}{560}t_2^{(4)}(1+x_2^{(4)})\rho k_F^4 \\ &+ \frac{9}{50}t_2^{(6)}(1+x_2^{(6)})\rho k_F^6 + \frac{3}{80}W_0\rho k_F^2 \\ &+ \frac{9}{160}t_o\rho k_F^2 + \frac{27}{280}t_o^{(4)}\rho k_F^4 + \frac{17}{500}t_o^{(6)}\rho k_F^6, \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{V}({}^3P_2) &= \frac{3}{32}t_2^{(2)}(1+x_2^{(2)})\rho k_F^2 + \frac{9}{112}t_2^{(4)}(1+x_2^{(4)})\rho k_F^4 \\ &+ \frac{3}{10}t_2^{(6)}(1+x_2^{(6)})\rho k_F^6 - \frac{1}{16}W_0\rho k_F^2 \\ &- \frac{3}{160}t_o\rho k_F^2 - \frac{9}{280}t_o^{(4)}\rho k_F^4 - \frac{17}{1500}t_o^{(6)}\rho k_F^6, \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{V}({}^3D_1) &= \frac{9}{2800}t_1^{(4)}(1+x_1^{(4)})\rho k_F^4 + \frac{1}{50}t_1^{(6)}(1+x_1^{(6)})\rho k_F^6 \\ &- \frac{9}{1000}t_e^{(4)}\rho k_F^4 - \frac{7}{1500}t_e^{(6)}\rho k_F^6, \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\mathcal{V}({}^3F_2) = \frac{1}{70}t_2^{(6)}(1+x_2^{(6)})\rho k_F^6 - \frac{3}{875}t_o^{(6)}\rho k_F^6. \quad (3.41)$$

On remarquera que ceux-ci ne dépendent pas du terme t_e . En effet, seuls les termes diagonaux apparaissent dans le calcul des équations d'états. Le terme contenant t_e relie les états avec $L = 0$ avec ceux où $L = 2$. La contribution est donc nulle et il n'est donc pas possible de déterminer t_e en ajustant les ondes partielles.

Nous avons une nouvelle fois utilisé des calculs BHF fournis par Baldo [84] pour des valeurs de la densité identiques à celles des canaux. Nous avons fait le choix de garder les termes centraux des paramétrisations VLyB6 ℓ et VLyB3 ℓ obtenus par l'ajustement des canaux (S,T), et nous n'avons que pris en compte les ondes partielles des triplets pour ajuster les paramètres des termes tenseurs $t_o, t_o^{(4)}, t_o^{(6)}, t_e^{(6)}$ et le paramètre spin-orbite W_o . Dans les calculs HFB qui nous ont été fournis, nous n'avons accès qu'à des mélanges pour certaines ondes, comme les contributions ${}^3S_1 + {}^3D_1$ et ${}^3P_2 + {}^3F_2$. Pour l'ajustement, nous avons donc décidé de fixer tous les paramètres $t_e^{(i)}$ avec ces contributions tandis que les paramètres $t_o^{(i)}$ et le spin-orbite W_o sont fixés par les ondes partielles indépendantes 3P_0 et 3P_1 . Il est possible de voir le résultat d'un tel ajustement avec Skyrme N3LO sur la figure 3.5, et la paramétrisation correspondante dans le tableau 3.1.

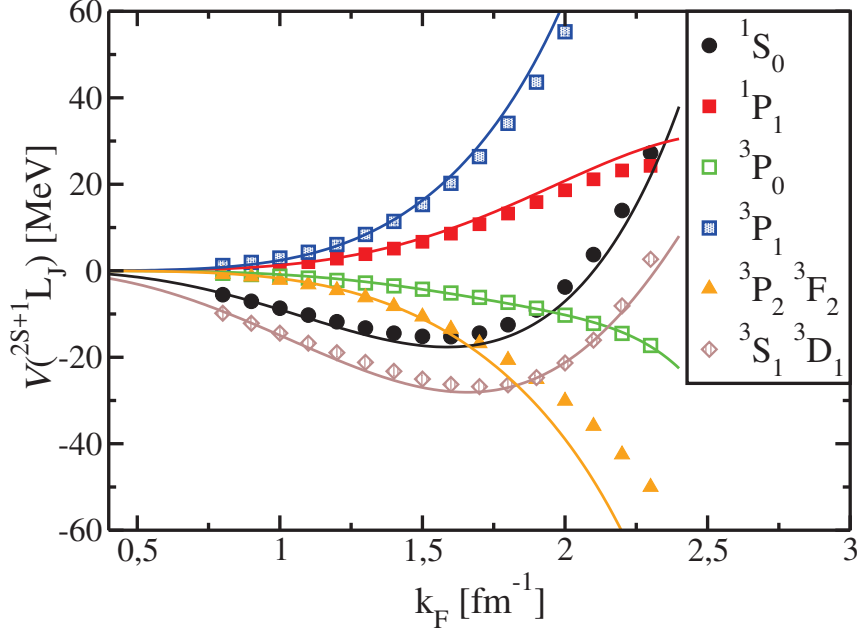


Figure 3.5 – Ajustement des ondes partielles $\mathcal{V}^{(2S+1)L_J}$. Les points correspondent aux calculs BHF, et les courbes au résultat de notre ajustement avec notre interaction VLYB33.

Nous avons choisi de représenter uniquement Skyrme N₃LO car les résultats de Skyrme N₂LO sont moins bons en comparaison, notamment sur les ondes partielles ${}^3S_1 + {}^3D_1$ et 1S_0 . Pour obtenir de bons résultats avec Skyrme N₂LO, il est nécessaire de réaliser un ajustement directement sur les ondes partielles.

Nous voyons que pour Skyrme N₃LO, les résultats de l'ajustement sont satisfaisants. L'onde partielle ${}^3P_2 + {}^3F_2$ présente des disparités à haute densité. La raison est que l'onde F n'obtient que des contributions des termes de Skyrme N₃LO, seuls à contenir des contributions $L = 3$. Il manque donc des corrections qui seraient apportées par un ordre supplémentaire.

On notera également que, comme pour les paramètres $t_2^{(n)}$, les paramètres $t_o^{(n)}$ et le paramètre de spin-orbite W_o sont fixés pour un terme central donné. Ce dernier a le double de la valeur habituellement observée dans les interactions de Skyrme standard, et quasiment la même valeur pour Skyrme N₂LO et Skyrme N₃LO. Enfin, comme pour les termes centraux, on constate pour les termes tenseurs que le passage d'un ordre à un autre induit la diminution d'un ordre de grandeur en valeur absolue, ce qui constitue un bon indice de convergence de notre développement en gradients.

Enfin, la valeur de t_o garde le même ordre de grandeur pour Skyrme N₂LO et Skyrme N₃LO, mais également le même signe. Ce résultat est en accord avec un travail effectué sur les paramètres de Landau [74], et nous permet d'affirmer que le paramètre t_o doit être restreint aux valeurs positives.

Avec les paramétrisations obtenues, nous avons calculé les paramètres de Landau, ainsi que les équations d'état de la matière polarisée, de la matière asymétrique, ainsi que de la matière de neutrons, polarisée ou non. Nous avons à ce stade constaté qu'aucune instabilité n'apparaissait pour une densité inférieure à 0.3 fm^{-3} . Toutefois, ces tests ne prenaient pas en compte d'éventuelles instabilités de taille finie pouvant apparaître quand on considère les propriétés de surfaces propres aux noyaux. Comme nous le verrons dans le chapitre consacré à l'ajustement de Skyrme N₂LO, ces paramétrisations présentent en réalité de telles instabilités, empêchant leur utilisation comme un point de départ pour un protocole d'ajustement incluant des contraintes

issues des noyaux.

Nous allons maintenant utiliser les équations d'états que nous avons développés dans ce chapitre afin d'utiliser Skyrme N₃LO dans le cadre de la description des étoiles à neutrons.

3.5 Application de Skyrme N₃LO à l'astrophysique

L'une des quantités clés utilisée en astrophysique est une équation d'état de la matière asymétrique en isospin, capable de décrire à la fois une matière symétrique et une matière de neutrons pour des densités allant jusqu'à 5 fois la densité de saturation nucléaire. Celle-ci intervient par exemple dans la description de propriétés des étoiles à neutrons. L'une de celles les plus employées est obtenue avec des calculs du même type que ceux utilisés pour nos ajustements dans les sections précédentes [57]. Seulement, de tels calculs demandent énormément de ressources numériques, et sont généralement ajustés par des interactions pour saisir les principales propriétés des calculs tout en employant ensuite des expressions analytiques permettant un traitement plus rapide. Il est possible dans ce cadre d'employer une interaction effective de Skyrme, comme l'ont fait Cao *et al* [85] avec leur paramétrisation LNS de Skyrme NLO. Nous avons montré dans les sections précédentes que nous étions en mesure de reproduire des données BHF jusqu'à des densités élevées, contrairement à Skyrme NLO. Nous avons donc examiné dans quelle mesure l'utilisation de Skyrme N₃LO pouvait améliorer la description des étoiles à neutrons (qui nécessitent de considérer des densités élevées) par rapport à Skyrme NLO.

3.5.1 Introduction aux étoiles à neutrons

Une étoile à neutrons est un objet dont la description théorique se fait en plusieurs couches. Sur l'enveloppe extérieure, la croûte externe est composée de noyaux de masse intermédiaires (Fe). Lorsque l'on s'enfonce un peu plus profondément, la pression augmente jusqu'à 10^{14} g/cm³ et les noyaux s'enrichissent en nucléons. Des données expérimentales pour de tels noyaux, éloignés des conditions usuelles de stabilité, ne sont alors pas disponibles. Au delà de la croûte, les noyaux deviennent un amas de protons, de neutrons et d'électrons. De nombreux modèles existent enfin pour rendre compte du coeur au centre de l'étoile à neutrons, que ce soit l'hypothèse d'une matière de pions ou de quarks déconfinés [86, 87]. Dans notre cas, nous nous restreindrons à un modèle nucléonique, c'est-à-dire à un coeur composé de neutrons, de protons, d'électrons et de muons.

La profusion de modèles est favorisée par le manque de contraintes expérimentales provenant directement d'observations des étoiles à neutrons. En effet, la plupart des contraintes que nous utiliserons dans cette section, proviennent de la physique nucléaire ou de la physique des ions lourds. La seule observable effectivement accessible est actuellement la masse de l'étoile, dont on connaît la borne inférieure de $1.4 M_{\odot}$ ⁵.

L'un des avantages de l'utilisation d'interactions issues de la physique nucléaire, telle Skyrme N₃LO, est qu'il est possible, à terme, d'obtenir une équation d'état unifiée le long de l'étoile à neutrons. En effet, il est possible de calculer à la fois les équations d'états du coeur, mais aussi les noyaux, même exotiques, présents dans la croûte.

3.5.2 Ajustement de Skyrme N₃LO

Nous avons réalisé un nouvel ajustement en prenant toujours en compte la matière symétrique, avec les canaux (S,T), mais nous avons cette fois également incorporé les calculs BHF sur la matière pure de neutrons.

5. M_{\odot} correspond à une masse solaire.

En accord avec les notations usuelles adoptées en astrophysique, la densité sera ici notée n . Le résultat de l'ajustement peut-être observé sur la figure 3.6.

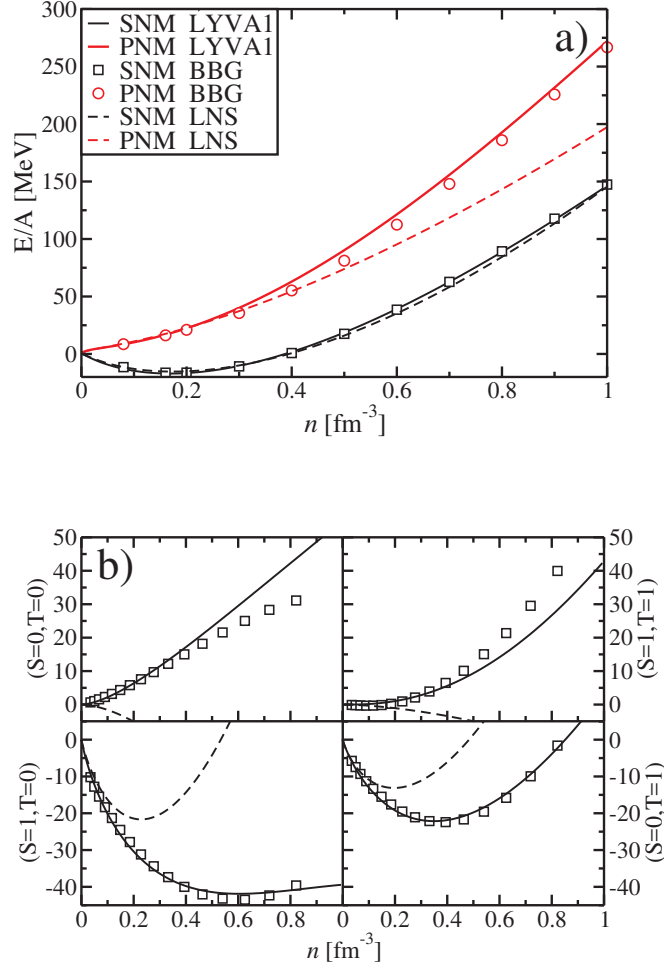


Figure 3.6 – Equations d'état de la matière symétrique (SNM) et pure de neutron (PNM) (a) et canaux (S, T) dans la matière symétrique (b). Les courbes en traits pleins représentent notre paramétrisation de Skyrme N3LO, nommée LYVA1, tandis que les points correspondent aux équations d'état obtenus par [57]. Les résultats avec la paramétrisation de Skyrme NLO, LNS[85], sont présentés sur les courbes en traits interrompus. L'abscisse n correspond à la densité ρ .

Cet ajustement a été réalisé de la même manière que pour la section précédente. Nous avons d'abord fixé les paramètres de Skyrme N2LO sur la matière symétrique. Nous avons ensuite ajusté les paramètres de l'ordre 6 sur la matière de neutrons. Pour maintenir la qualité de l'ajustement, les paramètres $t_1^{(6)}$ et $x_1^{(6)}$ ont été fixés à 0. L'interaction LNS [85], interaction NLO de Skyrme, parvient difficilement à reproduire les contraintes sur les canaux, mais aussi la matière de neutrons à densité élevée des calculs BHF. L'interaction étendue à N3LO de Skyrme parvient elle à reproduire correctement toutes les contraintes jusqu'à la densité de saturation et la matière de neutrons. On observe toutefois que les canaux $(S=0, T=0)$ et $(S=1, T=1)$ montrent une déviation après $\rho = 0.6 \text{ fm}^{-3}$. Le fait que nous ayons attribué un poids plus important à la matière de neutrons est

la cause.

La paramétrisation LYVA1 peut-être trouvée dans le tableau 3.2

Table 3.2 – Paramètres de l’extension de Skyrme N3LO LYVA1, avec $\alpha = 1/6$, $t_3^{(0)} = 13763$ [MeVfm $^{3+\alpha}$], and $x_3^{(0)} = 0.3$.

$t_0^{(0)}$ [MeV.fm 5]	$t_1^{(2)}$ [MeV.fm 5]	$t_2^{(2)}$ [MeV.fm 5]	$t_1^{(4)}$ [MeV.fm 7]	$t_2^{(4)}$ [MeV.fm 7]	$t_1^{(6)}$ [MeV.fm 9]	$t_2^{(6)}$ [MeV.fm 9]
-2518.240	207.300	527.930	-23.691	-68.263	0	0.690
$x_0^{(0)}$	$x_1^{(2)}$	$x_2^{(2)}$	$x_1^{(4)}$	$x_2^{(4)}$	$x_1^{(6)}$	$x_2^{(6)}$
0.2537	-0.1688	-1.0131	0.5650	-1.2022	0	-1.2500

Nous avons également comparé les performances de notre paramétrisation avec des interactions usuellement utilisées aux mêmes fins que notre interaction. Le graphique comparatif peut-être trouvé sur les figures 3.7 et 3.8.

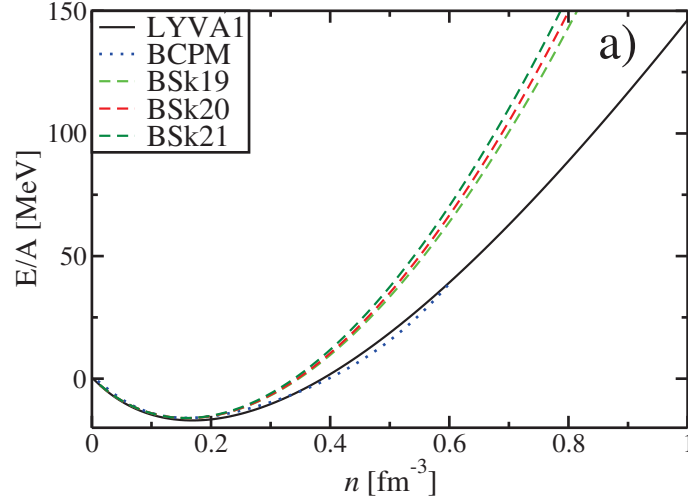


Figure 3.7 – Equations d’état dans la matière symétrique. LYVA1 est la courbe en traits pleins, les modèles BSk les courbes en traits interrompus et la fonctionnelle BCPM est en pointillés.

Les deux interactions, choisies parmi les non-relativistes, comme notre interaction, sont BCPM [88–90] et la famille des BSk [91, 92]. BCPM est une fonctionnelle qui ne dérive pas d’une interaction, et donc les paramètres ont été spécifiquement contraints pour reproduire les calculs BHF sur lesquels nous avons effectué notre ajustement dans la matière homogène. Les données dont nous disposons ne vont que jusqu’à $\rho = 0.6$ fm $^{-3}$ car au delà, BCPM utilise les résultats microscopiques [93]. Comme notre objectif est de comparer les performances des interactions, nous avons donc exclu ces points. Les modèles BSk ont été dérivés d’une interaction Skyrme NLO. Seulement, afin d’augmenter la qualité des prédictions, une dépendance en densité a été rajoutée dans les termes en gradients. Ces modèles ont ensuite été contraints sur des données issues des noyaux (masses et rayon de charges), mais également des ”pseudo-observables” de la matière infinie [94].

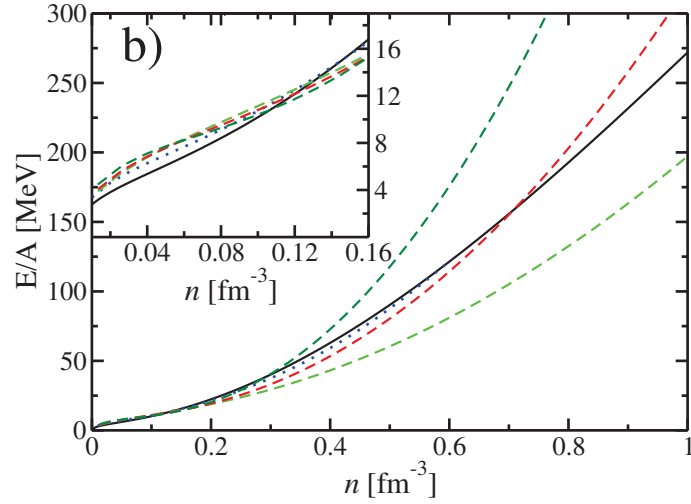


Figure 3.8 – Equations d'état dans la matière de neutrons. LYVA1 est la courbe en traits pleins, les modèles BSk les courbes en traits interrompus et la fonctionnelle BCPM est en pointillés.

On remarque que LYVA1 et BCPM se superposent. Cela est dû au fait que les deux interactions ont été ajustées sur le même jeu de données. On remarque également que les différentes interactions BSk ont toutes été ajustées sur la même matière symétrique, mais sur des matières de neutrons différentes.

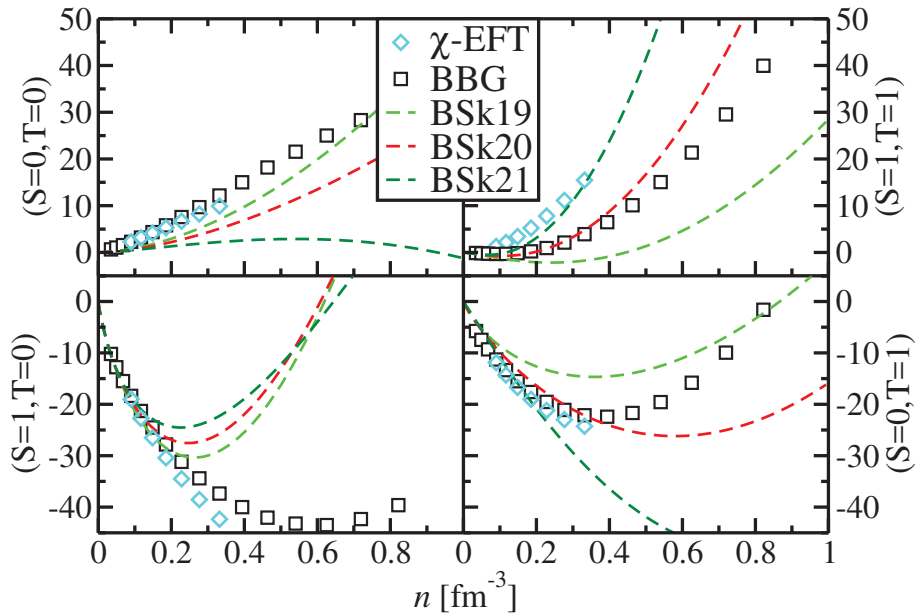


Figure 3.9 – Même légende que la figure 3.6.

3.5.3 Propriétés résultant de l'ajustement

Nous allons maintenant examiner les propriétés qui découlent de notre ajustement. Toutes les propriétés dans la suite du texte sont des prédictions de notre paramétrisation. Celles-ci sont présentées plus en détail dans le tableau 3.3.

La figure 3.10 montre l'énergie de liaison en fonction du paramètre d'asymétrie Y et de la densité ρ . On voit que l'énergie de liaison a son minimum pour $Y=0$, c'est-à-dire dans le cas de la matière symétrique. La valeur de l'énergie de liaison obtenue est $E/A = -17.02$ MeV et la densité de saturation est à $\rho_0 = 0.169$ fm⁻³. Comme précédemment, les valeurs sont plus élevées que celles prévues par les calculs BHF. Le but étant de démontrer que notre interaction est capable de saisir les principales propriétés des calculs BHF, nous avons fait le choix de conserver la valeur obtenue directement par l'ajustement, comme l'interaction LNS.

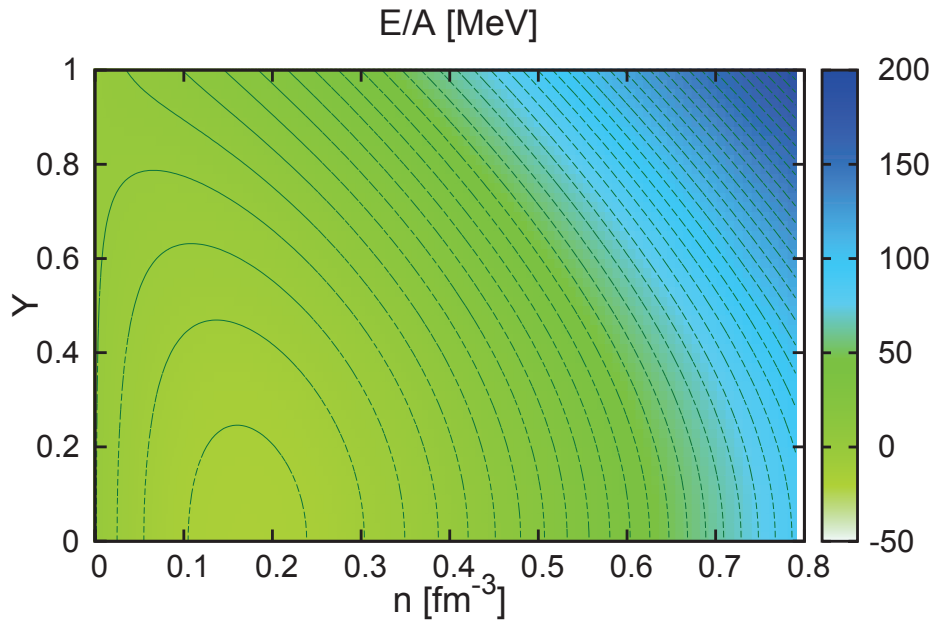


Figure 3.10 – Equations d'états dans la matière asymétrique fonction de la densité ρ , ici notée n , et du paramètre d'asymétrie Y .

Les "pseudo-observables" de la matière infinie sont présentées plus en détail dans le tableau 3.3. La "pseudo-observable" Q , aussi appelée "skewness" correspond simplement à la dérivée troisième de l'équation d'état vis à vis de la densité.

Table 3.3 – Propriétés obtenues avec l'interaction LYVA1 du tableau 3.2, ainsi que celles de la fonctionnelle BCPM et des interactions BSk19-21 à la densité de saturation n_0 .

	LYVA1	BCPM	BSk19	BSk20	BSk21	LNS
n_0 [fm ⁻³]	0.169	0.160	0.160	0.160	0.158	0.175
E/A [MeV]	-17.02	-16.00	-16.08	-16.80	-16.05	-15.31
K [MeV]	231	214	237	241	246	211
m^*/m	0.707	1	0.80	0.80	0.80	0.825
Q [MeV]	-463	-881	-298	-282	-274	-384
J [MeV]	33.8	31.9	30.0	30.0	30.0	33.4
L [MeV]	64.5	53.0	31.9	37.4	46.6	61.5

On remarque que notre interaction donne des performances comparables aux autres interactions.

Pression Nous avons regardé l'évolution de la pression P en fonction de ρ dans la matière symétrique. Celle-ci est présentée sur la figure 3.11. Les contraintes expérimentales sur cette quantité sont issues d'expériences avec les kaons [95] (à basse densité) et sur des collisions d'ions lourds [96] (à hautes densités).

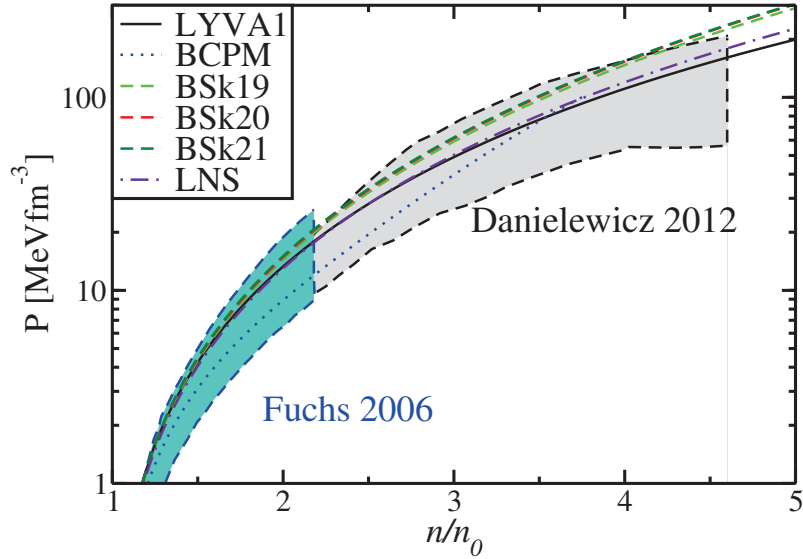


Figure 3.11 – La pression est ici exprimée en fonction de la densité dans la matière symétrique pour les différents modèles considérés dans le texte. Les contraintes en bleu sont issues d'expériences avec des kaons [95]. Les contraintes en gris sont issues de collisions d'ions lourds [96].

Encore une fois, les performances de notre paramétrisation avec Skyrme N₃LO sont comparables avec celles des interactions habituellement utilisées.

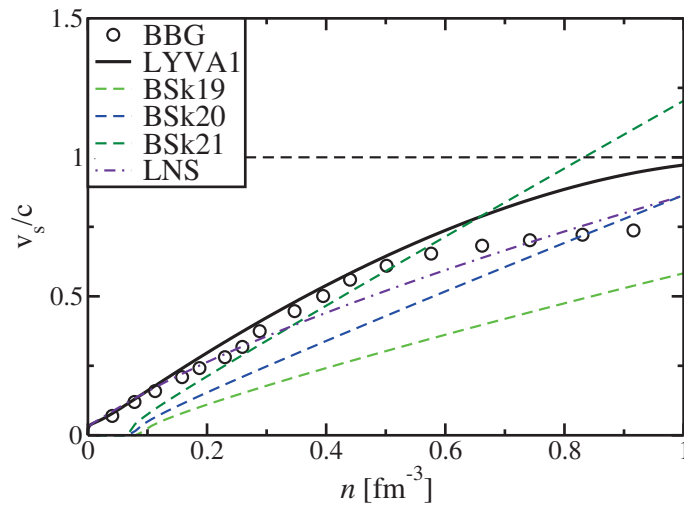


Figure 3.12 – La vitesse du son dans la matière de neutron en fonction de la densité du système. La notation est la même que pour la figure 3.6.

Causalité Il est aussi important pour une paramétrisation de vérifier que la formule (3.26) est vérifiée dans la matière de neutrons, afin de respecter le principe de causalité. C'est bien le cas de LYVA1 comme le montre la figure 3.12. Notre interaction est donc bien capable de décrire de la matière de neutrons à haute densité.

La valeur atteinte à haute densité est néanmoins très proche de la vitesse de la lumière. Il s'agit d'un symptôme propre à la nature non-relativiste de notre interaction.

Energie de symétrie Il est crucial de reproduire l'énergie de symétrie (Eq. (3.35)) car celle-ci joue un rôle dans la détermination de la composition d'une étoile à neutrons. La condition d'équilibre β y est intrinsèquement liée. Il est aussi possible de regarder si l'interaction déclenche le processus URCA.

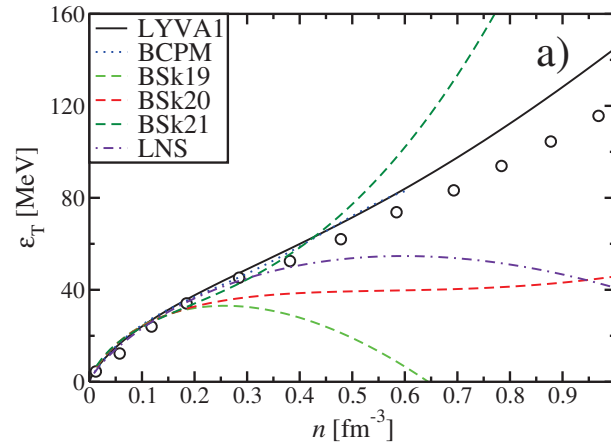


Figure 3.13 – Énergie de symétrie en fonction de la densité pour les modèles étudiés dans le texte. Les points correspondent aux calculs BHF.

La figure 3.13 représente l'énergie de symétrie en fonction de la densité pour LYVA1, les BSk, BCPM et LNS. Nous voyons tout d'abord que les résultats sont en accord les uns avec les autres jusqu'à une densité de 0.2 fm^{-3} . Cette zone est contrainte par des données expérimentales issues d'études sur des états isobariques et sur la peau de neutrons de noyaux [97], contraintes que LYVA1 satisfait. Plus de détails peuvent être trouvés sur ce sujet dans la référence [67].

Dans la section 3.3, il a été expliqué que l'énergie de symétrie peut-être extraite en utilisant une approximation parabolique [57]. Une telle approximation n'a été vérifiée que jusqu'à $\rho = 0.4 \text{ fm}^{-3}$ [98, 99]. Cette approche permet d'obtenir l'énergie de symétrie en prenant la différence entre les équations d'états de la matière symétrique et de la matière de neutrons :

$$\varepsilon_T(n)^{(2)} = \frac{E}{A}(n) \Big|_{SNM} - \frac{E}{A}(n) \Big|_{PNM} . \quad (3.42)$$

Sur la figure 3.14, nous faisons la comparaison pour LYVA1 entre l'utilisation de l'Eq. (3.42) et de l'Eq. (3.35).

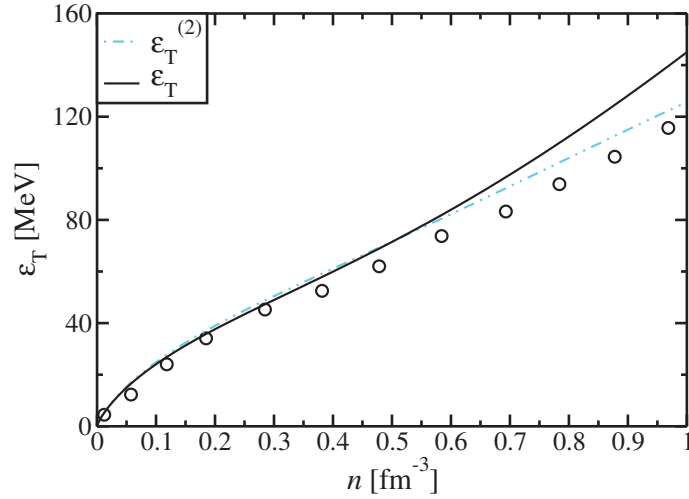


Figure 3.14 – Energie de symétrie en fonction de la densité, calculée de deux manière différentes. Les points correspondent aux calculs BHF.

Nous voyons que nous obtenons un meilleur accord avec les calculs BHF dans les hautes densités avec l'approximation parabolique. La différence présente avec les calculs BHF est due à la surestimation dans notre ajustement de la matière de neutrons. Il faut aussi garder à l'esprit que les calculs BHF sont de toute façon moins fiables à hautes densités. Nous remarquons enfin que les courbes de l'énergie de symétrie obtenues par les deux méthodes se superposent jusqu'à $\rho = 0.6 \text{ fm}^{-3}$. Un accord à une telle densité est jusqu'alors inédit.

Masse effective Nous avons déjà explicité l'intérêt à examiner la masse effective. Dans le cadre des étoiles à neutrons, la masse effective est également reliée à des processus d'émissions de neutrinos [100].

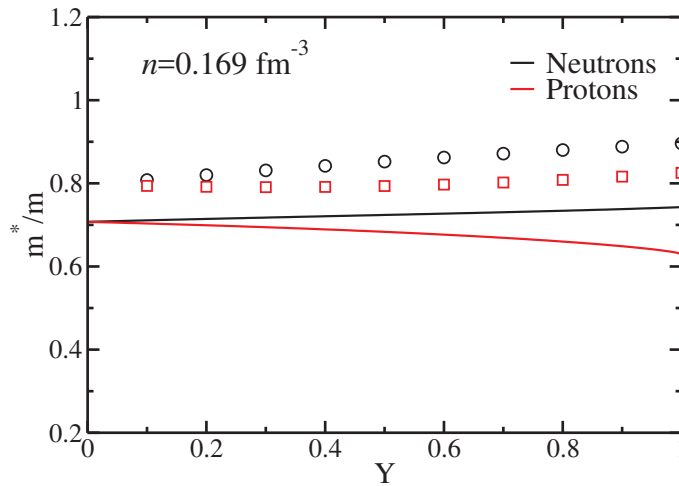


Figure 3.15 – Masse effective de protons et de neutrons à la densité de saturation, comme fonction du paramètre d'asymétrie Y . Les points correspondent aux calculs BHF de l'article [101] tandis que les courbes pleines représentent les prédictions de LYVA1.

Nous avons déterminé la masse effective dans la matière asymétrique (voir B.2). La limite dans la matière symétrique est explicitée dans l'Eq.(3.32). Il est possible d'observer sur la figure 3.15 que la séparation de la

masse effective Δm a le bon comportement et le bon signe vis-à-vis des calculs BHF. Notons également qu'il est compliqué de relever les courbes à hauteurs des points de BHF, sans dégrader d'autres observables, comme l'incompressibilité (voir la section.(3.3) pour les détails).

Comme nous l'avons fait systématiquement jusqu'alors, nous pouvons comparer dans la figure 3.16 les performances de LYVA1 et des autres modèles utilisés pour les étoiles à neutrons.

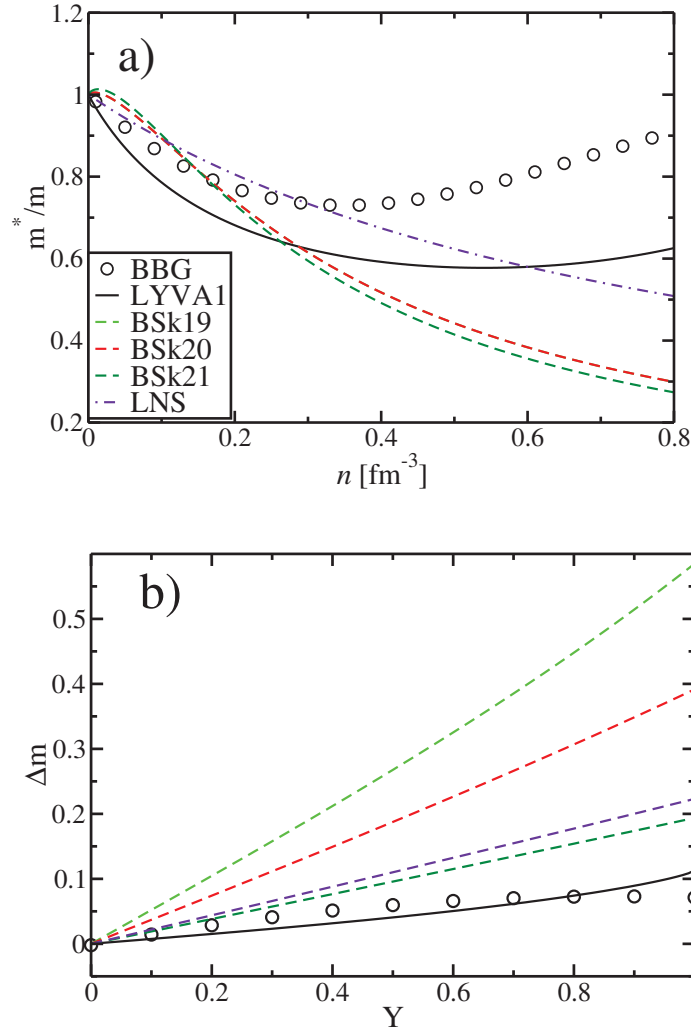


Figure 3.16 – Masse effective de neutron dans la matière symétrique (a) en fonction de la densité. La courbe pleine correspond à LYVA1, les courbes en traits interrompus aux modèles BsK et la courbe en trait-point alternés correspond à LNS. Les calculs BHF correspondent aux points. Sur le graphique (b), l'évolution de la séparation de la masse effective à saturation est représentée en fonction du paramètre d'asymétrie Y .

Il est possible de voir que les reproductions de la masse effective sont disparates d'une interaction à une autre. Bien que nous ne reproduisons pas les calculs BHF, nous observons dans le graphique du haut que le comportement de notre courbe présente le même relèvement à haute densité qui peut également être observé dans les calculs ajustés. LYVA1 est la seule paramétrisation à présenter ce comportement. De plus, si l'on s'intéresse maintenant au graphique de droite, on peut voir que notre reproduction de la séparation de la

masse effective est elle bien meilleure que les autres modèles concernés.

Un complément sur la masse effective polarisée est présenté B.2.

Propriétés de l'étoile à neutrons Dans cette sous-section, nous allons présenter les prédictions qui concernent les propriétés des étoiles à neutrons qui n'évoluent pas en masse et à température nulle.

Nous représentons sur la figure 3.17 la fraction de protons par rapport à la densité calculée avec la paramétrisation LYVA1. D'après [102], le type d'étoile à neutrons que l'on cherche à décrire, à température nulle, doit présenter un refroidissement rapide. Celui-ci est permis pour la fraction de proton $x \simeq 0.11$, et ce processus est appelé direct URCA. Il est possible de voir que notre paramétrisation prédit la possibilité d'un tel processus à environ trois fois la densité de saturation et est en accord avec les calculs BHF jusqu'à $\rho = 0.6 \text{ fm}^{-3}$, tout en conservant un comportement analogue au-delà.

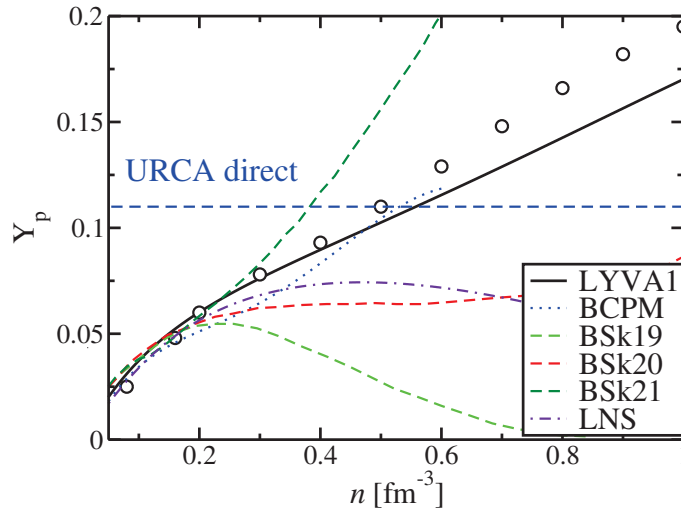


Figure 3.17 – Fraction de protons Y_p fonction de la densité de l'étoile. La courbe en traits interrompus représente la limite de déclenchement du processus direct URCA durant le refroidissement de l'étoile à neutrons. Les points représentent les calculs BHF.

Comme précisé lorsque nous avons abordé l'énergie de symétrie, le processus direct URCA et l'énergie de symétrie rendent tous les deux compte de l'équilibre β pour une équation d'état nucléonique comme la nôtre. Nous voyons que BSk21 déclenche aussi un processus direct URCA, mais LYVA1 est le seul modèle qui décrit à la fois la possibilité d'un tel processus et la séparation de la masse effective.

Pour déterminer la masse et le rayon de l'étoile à neutrons, nous avons résolu les équations de Tolman-Oppenheimer-Volkov (TOV) pour la pression totale et la masse. Les équations B.5, ainsi que les détails concernant les hypothèses, sont disponibles en appendice. Les prédictions masses-rayons de LYVA1 sont présentées sur la figure 3.18. On peut y voir deux mesures récentes de masses d'étoiles à neutrons [103, 104] qui sont toutes les deux compatibles avec des étoiles à neutrons de $2 M_\odot$. La prédiction obtenue avec l'équation d'état issue de notre paramétrisation de Skyrme N3LO est compatible avec de telles mesures, fournissant une valeur maximale de $M = 1.96 M_\odot$ dans le cas où l'étoile ne tourne pas. Il est tout à fait possible d'augmenter cette valeur en raffinant davantage notre modèle.

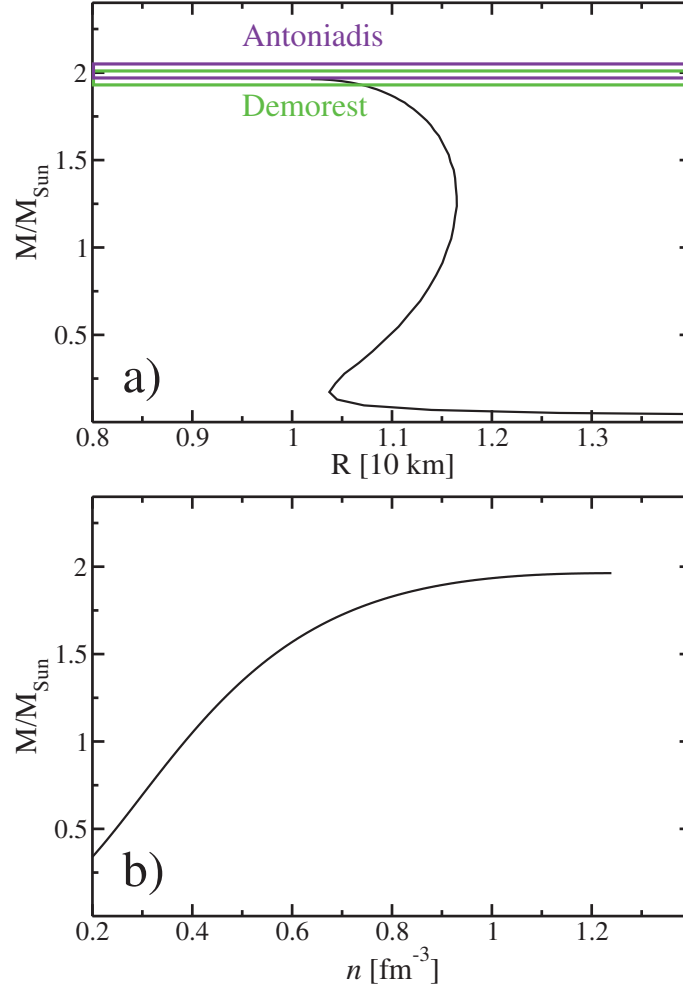


Figure 3.18 – Relation masse-rayon (a) pour une étoile à neutrons obtenue avec notre équation d'état, en résolvant les équations TOV. Les barres horizontales proviennent de deux mesures récentes de masses d'étoile à neutrons, $M/M_{\odot} = 1.97 \pm 0.04$ dans [103] et $M/M_{\odot} = 2.01 \pm 0.04$ dans [104]. La masse en fonction de la densité est présentée en (b).

Concernant le rayon, qu'il est difficile de contraindre correctement, nous obtenons une valeur de 11.6 km pour une étoile à neutron de $1.4 M_{\odot}$. Cette valeur est en accord avec les résultats obtenus avec BHF, mais aussi avec [105], qui prédit pour des étoiles à neutrons de $1.4 M_{\odot}$ une limite haute pour le rayon de 12.5 km. Le graphique (b) de la figure 3.18 montre l'évolution de la masse maximum en fonction de la densité. Encore une fois, notre prédiction est en accord avec de récentes contraintes formulées dans [106], qui indique l'absence de processus direct URCA pour des étoiles à neutrons entre 1 et $1.5 M_{\odot}$. En regardant à la fois la figure 3.17 et la figure (b), on constate que le déclenchement du processus URCA se fait pour un étoile à neutrons ayant une masse de $1.54 M_{\odot}$.

Nous avons dans ce chapitre montré que l'extension de Skyrme à N_3LO permettait de voir émerger de nouvelles propriétés, au niveau de la masse effective, qui dépend désormais de la densité, mais aussi une nouvelle flexibilité capable de reproduire des contraintes qui jusqu'alors étaient réalisées de manière insatisfaisante avec uniquement Skyrme NLO. Nous avons aussi exploré les performances d'une telle interaction dans le cadre pratique de la description d'une étoile à neutrons. La paramétrisation et le modèle que l'on a

développés présentent également l'intérêt, couplé aux calculs dans les noyaux de Skyrme N₂LO et Skyrme N₃LO, de pouvoir décrire l'étoile à neutron nucléonique dans son intégralité, à savoir à la fois les noyaux des couches externes et la matière infinie dans les couches internes. Encore une fois, ces résultats obtenus permettent d'être confiant sur la capacité de Skyrme N₃LO à répondre à la fois aux contraintes usuelles de la matière infinie, mais aussi à celles des noyaux.

Nous avons prolongé donc ces travaux dans la matière nucléaire infinie, mais dans le cadre d'une comparaison des performances de Skyrme N₃LO avec les potentiels à portée finies de Gogny et M₃Y, utilisés dans la description des noyaux. Cette étude est présentée en détail dans le chapitre suivant.

4

Comparaison du potentiel de Skyrme N₃LO avec les potentiels de Gogny et M₃Y

Dans le précédent chapitre, nous avons montré que le pseudo-potentiel de Skyrme étendu à l'ordre 6 en gradients (N₃LO) permettait de reproduire certaines propriétés de la matière nucléaire infinie obtenues par des calculs *ab-initio*. Nous avons aussi vu son application dans un domaine qui exploite les données de la matière infinie asymétrique, à savoir la description des étoiles à neutrons. Nous allons maintenant comparer les performances de notre interaction Skyrme N₃LO dans la matière infinie avec celles des potentiels de portée finie issues de la structure nucléaire introduits dans la section 2.3.

Ce travail exploratoire a pour but d'établir un pont entre ces interactions, et de justifier le choix d'employer Skyrme N₃LO. Nous verrons notamment que l'extension jusqu'à l'ordre 6 en gradients permet d'obtenir des performances similaires à celles de l'interaction de Gogny dans la matière infinie. De plus, comme les interactions de Skyrme peuvent être vues comme des développements des interactions de portée finie, nous allons montrer qu'il est possible d'établir des relations reliant les paramètres de Skyrme N₃LO et les interactions de Gogny et M₃Y.

4.1 Equations d'états globales des potentiels à portée finie

Le calcul des équations d'état des potentiels à portée finie est analogue à celui effectué pour les potentiels de Skyrme, et l'Eq.(3.3) ainsi que la procédure exposée restent tout à fait générales. Bien entendu, le calcul ne présente pas les fonctions $\delta(r, r')$ issues de la portée nulle de Skyrme et nécessite le calcul d'intégrales plus complexes. Le résultat final de ces calculs est présenté dans la sous-section C.1.1 de l'appendice. Les détails des expressions pour l'interaction de Gogny peuvent aussi être trouvés dans [107]. Il faut également garder à l'esprit, dans la comparaison avec les graphiques présentés dans la section précédente, que dans cette première partie, les interactions à portée finie n'ont pas été ajustées sur les calculs BHF. De plus, ces interactions rendent

également compte de contraintes liées aux noyaux, alors que Skyrme N₃LO, au stade de ce manuscrit, ne le fait pas encore. La figure 4.1 présente les équations d'état de paramétrisations du type M₃Y et Gogny, ainsi que les points des calculs HFB que nous avons précédemment utilisés [57].

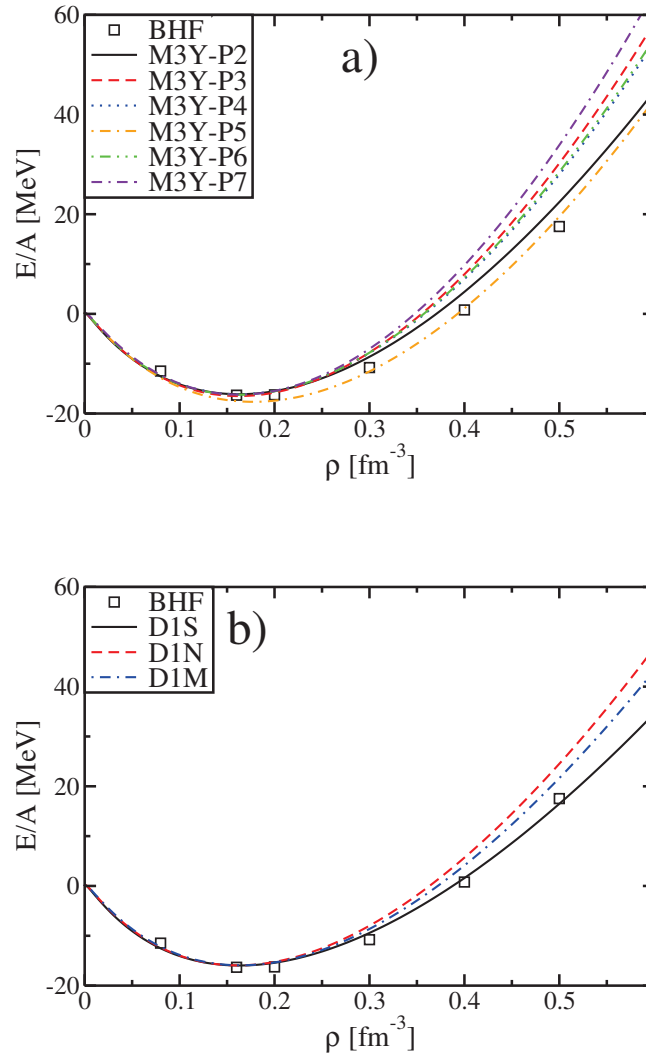


Figure 4.1 – Equations d'états de la matière infinie symétrique pour des paramétrisations de type M₃Y (a) et de type Gogny (b). Les courbes représentent les résultats obtenus par les interactions tandis que les points correspondent aux équations d'état obtenus par des calculs BHF [57].

Ces équations d'état dépendent seulement des termes centraux et du terme en ρ^α . De manière analogue à Skyrme N₃LO, les termes spin-orbite et tenseur ne contribuent pas à ces courbes. Il apparaît après décomposition de ces équations états en ondes partielles.

Dans la mesure où ces paramétrisations visent à décrire les noyaux finis, celles-ci sont en accord jusqu'à environ deux fois la valeur de saturation nucléaire. A hautes densités, des différences apparaissent. Les interactions de type Gogny parviennent à mieux reproduire les calculs BHF sur tout l'intervalle de densité. Rappelons

néanmoins qu'il n'existe que peu de contraintes expérimentales pour ces hautes densités, et que différentes méthodes microscopiques [108], à l'image des différents calculs *ab-initio* de la figure 3.4, donnent des profils différents pour celles-ci.

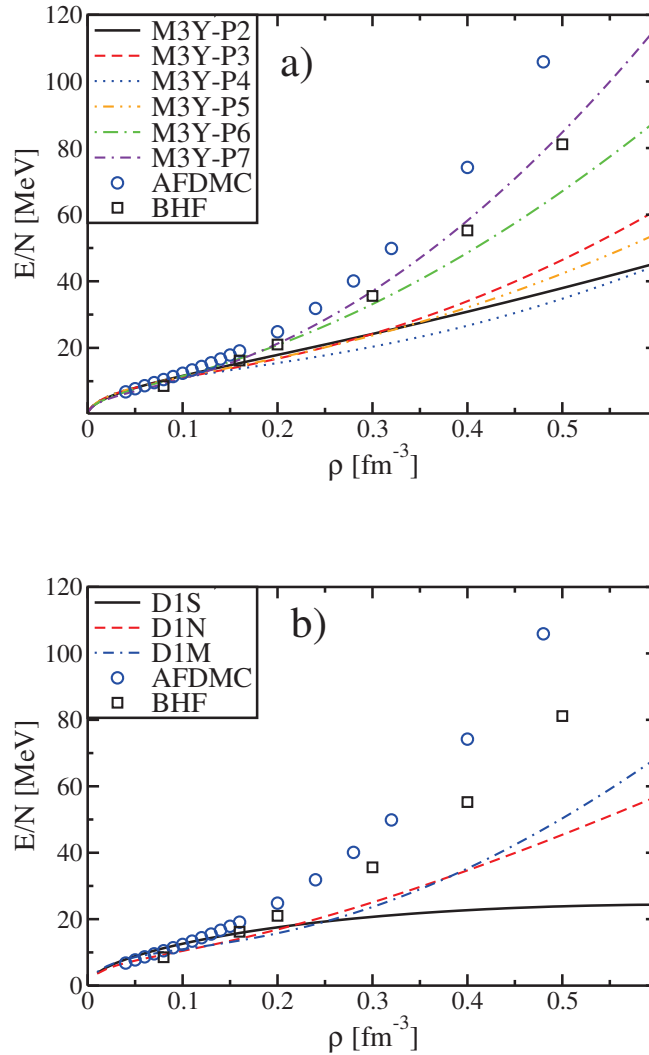


Figure 4.2 – Equations d'état de la matière infinie de neutrons pour des paramétrisations de type M3Y (a) et de type Gogny (b). Les courbes représentent les résultats obtenus par les interactions tandis que les points correspondent aux équations d'état obtenus par des calculs BHF [57].

Les équations d'état dans la matière symétrique ne suffisent pas à rendre compte des propriétés d'une interaction effective. Nous avons donc également déterminé les équations d'états pour la matière pure de neutrons. Celles-ci sont présentées dans la figure 4.2 pour les mêmes interactions que la matière symétrique. On voit que pour la matière de neutrons, les courbes sont en accord uniquement jusqu'à 0.2 fm^{-3} . On constate au-delà une large variation. Notons également que M3Y-P7 est très proche des résultats des calculs BHF car cette interaction a été explicitement ajustée sur ces mêmes données. Nous avons également ajouté un autre

calcul basé sur des simulations de Monte Carlo quantique construites à partir d'Argonne AV8 [109, 110]. Cela permet d'illustrer une fois de plus que les calculs microscopiques peuvent donner des résultats bien différents au-delà de la densité de saturation. A cet égard, les performances à hautes densités des interactions de M3Y et de Gogny sont à relativiser, en gardant à l'esprit que le protocole d'ajustement a pu prendre en compte une matière de neutrons se comportant différemment.

Concernant le comportement des équations d'état de la matière de neutrons, notons malgré tout qu'il a été montré qu'une équation d'état trop douce, comme pour Gogny D1S, entraîne un décalage dans les énergies de liaisons pour les noyaux riches en neutrons. C'est d'ailleurs pour répondre à ce problème que D1S a été construite [50, 111].

Pour continuer à s'inscrire dans la même démarche que pour Skyrme N3LO, nous allons maintenant décomposer ces équations d'états en canaux spin-isospin.

4.2 Décomposition en canaux (S,T) des équations d'états pour les potentiels à portée finie

Comme précédemment, la procédure exposée pour Skyrme N3LO reste valable. On renvoie donc à l'équation (3.5), toujours appropriée ici. Rappelons enfin que ni les termes tenseurs, ni le terme spin-orbite ne contribuent dans ces canaux. Les résultats analytiques de la décomposition peuvent être trouvés dans l'appendice C.1.2.

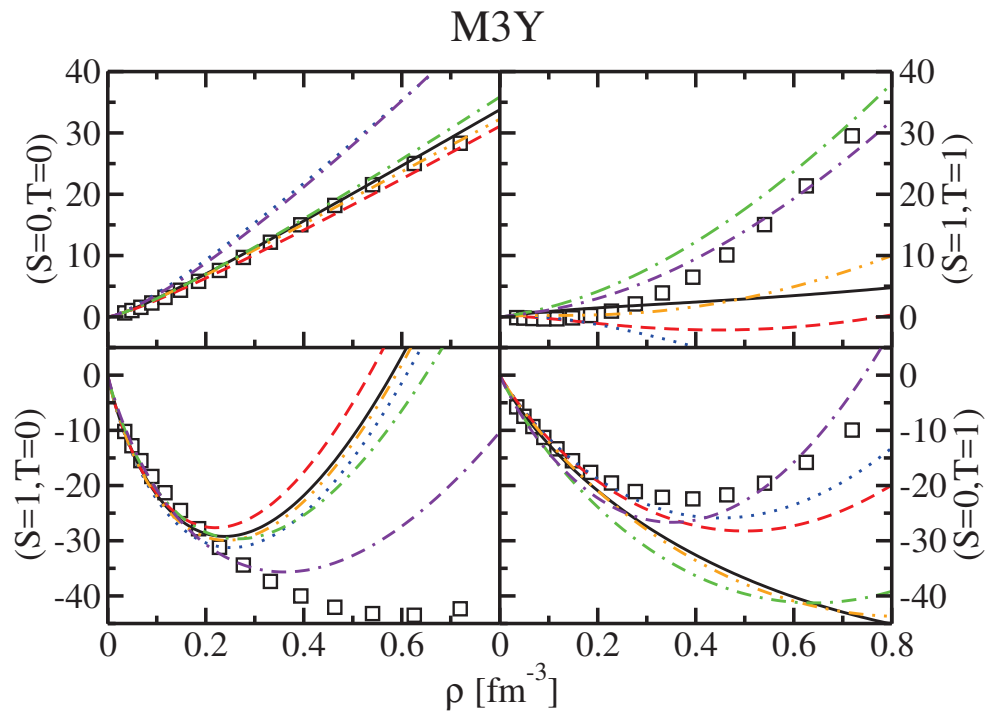


Figure 4.3 – Décomposition des équations d'états de la matière symétrique en canaux (S, T) pour les interactions de type M3Y. Les notations sont les mêmes que celles de la figure 4.1. En ordonnées, les énergies sont en MeV.

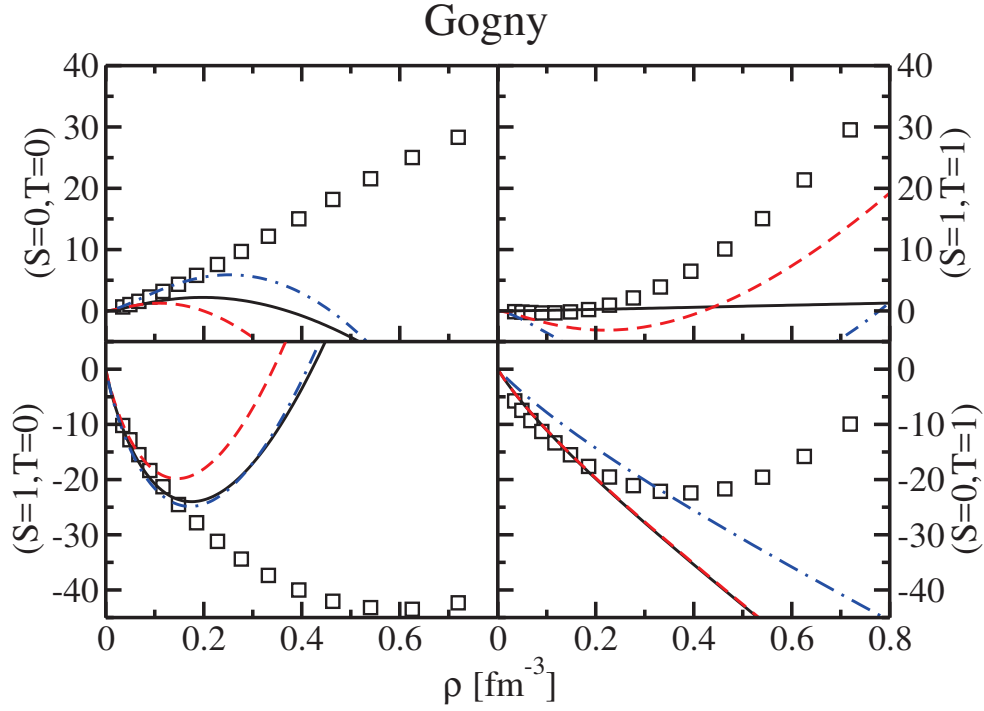


Figure 4.4 – Décomposition des équations d'états de la matière symétrique en canaux (S, T) pour les interactions de Gogny. Les notations sont les mêmes que celles de la figure 4.1. En ordonnées, les énergies sont en MeV.

Sur les figures 4.3 et 4.4, on compare les canaux (S, T) pour les interactions du type M_3Y et Gogny avec les calculs BHF utilisés pour ajuster Skyrme N_3LO dans la section précédente. On voit que M_3Y est globalement en accord avec les points à reproduire, même dans les hautes densités où, bien que ne passant pas par les points au delà de la densité de saturation, le comportement de la courbe imite malgré tout celui des calculs BHF. M_3Y possède donc assez de degrés de liberté pour satisfaire à la fois aux contraintes de la matière infinie et des noyaux.

Si l'on s'intéresse aux paramétrisations de l'interaction de Gogny, on constate que cela n'est pas le cas. Hormis D_1S , celles-ci ne sont même pas en accord jusqu'à la densité de saturation. Cela est particulièrement vrai pour la canal $(S=1, T=1)$. Si l'on compare les performances de ces interactions avec une interaction de Skyrme NLO , SLy_5 par exemple (figure 3.2), qui est comme les interactions de Gogny aussi ajusté à la fois sur les noyaux et la matière infinie, on peut constater que les interactions de Gogny fournissent de meilleurs résultats. Il est d'ailleurs bien connu que les interactions standard de Skyrme ont même des difficultés à reproduire le bon signe [36] dans les canaux (S, T) lorsque l'on incorpore des contraintes issues des noyaux finis. Notons toutefois que contrairement aux interactions de Skyrme, les canaux interviennent directement dans la procédure d'ajustement de D_1S [111].

Pour tenter d'améliorer les performances des interactions de Gogny, nous avons réajusté (D_1M -fit) en maintenant les deux portées telles que dans la paramétrisation originale, mais en ajustant les canaux (S, T) avec le reste des paramètres. On voit bien que même en libérant l'interaction de Gogny des contraintes des noyaux, les canaux $(S=1, T=0)$ et $(S=0, T=1)$ ont toujours du mal à être correctement reproduits. Nous avons

alors tenté d'ajouter une nouvelle gaussienne à l'interaction de Gogny pour voir si celle-ci pouvait améliorer ce résultat. Cette gaussienne se caractérise par 5 nouveaux paramètres, dont une nouvelle portée. Nous avons fait le choix de fixer les trois portées aux valeurs ($\mu_1^C = 0.25$ fm, $\mu_2^C = 0.8$ fm, $\mu_3^C = 1.2$ fm), dans l'esprit de ce qui avait été fait pour l'interaction M₃Y. Nous avons ensuite ajusté les paramètres restants sur le même modèle que Skyrme N₃LO (voir section 3.4 ou l'article [64]). Le résultat de cet ajustement est présenté sur la figure 4.5. On peut y voir le bon accord jusqu'à plusieurs fois la densité de saturation avec les calculs BHF, indiquant qu'une troisième gaussienne rendrait l'interaction de Gogny, aujourd'hui peu utilisée en astrophysique, plus viable.

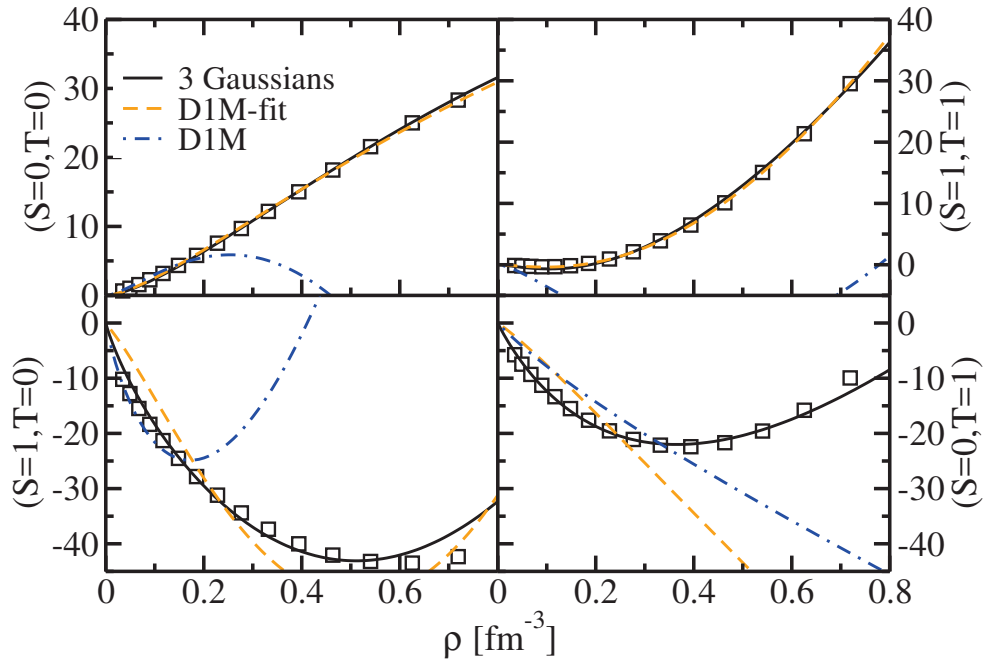


Figure 4.5 – Canaux (S, T) de l'équation d'état de la matière infinie symétrique, en MeV. La courbe pleine est notre ajustement avec une gaussienne supplémentaire. La courbe en traits-points alternés correspond à la paramétrisation D1M tandis que la courbe en traits alternés correspond à un réajustement de l'interaction avec les canaux pour seules contraintes. Les points proviennent de [57].

L'amélioration constatée au niveau des canaux (S, T) ne se répercute que modérément sur les équations d'états de la matière de neutrons, comme il est possible de le voir sur la figure 4.6. On remarque que l'équation d'état plutôt douce de D1M pour la matière de neutrons se durcit. Cependant, pour obtenir de meilleurs résultats, les résultats des calculs BHF devraient être inclus dans l'ajustement, comme nous l'avons fait pour Skyrme N₃LO. Bien entendu, l'apport éventuel d'une nouvelle gaussienne ne pourrait être réellement mesuré qu'en effectuant un ajustement incorporant des contraintes provenant des noyaux.

En suivant le cheminement que nous avons effectué pour Skyrme N₃LO et étant donné la bonne reproduction des canaux (S, T) par les interactions de type M₃Y, nous avons décidé d'examiner la décomposition de l'équation d'état de la matière symétrique en ondes partielles. Cela nous permettra par la même occasion d'examiner plus en détail l'influence des termes tenseurs et de spin-orbite, qui commencent seulement à intervenir

à ce niveau.

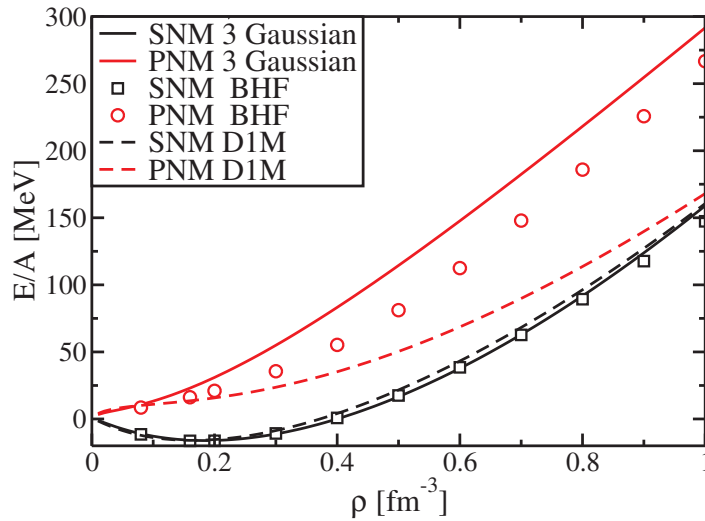


Figure 4.6 – Equations d'état dans la matière symétrique et de neutrons pour les interactions de Gogny considérées dans la figure 4.5. Les points correspondent aux calculs BHF de l'article [57].

4.3 Décomposition des équations d'états des interactions M₃Y et Gogny en ondes partielles

On procède à nouveau comme cela a été fait pour Skyrme N₃LO [74, 112, 113]. On a montré sur la figure 2.2 que les contributions des ondes partielles de moment orbital L élevé (ici $L > 3$) étaient négligeables devant celles de faible moment orbital. Cette hypothèse peut se vérifier quantitativement en comparant dans la figure 4.7 l'équation d'état totale dans la matière infinie symétrique avec les contributions des ondes partielles jusqu'à $L = 3$. On voit clairement que la somme des premières ondes partielles est une excellente approximation de l'équation d'état globale. Nous avons donc choisi de négliger dans la suite de cette étude les ondes au-delà des ondes F . Les formules analytiques pour les interactions de Gogny et M₃Y peuvent être trouvées dans l'appendice C.2.

Pour avoir une idée de l'ordre de grandeur de chaque onde partielle, la figure 4.8 montre les contributions cumulées de celles-ci à l'équation d'état dans le cas de D₁S. On voit que l'influence des ondes partielles $L > 3$ est négligeable même à haute densité. Les trois premières ondes partielles (S, P, D) parviennent déjà à reproduire correctement l'équation d'état à quelques pourcents, et ce jusqu'à quatre fois la densité de saturation.

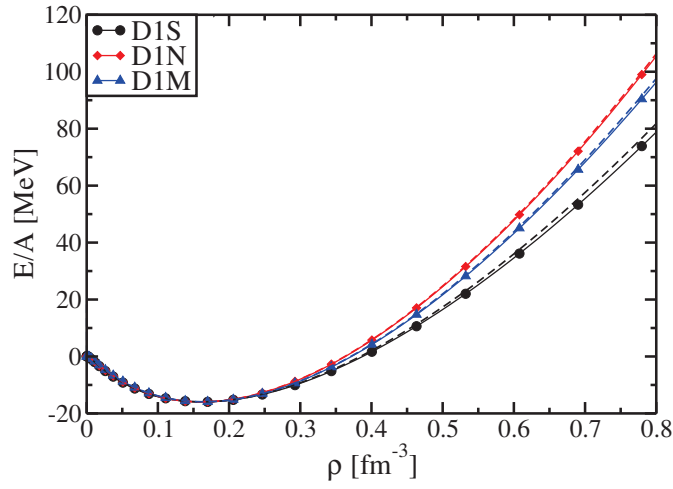


Figure 4.7 – Comparaison entre les équations d'état de la matière infinie symétrique obtenues avec des paramétrisations de Gogny complètes (lignes pleines), et les équations d'états obtenues en utilisant seulement les contributions des premières ondes partielles $L < 3$ (lignes alternées).

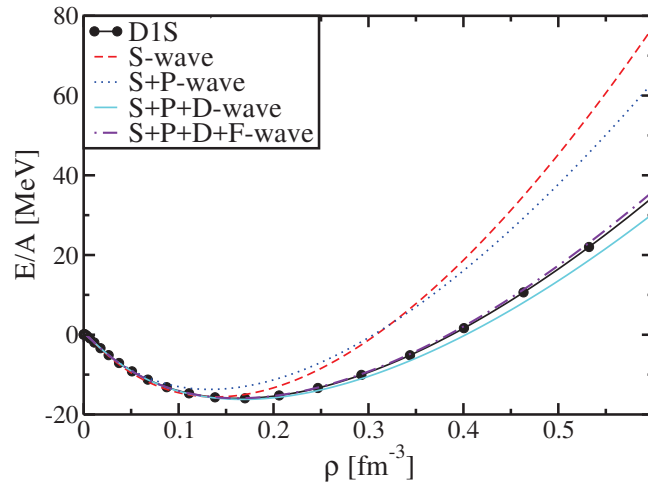


Figure 4.8 – Equation d'état dans la matière symétrique de l'interaction D1S (ligne pleine avec points) et courbes cumulatives des contributions des ondes partielles (traits alternés).

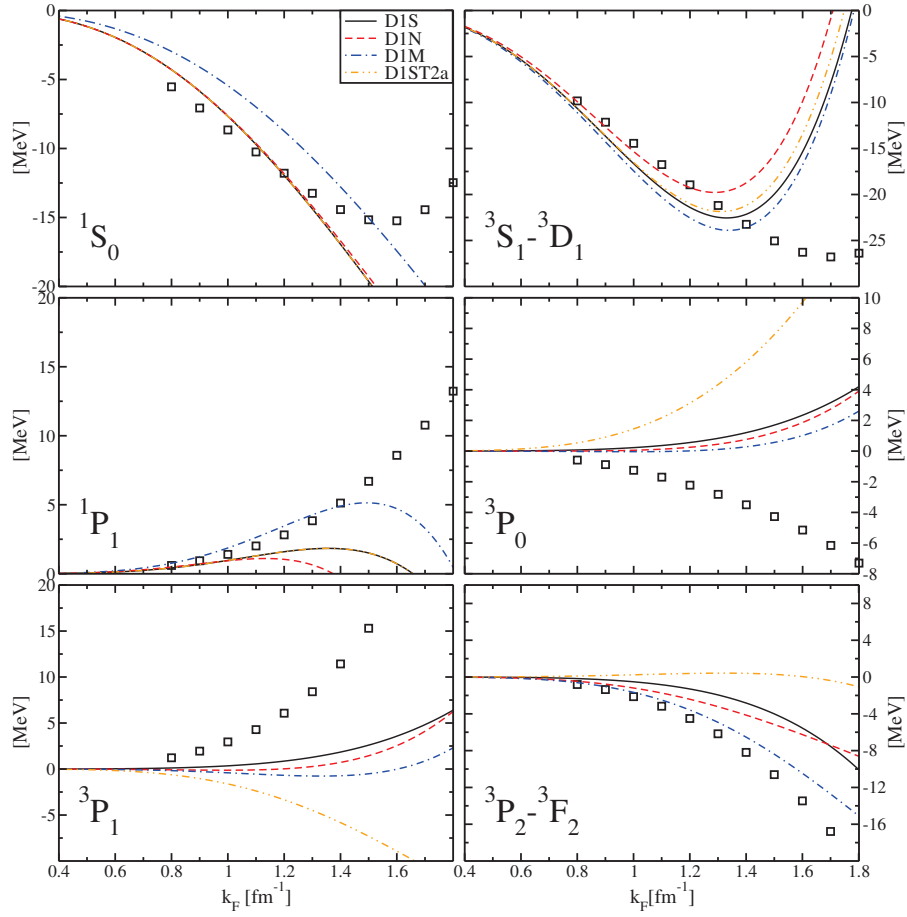


Figure 4.9 – Décomposition en ondes partielles de l'équation d'état de la matière infinie symétrique pour différentes interactions de Gogny. Les carrés correspondent aux calculs BHF [57].

La figure 4.9 présente les ondes partielles obtenues pour différentes paramétrisations de l'interaction de Gogny. On voit que les écarts relevés sur les canaux nucléaires se retrouvent au niveau des ondes partielles. Les ondes partielles sont aussi le premier niveau où on voit une contribution des termes tenseurs et spin-orbite. Celle-ci apparaît spécifiquement dans les triplets. En regardant les expressions explicites de ces triplets (voir Eq. (C.1)), on se rend compte que les contributions des termes centraux sont les mêmes à un facteur $(2J + 1)$ pour un moment orbital L et un spin total S donné. Ainsi, en examinant des combinaisons précises présentées dans les équations (4.1-4.3), il est possible d'isoler les contributions spécifiques des termes tenseurs et spin-orbites.

$$\delta_P = \frac{1}{3}\mathcal{V}_G(^3P_1) - \mathcal{V}_G(^3P_0), \quad (4.1)$$

$$\delta_D = \frac{1}{5}\mathcal{V}_G(^3D_2) - \frac{1}{7}\mathcal{V}_G(^3D_3), \quad (4.2)$$

$$\delta_F = \frac{1}{7}\mathcal{V}_G(^3F_3) - \frac{1}{9}\mathcal{V}_G(^3F_4), \quad (4.3)$$

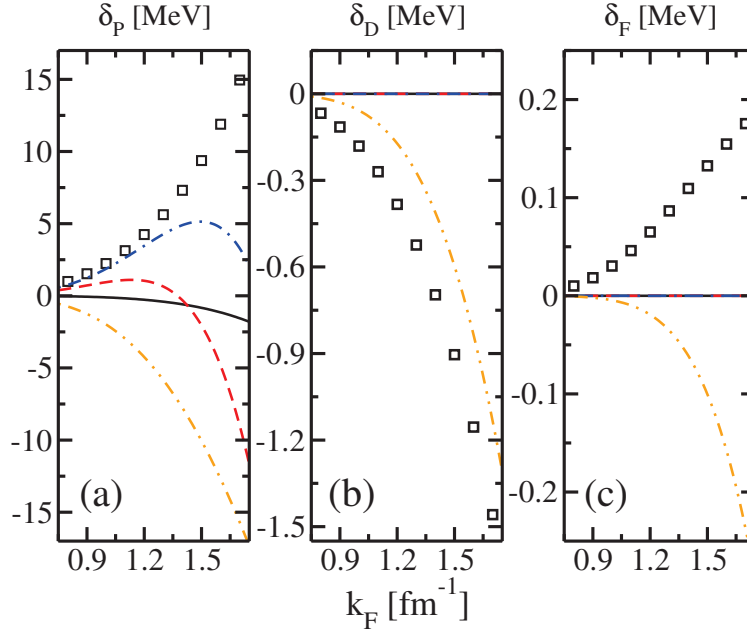


Figure 4.10 – Différences d’ondes partielles, en MeV, pour les calculs BHF (points) et les paramétrisations de l’interaction de Gogny (lignes interrompues). La légende est identique à la figure 4.9.

Dans la figure 4.10, nous comparons les combinaisons (4.1-4.3) pour différentes paramétrisations de l’interaction de Gogny. Pour les paramétrisations D_{1S} , D_{1N} et D_{1M} , la séparation de différentes ondes partielles avec un même L se produit uniquement avec le terme spin-orbite (voir Eqs. C.1) car les termes tenseurs sont nuls. Comme il s’agit d’un spin-orbite de portée nulle, comme Skyrme NLO, cela signifie qu’il ne contribue que pour $L = 1$. Pour cette raison, on voit que la séparation des ondes partielles D et F est nulle. La paramétrisation D_{1ST2a} a un comportement différent, qui s’explique par l’introduction d’un terme tenseur explicite. On voit alors, toujours d’après les mêmes équations, que la séparation se produit également pour les ondes partielles D et F . On remarque toutefois que le signe n’est pas en accord avec les calculs BHF pour les ondes P et F . La raison, déjà exposée dans [114], est qu’il peut exister une disparité entre les paramètres tenseurs ajustés sur les noyaux [46] et ceux déduit de propriétés de la matière infinie, tel les paramètres de Landau [14, 115].

La même analyse sur les ondes partielles a été réalisée pour l’interaction M_{3Y} . On peut observer celles-ci sur les figures 4.11 et 4.12. La reproduction est convenable pour les premières ondes partielles, mais certaines, comme 3P_1 et ${}^3P_2 - {}^3F_2$ ne reproduisent même pas le même signe que les calculs BHF. Les prédictions des paramétrisations M_{3Y} sont toutefois bien meilleures que celles de Gogny. On notera particulièrement l’accord avec les calculs BHF du canal 1S_0 , qui est relié à l’appariement.

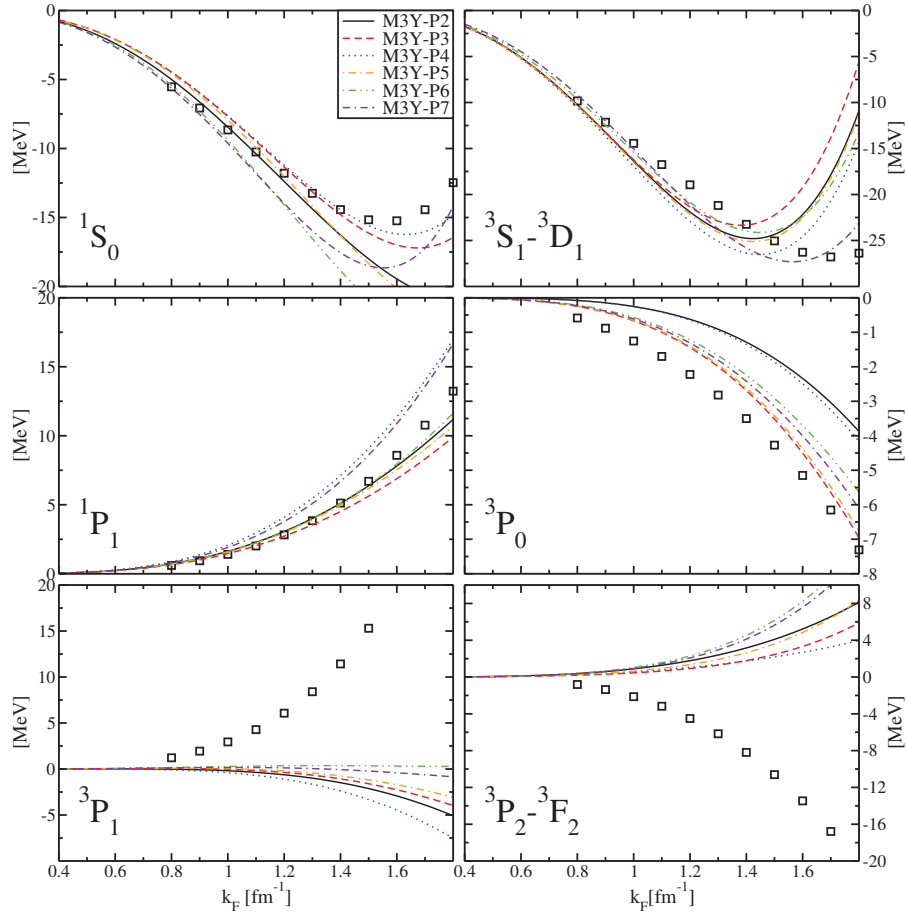


Figure 4.11 – Décomposition des ondes partielles de l'équation d'état dans la matière symétrique pour différentes paramétrisations de l'interaction M3Y, en lignes pleines. Les calculs BHF [57] sont représenté par des points.

Nous avons également isolé les contributions spécifiques au spin-orbite et aux termes tenseurs, de la même manière que pour les interactions de Gogny. Les combinaisons d'ondes partielles pour ce faire sont d'ailleurs toujours celles des équations (4.1-4.3). Contrairement aux paramétrisations de l'interaction de Gogny, les ondes P et D ont le bon signe, même si leur ordre de grandeur est trop petit par rapport aux calculs BHF. Les résultats pour les ondes F , d'un autre côté, ne donnent le signe correct que pour la dernière génération d'interaction M3Y. Une telle observation est compatible avec une analyse faite sur les paramètres de Landau [115].

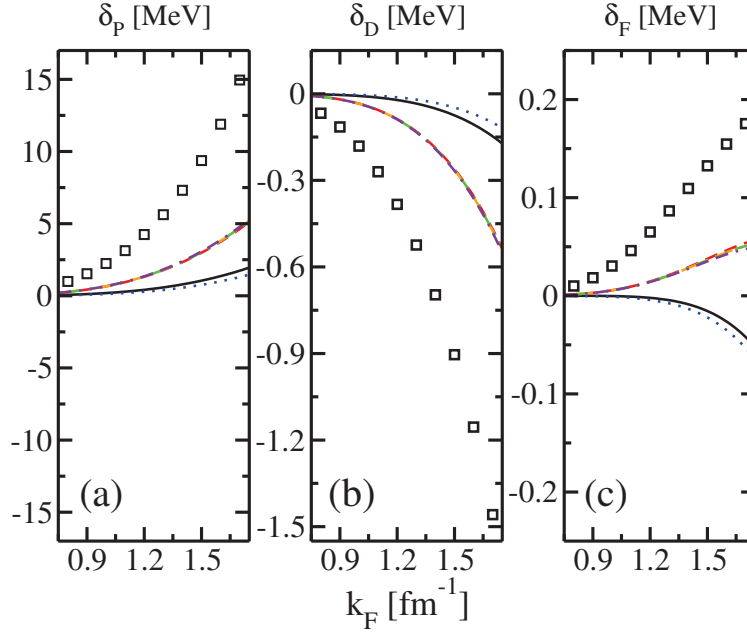


Figure 4.12 – Différences d’ondes partielles, en MeV, pour les calculs BHF (points) et les paramétrisations de l’interaction M3Y (lignes interrompues). La légende est identique à la figure 4.11.

4.4 Compléments sur la troisième gaussienne de l’interaction de Gogny

Suite à l’ajustement de l’interaction de Gogny avec trois gaussiennes, nous avons décidé d’explorer davantage les propriétés d’une telle interaction. Nous avons donc choisi de réaliser son ajustement en incorporant les ondes partielles de Baldo [57].

Choix des portées Pour déterminer la paramétrisation de départ et les valeurs des trois portées, nous avons eu l’idée d’établir un lien avec celles de l’interaction M3Y. En effet, alors que les portées de Gogny n’ont pas de signification physique (en dehors de la signification spatiale, courte ou longue), les portées de M3Y sont directement reliées aux masses des mésons vecteurs de l’interaction nucléaire. Ces interactions sont chacune composées d’un potentiel de portée finie :

$$V_Y(R) = \frac{e^{-\mu r}}{\mu r} \quad (4.4)$$

$$V_G(R) = e^{-r^2/\mu^2} \quad (4.5)$$

Nous avons calculé les termes de Hartree et de Fock de l’énergie d’auto-interaction pour ces deux potentiels. Le ratio Fock sur Hartree s’écrit, pour le potentiel de Yukawa :

$$RY_{F/H} = \frac{3}{16x_Y^4} (2x_Y (x_Y - \arctan(2x_Y)) + \operatorname{atanh}(2x_Y^2/(1+2x_Y^2))) \rightarrow \frac{1}{4} - \frac{2x_Y^2}{5} + \dots, \quad (4.6)$$

où $x_Y = k_F/\mu_Y$,

et pour le potentiel de Gogny :

$$RG_{F/H} = \frac{3}{4x_G^4} \left(-2 + 2e^{-x_G^2} + \sqrt{\pi}x \operatorname{Erf}(x_G) \right) \rightarrow \frac{1}{4} - \frac{x_G^2}{10} + \dots \quad (4.7)$$

où $x_G = k_F \mu_G$,

Il est possible de définir un critère sur ces rapports. En considérant les portées de Yukawa, il est possible d'obtenir des valeurs de ce rapport. Afin que l'interaction de Gogny décrive la même physique, on peut s'attendre à ce que le rapport soit du même ordre de grandeur. On a représenté ces fonctions sur la figure 4.13.

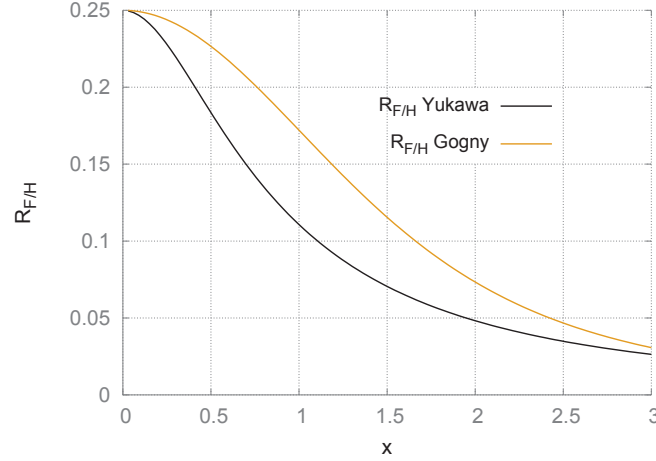


Figure 4.13 – Rapport des termes de Fock et de Hartree pour les interactions de Gogny et M3Y en fonction de $x \equiv x_G, x_Y$ suivant le cas.

On peut alors établir le passage entre les portées de manière graphique. En prenant les trois portées de Yukawa ($\mu_1^{-1} = 0.25$ fm (m=790 MeV), $\mu_2^{-1} = 0.4$ fm (m=490 MeV) $\mu_3^{-1} = 1.414$ fm (m=140 MeV)), on obtient les trois ratios :

$$RY_{F/H}(1) = 0.228 \quad (4.8)$$

$$RY_{F/H}(2) = 0.202 \quad (4.9)$$

$$RY_{F/H}(3) = 0.076 \quad (4.10)$$

Pour ces trois ratios, la courbe associée au potentiel gaussien nous donne alors les portées correspondantes pour l'interaction de Gogny :

$$\mu_1 = 0.475 \text{ fm} \quad (4.11)$$

$$\mu_2 = 0.746 \text{ fm} \quad (4.12)$$

$$\mu_3 = 1.964 \text{ fm} \quad (4.13)$$

On peut comparer ces valeurs avec celles de portées des paramétrisations déjà existantes de Gogny :

— la paramétrisation D1S

$$\mu_1 = 0.7 \text{ fm} \quad (4.14)$$

$$\mu_2 = 1.4 \text{ fm} \quad (4.15)$$

— la paramétrisation D1M

$$\mu_1 = 0.5 \text{ fm} \quad (4.16)$$

$$\mu_2 = 1.0 \text{ fm} \quad (4.17)$$

On peut voir avec les portées de ces paramétrisations que l'une des deux est généralement proche d'une de nos valeurs, tandis que la seconde est approximativement la moyenne de nos deux autres valeurs.

Ajustement de l'interaction de Gogny avec une troisième gaussienne dans la matière infinie

Nous avons ensuite réalisé un ajustement de Gogny en incorporant les contraintes présentées dans le tableau 4.1. Cet ajustement a été réalisé avec un algorithme de minimisation du χ^2 de Nelder-Mead [116].

Table 4.1 – Pseudo-observables de la matière infinie choisies comme contraintes, écarts autorisés et équivalence des points en moment de Fermi

"Pseudo-observables"	Écart tolérée [MeV]	Nombre de points	Équivalent k_F [fm^{-1}]
Équation d'état Symétrique [MeV]	1.00	16	0.8-2.3
Canaux (S,T) [MeV]	0.2	12	0.8-1.9
Ondes partielles $L. \leq .3$ [MeV]	0.2	10	0.8-1.7

Nous incorporons les termes spin-orbite et tenseurs qui interviennent dans les ondes partielles. En l'absence de ceux-ci, il est possible d'obtenir une reproduction raisonnable de l'équation d'état et des canaux (S,T) ainsi que les ondes partielles dans lesquelles le tenseur et le spin-orbite ne contribuent pas. Il est possible d'observer que l'équation d'état est présente dans les contraintes, mais avec un grand écart toléré comparé aux autres observables. Cela nous permet d'imposer le comportement de la courbe, à savoir une saturation pour l'ajustement, sans trop contraindre l'ajustement par une valeur trop précise. L'objectif de cet ajustement est en effet de montrer que la nouvelle portée permet de reproduire les ondes partielles jusqu'à saturation. Nous laissons lors de l'ajustement les portées du paragraphe précédent varier de 10 % pour offrir davantage de flexibilité. Les résultats sont représentés sur les figures 4.14-4.19.

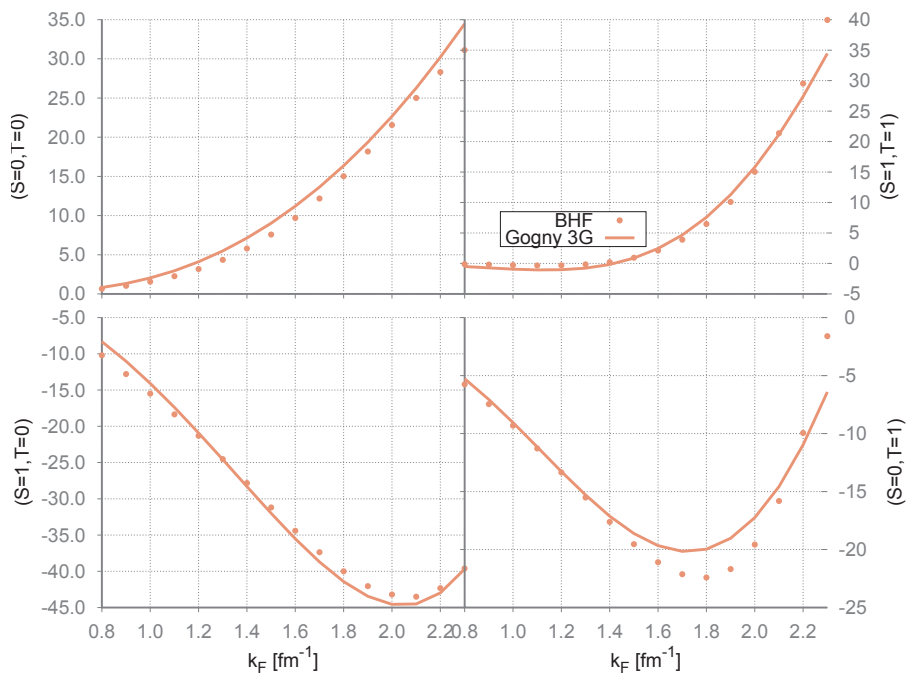


Figure 4.14 – Ajustement de l'interaction de Gogny avec une troisième gaussienne sur les canaux nucléaire (S,T) obtenus par des calculs BHF.

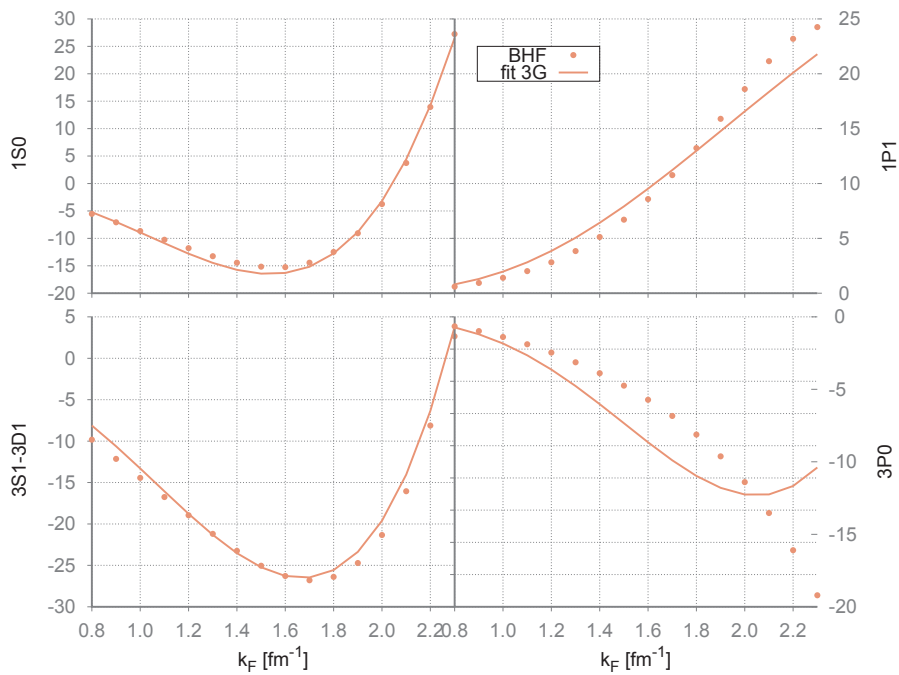


Figure 4.15 – Ajustement de l'interaction de Gogny avec une troisième gaussienne sur les ondes partielles $^1S_0, ^1P_1, ^3S_1 - ^3D_1$ et 3P_0 obtenus avec des calculs BHF.

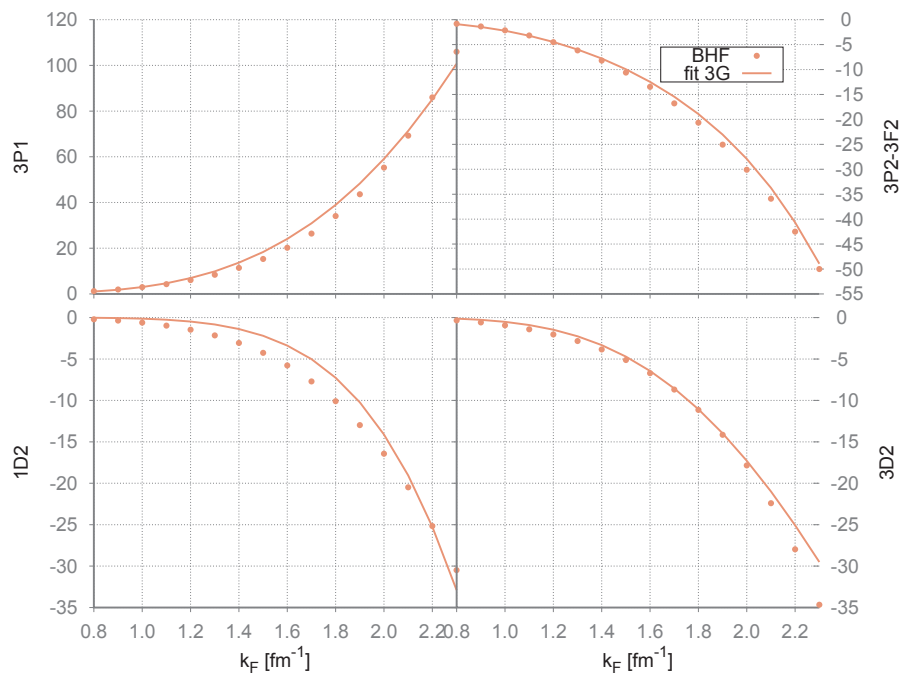


Figure 4.16 – Ajustement de l'interaction de Gogny avec une troisième gaussienne sur les ondes partielles 3S_1 , ${}^3P_2 - {}^3F_2$, 1D_2 et 3D_2 obtenus avec des calculs BHF.

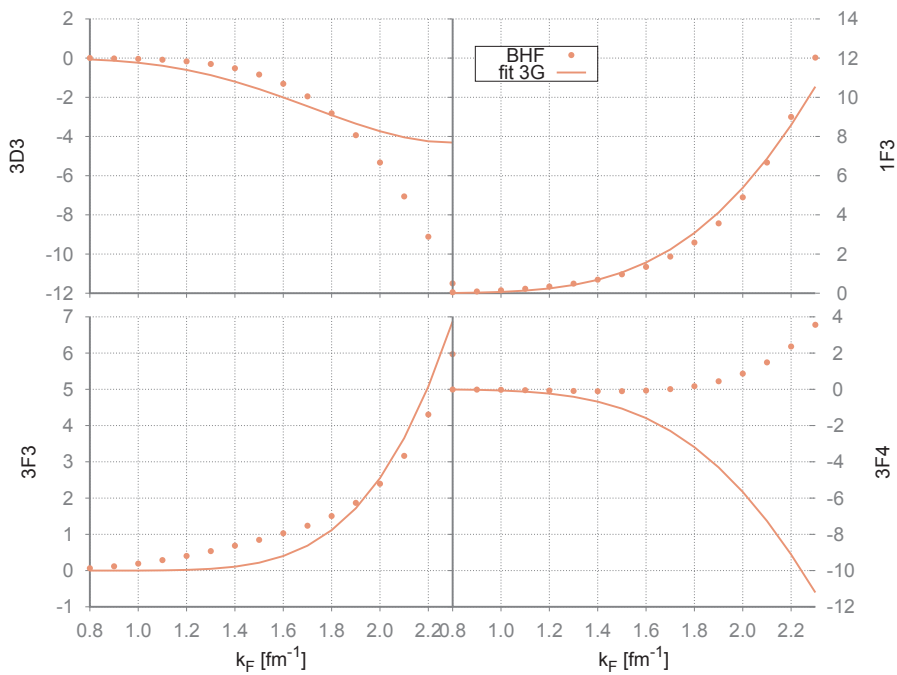


Figure 4.17 – Ajustement de l'interaction de Gogny avec une troisième gaussienne sur les ondes partielles 3D_1 , 1F_3 , 3D_3 et 3F_4 obtenus avec des calculs BHF. Les ondes F ne sont pas ajustées, mais résultent de l'ajustement.

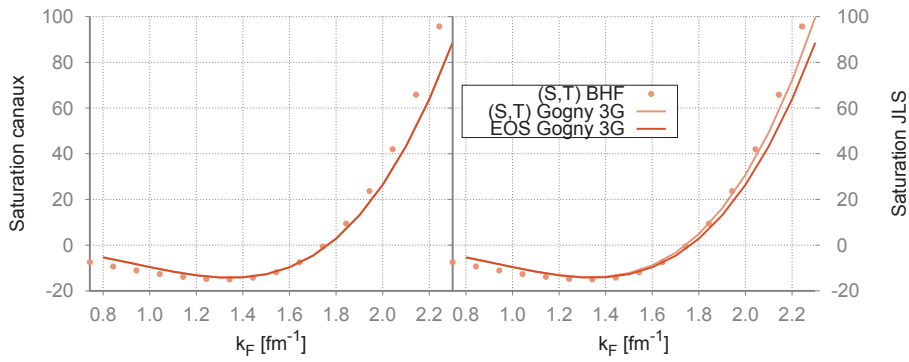


Figure 4.18 – Ajustement de l'interaction de Gogny avec une troisième gaussienne sur l'équation d'état obtenue par des calculs BHF. Les points représentent les canaux BHF, la courbe rouge représente la somme des quatre canaux, la courbe orange la somme des ondes partielles.

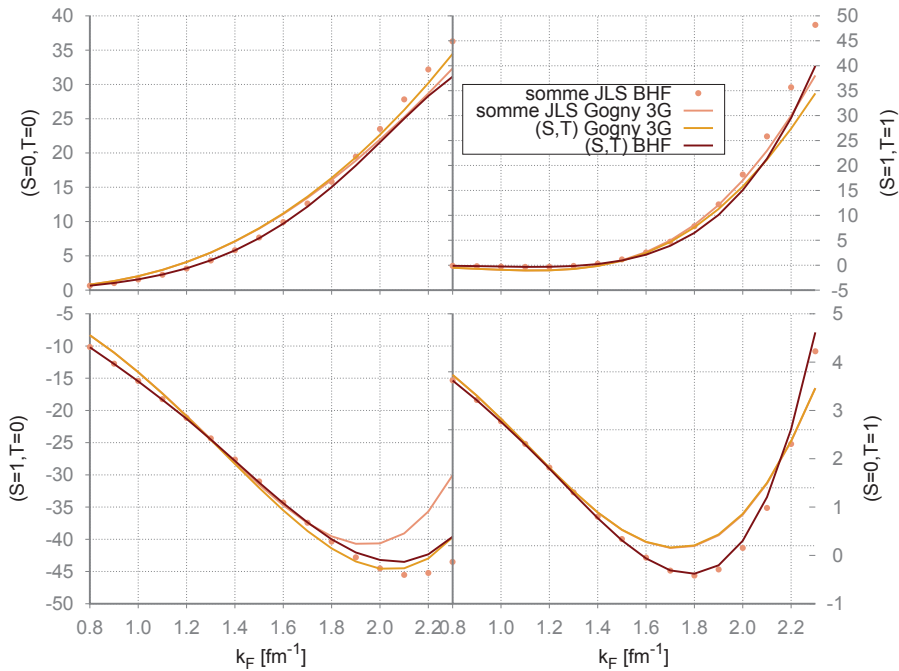


Figure 4.19 – Ajustement de l'interaction de Gogny avec une troisième gaussienne. Les points représentent les canaux BHF, la courbe rouge représente la somme des quatre canaux, la courbe orange la somme des ondes partielles.

On peut voir sur les figures précédentes, et en comparaison avec la figure 4.9, que l'interaction de Gogny avec 3 gaussiennes permet de reproduire les ondes partielles jusqu'à la densité de saturation. Les canaux nucléaires peuvent être reproduits en même temps que les ondes partielles. La figure 4.18 nous montre que cette interaction reproduit également une équation d'état de la matière symétrique qui sature, avec $\rho_{sat} = 0.1820 \text{ fm}^{-3}$ et $E/A = -14.2853 \text{ MeV}$. Ces valeurs sont un peu plus élevées que celles généralement attendues, mais on reproduit en réalité la saturation des calculs BHF qui est à cette valeur. L'objectif de cette paramétrisation est de montrer la nouvelle flexibilité offerte par la nouvelle portée, et non de l'appliquer ici

à un calcul des noyaux qui nécessiterait $\rho_{sat} = 0.16 \text{ fm}^{-3}$. Notons néanmoins les bonnes performances sur les deux "pseudo-observables" non ajustées avec $K_\infty = 201.6624$ et $m/m^* = 0.7478$. Ces résultats sont encourageants car il a été montré dans l'article [117] qu'il pouvait être intéressant d'ajouter celles-ci comme contraintes dans les noyaux [117], pour rendre compte de propriétés de diffusions.

Sur la figure 4.18, on a tracé la saturation en sommant les canaux (S,T) et en sommant les ondes partielles. On voit apparaître une disparité car les formules analytiques des canaux incorporent toutes les ondes partielles, alors que les ondes partielles sommées pour notre interaction ne vont que jusqu'à $L=3$. On peut toutefois constater que les courbes sont superposées jusqu'à la saturation. Un constat identique est réalisé sur la figure 4.19 mais pour les ondes partielles. Les disparités à haute densité y sont plus accrues. Celles-ci sont dues à la présence des portées qui prennent en compte toutes les ondes partielles. Ce n'est pas le cas de l'interaction de Skyrme N3LO, où ces courbes se superposeraient.

Les portées obtenues à la suite de cet ajustement nous ont conforté dans les valeurs que nous avons choisies. Leur évolution est indiquée dans le tableau 4.2.

Table 4.2 – Évolution des portées après ajustement

Portée [fm]	Valeur ajustée	Valeur initiale	Écart toléré
μ_1 [fm]	0.42812	0.47500	0.05000
μ_2 [fm]	0.69487	0.74600	0.07000
μ_3 [fm]	1.76760	1.96400	0.2000

Il est possible de voir que les valeurs des trois portées ont évolué dans la même direction. Leur valeurs initiales ont été obtenues à partir d'une interaction ajustée sur des noyaux, avec une saturation autour de 0.16 fm^{-3} . On s'attend donc à ce que ces portées révèlent encore plus leur pertinence dans les calculs de noyaux finis. Pour cette raison, nous avons essayé d'obtenir une saturation de 0.16 fm^{-3} . En relâchant les contraintes ¹, nous avons été capable de reproduire les mêmes "pseudo-observables" jusqu'à saturation à 0.16 fm^{-3} .

L'objectif de cet ajustement est d'avoir une valeur de la saturation permettant d'initialiser un ajustement incorporant les contraintes des noyaux. Les bons résultats préliminaires de cette interaction nous ont en effet poussé à envisager un ajustement similaire à celui présenté dans le chapitre 5 avec Skyrme N2LO pour cette interaction de Gogny avec 3 gaussiennes. Ce travail devrait nous permettre d'explorer le lien entre portée finie et portée nulle, cette fois dans les noyaux.

4.5 De la portée finie à la portée nulle

Dans cette section, nous explorons la limite de portée nulle des interactions de portée finie Gogny et M3Y. On a ainsi une démarche analogue à l'idée originale de Skyrme [7], c'est-à-dire effectuer un développement en gradients d'une interaction de portée finie. Il a été montré dans [112], au travers d'un développement de la matrice densité, qu'il est possible de convertir une interaction de portée finie en une fonctionnelle quasi-locale [118, 119]. Comme seules les ondes partielles jusqu'à $L=3$ sont nécessaires pour reproduire les équations d'état, ainsi que pour les interactions nucléon-nucléon elles-mêmes, nous nous limitons à un développement en gradients jusqu'à l'ordre 6, c'est-à-dire notre pseudo-potentiel Skyrme N3LO. Les équations d'états de ce potentiel sont données C.2.

¹. Écart sur l'équation d'état passée de 2 MeV à 3 MeV, 10 points pour les canaux (S,T) et 5 points pour les ondes partielles

Pour commencer, examinons la contrainte générale imposée par l'équation de continuité et l'invariance de jauge locale de N₃LO.

4.5.1 Invariance de jauge locale

Dans le contexte de ce manuscrit, on se place dans l'approximation de champ moyen. La fonction d'onde est donc un déterminant de Slater construit à partir des fonctions d'ondes individuelles des nucléons $\psi_i(\mathbf{r})$, où l'indice i correspond aux nombres quantiques du nucléon. Il s'agit des vecteurs propres du hamiltonien h inclut dans le champ moyen.

Dans une transformation de jauge locale générale, les fonctions d'ondes sont transformées comme :

$$\psi_i(\mathbf{r}) \rightarrow e^{-i\phi(\mathbf{r})} \psi_i(\mathbf{r}) , \quad (4.18)$$

où $\phi(\mathbf{r})$ est une fonction arbitraire réelle. La matrice densité $\langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle = \sum_i \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}')$ est ainsi transformée comme

$$\langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle \rightarrow e^{i(\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}'))} \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle \simeq \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle (1 - i\phi(\mathbf{r}') + i\phi(\mathbf{r})) .$$

La dernière équation est valide au premier ordre pour une transformation infinitésimale. L'invariance de jauge est imposée d'une manière différente sur la fonctionnelle de la densité d'énergie et sur le pseudo-potential [112, 113].

Considérons par exemple une fonctionnelle de la densité de Skyrme NLO. Celle-ci, nous le verrons au chapitre suivant, dépend de trois densités : la densité de particule ρ , la densité d'énergie cinétique τ et la densité de courant \mathbf{j} définies comme :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) , \quad (4.19)$$

$$\tau(\mathbf{r}) = \sum_i \nabla \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \cdot \nabla \psi_i(\mathbf{r}) , \quad (4.20)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2mi} \sum_i \left[\psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \psi_i(\mathbf{r}) - \nabla \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) \right] . \quad (4.21)$$

Il est facile de déduire que, sous une transformation de jauge, la densité d'énergie cinétique et de courant se transforment comme $\tau \rightarrow \tau + 2\mathbf{j}\nabla\phi + \rho(\nabla\phi)^2$ et $\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j} + \rho\nabla\phi$. Toute fonctionnelle de ce type devrait donc contenir une combinaison du type $\rho\tau - \mathbf{j}^2$ pour être invariante de jauge. Pour l'interaction de Skyrme NLO, cette invariance de jauge est en réalité équivalente à l'invariance galiléenne et est ainsi satisfaite [112]. Cela n'est toutefois plus vrai quand des termes en gradients d'ordre supérieur sont contenus dans le pseudo-potential [113]. L'invariance de jauge est plus contraignante et a été imposée afin de réduire le nombre de termes du pseudo-potential général pour un ordre donné du développement en gradients [112, 113, 120], et ainsi diminuer le nombre de paramètres. Le problème de l'invariance de jauge est en réalité lié au problème de l'équation de continuité [121].

L'équation de continuité établit la conservation du nombre de particules par une relation entre la variation temporelle de la densité de particule et la variation spatiale de la densité de courant :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho \rangle + \hbar \text{div} \langle \mathbf{j} \rangle = 0 . \quad (4.22)$$

Appliquons une transformation de jauge infinitésimale à la fonctionnelle de la densité de l'énergie :

$$\begin{aligned}
E[\rho] &\rightarrow E[\rho] + \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \frac{\delta E}{\delta \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle} \delta \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle \\
&\simeq E[\rho] + i \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}' | h | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \rho | \mathbf{r}' \rangle (-\phi(\mathbf{r}') + \phi(\mathbf{r})) \\
&= E[\rho] - i \int d^3\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | [h, \rho] | \mathbf{r} \rangle \phi(\mathbf{r}) \\
&= E[\rho] + \hbar \int d^3\mathbf{r} \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho \rangle \phi(\mathbf{r}) .
\end{aligned} \tag{4.23}$$

De la même manière, le terme dépendant de la densité d'énergie cinétique s'écrit :

$$\begin{aligned}
T &\rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \int d^3\mathbf{r} \nabla \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \psi_i(\mathbf{r}) \\
&= T - \hbar \int d^3\mathbf{r} \phi(\mathbf{r}) \nabla \langle \mathbf{j}(\mathbf{r}) \rangle .
\end{aligned} \tag{4.24}$$

Une comparaison entre les équations Eqs. (4.23) et (4.24) montre clairement que le pseudo-potentiel doit être invariant de jauge afin que l'équation de continuité Eq. (4.22) puisse être respectée. Cette invariance est automatiquement réalisée pour un potentiel local, et devient pertinente lorsque l'on regarde des pseudo-potentiels dépendants de gradients comme l'interaction de Skyrme et ses généralisations aux ordres supérieurs. Cette équation de continuité était satisfaite pour Skyrme N1LO [122]. Pour les ordres supérieurs, la situation est différente et l'invariance de jauge locale induit d'importantes contraintes sur les combinaisons pouvant apparaître dans le potentiel. La seule forme compatible pour Skyrme N3LO est celle donnée dans les équations (2.26) et (2.27) pour la partie centrale et la partie tenseur respectivement [58, 120]. Afin de voir comment ce pseudo-potentiel peut-être utile, nous allons maintenant examiner la limite de portée nulle des potentiels de portées finies Gogny et M3Y.

4.5.2 Interaction M3Y

Commençons par considérer le terme central de l'interaction M3Y. Dans l'espace des impulsions, il s'écrit :

$$v_N^C(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{n=1}^3 \left[t_n^{(SE)} P_{SE} + t_n^{(TE)} P_{TE} + t_n^{(SO)} P_{SO} + t_n^{(TO)} P_{TO} \right] \frac{1}{\mu_n^C (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 + (\mu_n^C)^3} . \tag{4.25}$$

Par un développement en impulsion, il devient alors

$$\begin{aligned}
v_N^C(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &\approx \sum_{n=1}^3 \frac{C_n}{(\mu_n^C)^3} - \frac{C_n}{(\mu_n^C)^5} [\mathbf{k}'^2 + \mathbf{k}^2 + 2\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}] \\
&+ \frac{C_n}{(\mu_n^C)^7} \left[(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)^2 + 4(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2 - 4(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2) \right] \\
&- \frac{C_n}{(\mu_n^C)^9} \left\{ (\mathbf{k}'^2 + \mathbf{k}^2) \left[(\mathbf{k}'^2 + \mathbf{k}^2)^2 + 12(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2 \right] - 2(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) \left[3(\mathbf{k}'^2 + \mathbf{k}^2)^2 + 4(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2 \right] \right\} \\
&+ \dots,
\end{aligned} \tag{4.26}$$

où nous avons défini les combinaisons de paramètres suivantes :

$$4C_n = (t_n^{(SE)} + t_n^{(SO)} + t_n^{(TE)} + t_n^{(TO)}) + (t_n^{(SE)} - t_n^{(SO)} - t_n^{(TE)} + t_n^{(TO)})P_\tau \\ + (-t_n^{(SE)} - t_n^{(SO)} + t_n^{(TE)} + t_n^{(TO)})P_\sigma + (-t_n^{(SE)} + t_n^{(SO)} - t_n^{(TE)} + t_n^{(TO)})P_\sigma P_\tau \quad (4.27)$$

On peut immédiatement reconnaître la forme du potentiel central de Skyrme N₃LO de l'équation (2.26). En raison de la présence de l'opérateur d'échange de l'isospin qui n'est pas présent dans l'interaction de Skyrme, nous ne pouvons pas relier directement les paramètres de l'interaction de Skyrme avec ceux de M₃Y. On peut néanmoins voir qu'il existe des relations entre les coefficients $t_1^{(n)}$ et $t_2^{(n)}$. Plus précisément, en comparant les dépendances en impulsion des équations (4.26) et (2.26), on remarque que l'équation 4.26 peut être vue comme un cas particulier de l'interaction Skyrme N₃LO quand $t_1^{(n)} = -t_2^{(n)}$, ... Les relations établies entre les paramètres peuvent être trouvées dans l'appendice C.3. Il est donc possible de dire que, en quelque sorte, N₃LO contient plus de degrés de libertés à cet ordre du développement, et que l'équation (4.26) est plus restrictive.

En réalité, il s'agit de quelque chose de général : toute interaction de portée finie conduit à un pseudo-potentiel du type N₃LO, où l'on peut établir ensuite des relations entre les coefficients. Cela peut-être vu dans le développement de Taylor d'une fonction scalaire $F(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$. Celui-ci s'écrit en effet :

$$F(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = A_0 + A_2(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 + A_4(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^4 + \dots \\ = A_0 + A_2 \left[\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2 - 2\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k} \right] \\ + A_4 \left[(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)^2 + 4(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})^2 - 4(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2) \right] + \dots \quad (4.28)$$

où on voit clairement apparaître la structure recherchée.

On peut appliquer la même stratégie au terme tenseur qui devient alors :

$$v_N^T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = - \sum_n [t_n^{TNE} P_{TE} + t_n^{TNO} P_{TO}] \frac{32\pi}{\mu_n^T} \frac{1}{[(\mu_n^T)^2 + (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2]^3} [T_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - T_o(\mathbf{k}, \mathbf{k}')]. \quad (4.29)$$

On obtient finalement :

$$v_N^T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx - \sum_n [(t_n^{TNE} + t_n^{TNO}) + (-t_n^{TNE} + t_n^{TNO})P_\tau + (t_n^{TNE} + t_n^{TNO})P_\sigma + (-t_n^{TNE} + t_n^{TNO})P_\sigma P_\tau] \\ \times \frac{8\pi}{(\mu_n^T)^7} \left\{ (T_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - T_o(\mathbf{k}, \mathbf{k}')) \right. \\ - \frac{3}{(\mu_n^T)^2} \left[(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)T_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'T_o(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right] \\ + \frac{3}{(\mu_n^T)^2} \left[(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)T_o(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'T_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right] \\ + \frac{6}{(\mu_n^T)^4} \left[\left(\frac{1}{4}(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)^2 + \frac{1}{8}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')^2 \right) T_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + 2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)T_o(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right] \\ - \frac{6}{(\mu_n^T)^4} \left[\left(\frac{1}{4}(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)^2 + \frac{1}{8}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')^2 \right) T_o(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + 2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)T_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right] \\ \left. + \dots \right\}. \quad (4.30)$$

Comme pour le terme central, il est possible de voir que ce développement à la même structure que le pseudo-potentiel de Skyrme N₃LO. Un comparaison directe de l'équation ci-dessus avec l'équation (2.27) montre encore une fois que les paramètres de Skyrme N₃LO déduits de ce développement ne sont à nouveau pas indépendants.

Considérons enfin le terme de spin-orbite. Son expression dans l'espace des impulsions est

$$v_N^{SO}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 8\pi i \sum_{n=1}^2 [t_n^{LSE} P_{TE} + t_n^{LSO} P_{TO}] (\mathbf{k} \times \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2) \frac{1}{\mu_n^{SO} [(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 + (\mu_n^{SO})^2]} \cdot \quad (4.31)$$

Au deuxième ordre du développement de Taylor, il devient

$$\begin{aligned} v_N^{SO}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx & \frac{2\pi i}{(\mu_n^{SO})^5} \sum_{n=1}^2 [(t_n^{LNE} + t_n^{LNO}) + (t_n^{LNO} - t_n^{LNE})P_\tau + (t_n^{LNE} + t_n^{LNO})P_\sigma \\ & + (t_n^{LNO} - t_n^{LNE})P_\sigma P_\tau] (\mathbf{k} \times \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2) \\ & \left[1 - \frac{2}{(\mu_n^{SO})^2} (\mathbf{k}'^2 + \mathbf{k}^2 - 2\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) + \dots \right] \end{aligned} \quad (4.32)$$

Un tel développement a déjà été considérée dans l'article [112, 113]. Les auteurs y ont montré que les termes tels que $(\mathbf{k}'^2 + \mathbf{k}^2) [(\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)]$ or $\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k} [(\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)]$ n'étaient pas invariants de jauge (individuellement ou combinés avec d'autres). Cela est vrai également pour les termes d'ordres supérieurs. Le seul terme de spin-orbite invariant de jauge est en réalité le terme $(\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)$ qui correspond au terme de portée nulle. Celui-ci a la même forme que le terme de Skyrme NLO [123]. Dans la référence [58], les auteurs ont montrés une relation univoque entre l'invariance de jauge locale et l'équation de continuité de l'équation (4.22)

Comme le développement en impulsion de l'expression Eq. (4.32) contient des termes qui violent l'invariance de jauge, on peut affirmer que le spin-orbite de portée finie ne respecte pas l'équation de continuité. Celle-ci n'est en effet compatible qu'avec un spin-orbite de portée nulle. Bien entendu, même si un tel terme semble interdit, la question de sa validité d'un point de vue purement phénoménologique reste ouverte car aucune étude n'indique que l'équation de continuité n'est pas respectée dans ce cadre.

4.5.3 Interaction de Gogny

Nous étudions maintenant le développement en impulsion de l'interaction de Gogny. Dans l'espace des impulsions, les termes central et tenseur s'écrivent :

$$v_G^C(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{n=1}^2 \left[W^n + B^{(n)} P_\sigma - H^{(n)} P_\tau - M^{(n)} P_\sigma P_\tau \right] \pi^{3/2} (\mu_n^C)^3 e^{-(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2/4(\mu_n^C)^2}, \quad (4.33)$$

et

$$v_G^T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\pi^{3/2} (\mu^T)^7}{4} (V_{T1} + V_{T2} P_\tau) e^{-(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2/4(\mu^T)^2} [T_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - T_o(\mathbf{k}, \mathbf{k}')]. \quad (4.34)$$

En développant le facteur de forme $e^{-(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2/4\mu^2}$ avec l'Eq. (4.28), on obtient la même conclusion que pour les interactions M₃Y : une structure de type N₃LO où l'on peut déduire les paramètres de Skyrme N₃LO en fonction de ceux de l'interaction de Gogny. Ces relations sont explicitées dans l'appendice C.3.

4.5.4 Conclusion sur le lien entre portée finie et portée nulle

Nous avons montré dans cette section que le pseudo-potential de Skyrme N₂LO est en réalité le cas limite de toutes les interactions centrales et tenseurs de portées finies. Il nous faut maintenant comprendre dans quelle mesure cette limite est valable, à savoir à quel point celle-ci préserve les principales propriétés de l'interaction originale. Une première indication peut-être extraite de la figure 4.8 où l'on a pu voir que les contributions au-delà de $L = 3$ à l'équation d'état globale sont très petites. On peut également aller un peu plus loin en considérant les équations qui donnent, pour Skyrme N₃LO, le contenu de chacun des canaux (S,T) en fonction des ondes partielles :

$$\mathcal{V}^{(0,0)} = \mathcal{V}^{(1P_1)} + \mathcal{V}^{(1F_3)}, \quad (4.35)$$

$$\mathcal{V}^{(0,1)} = \mathcal{V}^{(1S_0)} + \mathcal{V}^{(1D_2)}, \quad (4.36)$$

$$\mathcal{V}^{(1,0)} = \mathcal{V}^{(3S_1)} + \mathcal{V}^{(3D_1)} + \mathcal{V}^{(3D_2)} + \mathcal{V}^{(3D_3)}, \quad (4.37)$$

$$\mathcal{V}^{(1,1)} = \mathcal{V}^{(3P_0)} + \mathcal{V}^{(3P_1)} + \mathcal{V}^{(3P_2)} + \mathcal{V}^{(3F_2)} + \mathcal{V}^{(3F_3)} + \mathcal{V}^{(3F_4)}. \quad (4.38)$$

Ces équations ne sont plus vérifiées pour des interactions de portée finies car les canaux (S, T) de celles-ci sont construits par une infinité de contributions différentes. On a pu toutefois vérifier que les contributions venant d'ondes partielles avec $L > 3$ ne contribuent pas de manière significative dans les canaux (S, T).

Sur la figure 4.20, on compare les résultats venant des canaux (S, T) en considérant toutes les ondes partielles d'une part, et en considérant les ondes partielles jusqu'à $L = 3$ présentes dans les équations (4.35-4.38) d'autre part. On observe que les propriétés de l'équation d'état sont très bien reproduites jusqu'à la densité de saturation, simplement en considérant des ondes partielles où $L \leq 3$. Cela signifie que le développement à l'ordre 6 d'un potentiel à portée finie constitue une bonne approximation de n'importe quel potentiel à portée finie. On peut donc affirmer que le pseudo-potential de Skyrme N₃LO, sous-entendu avec tous ses paramètres libres, contient assez de degrés de liberté pour être un excellent substitut quantitatif à une interaction de portée finie utilisée dans les calculs de structure nucléaire. On peut voir sur la figure précédente que le facteur de forme de Gogny D₁S ne reçoit presque aucune contribution des ondes partielles où $L \geq 3$ sur un grand intervalle de densité. Cela n'est néanmoins pas vrai systématiquement, comme le montrent les figures 4.17-4.18 pour une interaction avec une troisième gaussienne et un terme tenseur. On constate néanmoins que l'accord est toujours vérifié jusqu'à la densité de saturation. Sur la figure 4.20, nous avons une illustration de la convergence plus lente du facteur de forme de Yukawa, où l'on voit que les ondes partielles d'ordres supérieurs jouent toujours un rôle au-delà de $\rho \approx 0.2 \text{ fm}^{-3}$, en particulier dans le canal ($S = T = 1$).

Nous avons vu dans ce chapitre une méthode générale pour établir un lien entre Skyrme N₃LO et n'importe quel potentiel de portée finie. La conclusion de cette étude est que Skyrme N₃LO contient assez de physique pour remplacer n'importe quel potentiel de portée finie dans un contexte Hartree-Fock, tout particulièrement jusqu'à la densité de saturation, qui est la région qui nous intéresse pour les calculs dans les noyaux. C'est cette direction qu'empruntera le chapitre suivant, en montrant le développement de l'interaction Skyrme N₂LO pour son application dans le calcul de noyaux.

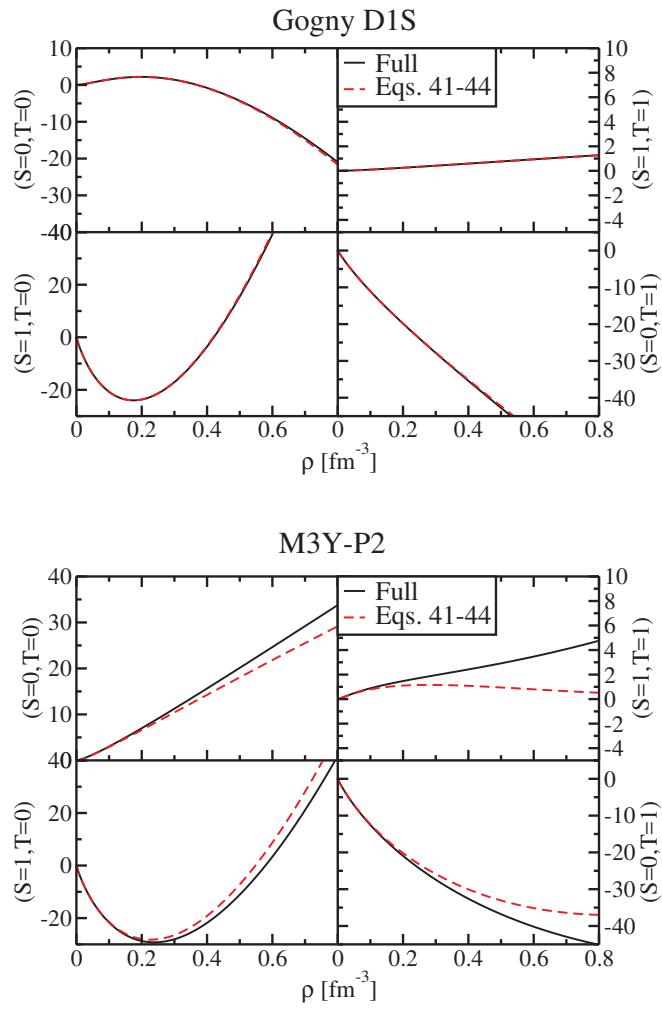


Figure 4.20 – Canaux (S, T) de l'équation d'état, en MeV, obtenus avec l'interaction D1S de Gogny (haut) et l'interaction M3Y-P2 interaction (bas).

5

Utilisation de Skyrme N₂LO dans le cadre du champ moyen en symétrie sphérique

Dans le précédent chapitre, nous avons montré que le pseudo-potentiel de Skyrme étendu à l'ordre 3 en gradients (N₃LO) permettait de reproduire certaines propriétés de la matière nucléaire infinie obtenues par des calculs *ab-initio* comme les deux interactions de portées finies auxquels nous l'avons comparé. Les résultats encourageant nous ont poussé à développer notre interaction pour permettre des calculs de noyaux, sous l'hypothèse de la symétrie sphérique dans un premier temps, à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité d'énergie, comme c'est historiquement le cas pour la force de Skyrme [8].

Comme nous l'avons vu, Skyrme N₂LO permettait déjà une bonne reproduction des différentes propriétés de la matière infinie, nous avons donc décidé de nous limiter à l'ordre 4 en gradients pour l'application dans les noyaux. Nous allons tout d'abord introduire le formalisme utilisé dans ce chapitre, avant d'explicitier l'équation différentielle qu'il est nécessaire de résoudre et la méthode que nous avons utilisée pour le faire. Enfin, l'étude du comportement de l'équation différentielle autour de l'origine et le travail préliminaire sur le développement de Skyrme N₃LO pour les noyaux seront abordés dans la dernière partie. Le potentiel utilisé dans tout ce chapitre correspond aux deux premières lignes de l'Eq. (2.26). Les différents termes tenseur de Skyrme NLO, N₂LO et N₃LO ne sont pas non plus pris en compte. Une partie de ce chapitre a fait l'objet d'une publication ??.

5.1 Introduction

Dans le chapitre 1, nous sommes partis d'un hamiltonien à N corps (Eq.2.1), et nous avons fait le choix de nous limiter aux termes à un et deux corps. Notre hamiltonien microscopique s'écrit donc pour l'instant :

$$H = \sum_{i=1}^A \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^A v_{Sk_{ij}}, \quad (5.1)$$

où m est la masse d'un nucléon. L'un des ingrédients de choix pour décrire correctement les noyaux le long de la charte nucléaire est l'utilisation d'une méthode Hartree-Fock. Celle-ci permet de passer d'un potentiel à deux corps comme le pseudo-potential de Skyrme à un potentiel à un corps, qui est l'un des ingrédients nécessaires pour l'approximation de champ moyen.

Justification de l'utilisation du champ-moyen Cette approximation, postulant que les nucléons évoluent dans le noyau avec pour seule influence un potentiel commun créé collectivement, est motivée par des faits expérimentaux :

- le succès du modèle en couches, en particulier la stabilité des noyaux possédant des nombres de protons ou neutrons dits magiques.
- le libre parcours moyen d'un nucléon dans le milieu nucléaire : un nucléon avec une énergie cinétique de 10 MeV parcourt approximativement 15 fm [124], une distance grande comparée à la taille de la plupart des noyaux¹. Ce phénomène est lié au principe de Pauli. Les états possibles sont souvent en effet déjà occupés, ce qui limite les probabilités de collisions entre nucléons. Le nucléon aura davantage tendance à entrer en collision avec la "paroi" externe du noyau qu'avec d'autres nucléons. Pour cette raison, on peut avoir l'image d'un nucléon évoluant dans un potentiel moyen le ramenant en moyenne vers l'intérieur du noyau.

De cette approximation découle un hamiltonien qui sera la somme des hamiltoniens à un corps de chacun des nucléons² :

$$H = \sum_i^A h_i \quad (5.2)$$

Obtention de l'équation Hartree-Fock Dans la mesure où les particules se déplacent indépendamment, on considère que la fonction d'onde $|\Phi_{HF}\rangle$ de notre système s'écrit comme un déterminant de Slater :

$$|\Phi_{HF}\rangle = |\Psi_1\rangle |\Psi_2\rangle \dots |\Psi_A\rangle. \quad (5.3)$$

Ces fonctions d'ondes nous permettent de calculer l'énergie totale du système,

$$E_{HF} = \frac{\langle \Phi_{HF} | H | \Phi_{HF} \rangle}{\langle \Phi_{HF} | \Phi_{HF} \rangle}. \quad (5.4)$$

Les vecteurs propres des hamiltoniens à un corps de l'Eq. (5.2), correspondant aux énergies de particules

1. 15 fm correspond à un diamètre d'un noyau de 250 nucléons environ.

2. Il s'agit d'une approche simplifiée. Schématiquement, on néglige ici les corrélations entre nucléons provenant des termes dépendant de la densité. Pour cette raison, il faudra traiter ces termes dans l'équation 5.121

individuelles, peuvent être obtenus en minimisant l'énergie totale E_{HF} du noyau, à l'aide d'un principe variationnel. On aboutit finalement aux équations Hartree-Fock :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + U_{HF}[\Psi_{HF}] \right) \Psi_i = \epsilon_i \Psi_i \quad , i = 1, \dots, A. \quad (5.5)$$

Ces équations correspondent à un système de A équations de Schrödinger couplées, avec U_{HF} le champ moyen dans lequel baignent les nucléons. Ce champ est calculé à partir de toutes les fonctions d'ondes du système, y compris celle du nucléon dont il faut résoudre l'équation. Il s'agit donc d'une méthode itérative auto-cohérente. Nous détaillerons le processus aboutissant à ces équations pour Skyrme N2LO dans les sections suivantes. L'objectif de ce chapitre est d'expliquer comment nous avons obtenu puis utilisé cet hamiltonien pour Skyrme N2LO.

Limites de la méthode Hartree-Fock L'approximation de Hartree-Fock ne permet d'obtenir une valeur de l'énergie et une fonction d'onde Φ de l'état fondamental des noyaux que dans le cas des noyaux magiques. En effet, dans les noyaux non magiques, l'écart entre le dernier état individuel occupé et les premiers états excités est souvent plus petit que l'énergie résiduelle entre deux nucléons une fois le champ moyen pris en compte. La description des noyaux avec $N=Z$ est également plus difficile que les noyaux où $N \neq Z$. Nous verrons, dans la section 5.4 qu'il est possible de décrire plus précisément les états excités en prenant en compte l'appariement entre les nucléons.

5.2 Fonctionnelle de Skyrme N2LO

La fonctionnelle de la densité de l'énergie de Skyrme N2LO s'obtient en calculant l'énergie moyenne du hamiltonien comprenant l'interaction de Skyrme N2LO (Eq.(5.1) :

$$E_{Sk}[\Phi] = \frac{\langle \Phi_{HF} | H_{Sk} | \Phi_{HF} \rangle}{\langle \Phi_{HF} | \Phi_{HF} \rangle} = \int d\mathbf{r} \mathcal{E}_{Sk}(\mathbf{r}), \quad (5.6)$$

On appelle $E_{Sk}[\Phi]$ la fonctionnelle de la densité d'énergie car celle-ci dépend de densités construites à partir des fonctions d'onde présentes dans Φ . $\mathcal{E}_{Sk}(\mathbf{r})$ correspond à la densité d'énergie.

Contribution de Skyrme NLO à la densité d'énergie $\mathcal{E}_{Sk}(\mathbf{r})$. La première contribution à la densité d'énergie est celle de l'énergie cinétique :

$$\epsilon_{kin} = \frac{\hbar^2}{2m} \int dr \tau_0(r). \quad (5.7)$$

La densité $\tau(r)$ est une densité standard de Skyrme NLO qui sera présentée dans la section suivante, m est la masse du nucléon. Il est usuel de séparer les contributions à la fonctionnelle en deux parties, notées respectivement "*even*" (paire) et "*odd*" (impaire). La première correspond aux termes qui sont paires par renversement du temps, tandis que la seconde est celle contenant les termes impairs par renversement du temps.

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{N1LO} &= \mathcal{E}^{(N1LO),even} + \mathcal{E}^{(N1LO),odd} \\ &= \mathcal{E}_0^{(N1LO),even} + \mathcal{E}_1^{(N1LO),even} + \mathcal{E}_0^{(N1LO),odd} + \mathcal{E}_1^{(N1LO),odd}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Cette séparation s'explique par l'habitude de commencer les calculs dans les noyaux par les noyaux ma-

giques, qui sont tous sphériques et donc plus simples à calculer. Or, la sphéricité du noyau implique l'invariance par renversement du temps, et la partie "odd" de la fonctionnelle est alors nulle.

Les expressions complètes de ces deux contributions sont :

$$\mathcal{E}_t^{\text{N1LO,even}} = C_t^\rho [\rho_0] \rho_t^2 + C_t^{\Delta\rho} \rho_t \Delta\rho_t + C_t^\tau \rho_t \tau_t - C_t^T \sum_{\mu,\nu=x}^z J_{\mu\nu_t} J_{\mu\nu_t} + C_t^{\nabla J} \rho_t \nabla \cdot \mathbf{J}_t \quad , \quad (5.9)$$

$$\mathcal{E}_t^{\text{N1LO,odd}} = C_t^s [\rho_0] \mathbf{s}_t^2 - C_t^\tau \mathbf{j}_t^2 + C_t^{\Delta s} \mathbf{s}_t \cdot \Delta \mathbf{s}_t + C_t^T \mathbf{s}_t \cdot \mathbf{T}_t + C_t^{\nabla J} \mathbf{s}_t \cdot \nabla \times \mathbf{j}_t \quad , \quad (5.10)$$

Les termes tels que C_t^ρ , $C_t^{\Delta\rho}$, ... sont appelés constantes de couplage et correspondent dans notre cas à des combinaisons linéaires des paramètres présents dans Skyrme NLO. Les expressions complètes de ces constantes de couplage peuvent être trouvées dans l'appendice D.1. Dans le cas général, il est possible d'ajuster une interaction directement à partir des constantes de couplage de la fonctionnelle. On perd alors le lien avec les paramètres, mais les constantes de couplages sont toutes indépendantes. Il est également possible de construire une fonctionnelle qui ne dérive pas d'une interaction. C'est le cas de l'interaction BCPM de la section 3.5. Les constantes de couplages sont alors également indépendantes entre elles. L'indice t peut prendre les valeurs 0 ou 1, et représente les constantes de couplages respectivement associées aux densités isoscalaires et isovectorielles, définies dans le paragraphe suivant.

Densités intervenant dans Skyrme NLO La dépendance de la densité d'énergie en Φ se fait *via* des densités qui apparaissent dans les équations (5.9) et (5.10). Celles-ci sont définies ci-dessous. Les dérivées sans prime agissent sur la fonction d'onde, les dérivées avec prime agissent sur la fonction d'onde conjuguée.

Il faut au préalable définir la matrice densité dans l'espace r, comme défini dans [125],

$$\rho_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') = \frac{1}{2} \rho_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{1}{2} \mathbf{s}_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \sigma' | \hat{\sigma} | \sigma \rangle \quad , \quad (5.11)$$

où l'on a :

$$\rho_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\sigma} \rho_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') \quad (5.12)$$

$$\mathbf{s}_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\sigma\sigma'} \rho_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') \langle \sigma' | \hat{\sigma} | \sigma \rangle. \quad (5.13)$$

Les densités qui interviennent dans la partie invariante par renversement du temps sont :

- la densité (scalaire) de matière $\rho_q(\mathbf{r})$:

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \sum_{i\sigma} |\psi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2 \quad (5.14)$$

- la densité (scalaire) cinétique $\tau_q(\mathbf{r})$:

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_{i\sigma} |\nabla \psi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2 \quad (5.15)$$

- la densité (pseudo-tensorielle) de spin-orbite $J_{q,\mu\nu}(\mathbf{r})$:

$$J_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} (\nabla_\mu - \nabla'_\mu) s_{q,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \quad (5.16)$$

On donne également à titre indicatif les densités impaires par renversement du temps :

- la densité de spin (pseudo-vectorielle) $\mathbf{s}_q(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{s}_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \sum_{\sigma\sigma'} \rho_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') \langle \sigma' | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \sigma \rangle \quad . \quad (5.17)$$

- la densité de courant (vectorielle) $\mathbf{j}_q(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{j}_{q,\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} (\nabla_\mu - \nabla'_\mu) \rho_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \quad (5.18)$$

- la densité (pseudo-vectorielle) cinétique de spin $\mathbf{T}_q(\mathbf{r})$:

$$T_{q,\mu}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \nabla' s_{q,\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \quad (5.19)$$

- la densité cinétique tensorielle de spin (pseudo-vectorielle) $\mathbf{F}_q(\mathbf{r})$

$$\mathbf{F}_{q,\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (\nabla_\mu \nabla'_\nu + \nabla'_\mu \nabla_\nu) s_{q,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \quad (5.20)$$

La sommation de ces densités se fait sur les états occupés. L'indice q indique que ces densités peuvent être calculées pour les protons (q=p) et pour les neutrons (q=n). On notera la densité avec un indice o pour la densité isoscalaire, c'est-à-dire que $\rho_0 = \rho_p + \rho_n$ tandis que la densité isovectorielle sera notée avec un indice 1 avec $\rho_1 = \rho_n - \rho_p$.

Contribution de Skyrme N2LO à la densité d'énergie $\mathcal{E}_{Sk}(\mathbf{r})$ On définit à nouveau la densité d'énergie de Skyrme N2LO comme la somme d'une partie paire et impaire par renversement du temps :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{(N2LO)} &= \mathcal{E}^{(N2LO),\text{even}} + \mathcal{E}^{(N2LO),\text{odd}} \quad , \\ &= \mathcal{E}_0^{(N2LO),\text{even}} + \mathcal{E}_1^{(N2LO),\text{even}} + \mathcal{E}_0^{(N2LO),\text{odd}} + \mathcal{E}_1^{(N2LO),\text{odd}} \end{aligned} \quad (5.21)$$

Les expressions de ces densités d'énergies sont :

$$\mathcal{E}_t^{(4),\text{even}} = C_t^{(4)\Delta\rho} (\Delta\rho_t)^2 + C_t^{(4)M\rho} \mathbb{M}_t^{\text{even}}[\rho_t] + C_t^{(4)Ms} \mathbb{M}_t^{\text{even}}[\mathbf{s}_t] \quad , \quad (5.22)$$

$$\mathcal{E}_t^{(4),\text{odd}} = C_t^{(4)\Delta s} (\Delta\mathbf{s}_t)^2 + C_t^{(4)M\rho} \mathbb{M}_t^{\text{odd}}[\rho_t] + C_t^{(4)Ms} \mathbb{M}_t^{\text{odd}}[\mathbf{s}_t] \quad . \quad (5.23)$$

Nous explicitons ici les expressions des \mathbb{M} en omettant l'indice t pour plus de clarté :

$$\begin{aligned} \mathbb{M}^{\text{even}}[\rho] &= \{ \rho Q + \tau^2 \} \\ &\quad + 2 [\text{Re}(\tau_{\mu\nu})\text{Re}(\tau_{\mu\nu}) - \text{Re}(\tau_{\mu\nu})\nabla_\mu\nabla_\nu\rho] \quad , \end{aligned} \quad (5.24a)$$

$$\mathbb{M}^{\text{even}}[\mathbf{s}] = \left\{ -(\nabla_\mu J_{\mu\nu})^2 - 4J_{\mu\nu}V_{\mu\nu} - \text{Im}(K_{\mu\nu\kappa})\text{Im}(K_{\mu\nu\kappa}) \right\} \quad , \quad (5.24b)$$

$$\mathbb{M}^{\text{odd}}[\rho] = \left\{ (\nabla \cdot \mathbf{j})^2 + 4\mathbf{j} \cdot \mathbf{\Pi} - \text{Im}(\tau_{\mu\nu})\text{Im}(\tau_{\mu\nu}) \right\} \quad , \quad (5.24c)$$

$$\begin{aligned} \mathbb{M}^{\text{odd}}[\mathbf{s}] &= \{ \mathbf{s} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{T}^2 \} \\ &\quad + 2 [\text{Re}(K_{\mu\nu\kappa})\text{Re}(K_{\mu\nu\kappa}) - \text{Re}(K_{\mu\nu\kappa})\nabla_\mu\nabla_\nu s_\kappa] . \end{aligned} \quad (5.24d)$$

En gardant uniquement la partie paire de la fonctionnelle et en remplaçant les \mathbb{M} , la fonctionnelle de la densité de Skyrme avec onde D est donc :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{(4),\text{even}} &= C_0^{(4)\Delta\rho} (\Delta\rho_0)^2 + C_1^{(4)\Delta\rho} (\Delta\rho_1)^2 \\ &\quad + C_0^{(4)M\rho} \left\{ [\rho_0 Q_0 + \tau_0^2] \right\} \\ &\quad + 2C_0^{(4)M\rho} \left\{ [\text{Re}(\tau_{0,\mu\nu})\text{Re}(\tau_{0,\mu\nu}) - \text{Re}(\tau_{0,\mu\nu})\nabla_\mu\nabla_\nu\rho_0] \right\} \\ &\quad + C_1^{(4)M\rho} \left\{ [\rho_1 Q_1 + \tau_1^2] \right\} \\ &\quad + 2C_1^{(4)M\rho} \left\{ [\text{Re}(\tau_{1,\mu\nu})\text{Re}(\tau_{1,\mu\nu}) - \text{Re}(\tau_{1,\mu\nu})\nabla_\mu\nabla_\nu\rho_1] \right\} \\ &\quad - C_0^{(4)Ms} \left[(\nabla_\mu J_{0,\mu\nu})^2 + 4J_{0,\mu\nu}V_{0,\mu\nu} - \text{Im}(K_{0,\mu\nu\kappa})\text{Im}(K_{0,\mu\nu\kappa}) \right] \\ &\quad - C_1^{(4)Ms} \left[(\nabla_\mu J_{1,\mu\nu})^2 + 4J_{1,\mu\nu}V_{1,\mu\nu} - \text{Im}(K_{1,\mu\nu\kappa})\text{Im}(K_{1,\mu\nu\kappa}) \right] \end{aligned} \quad (5.25)$$

Les nouvelles densités paires par renversement du temps apparaissant avec Skyrme N2LO sont :

- la densité $V_{q,\mu\nu}(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} V_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}) &= \nabla \cdot \nabla' J_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\ &= (\nabla_\mu - \nabla'_\mu)(\nabla \cdot \nabla')\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sigma_\nu \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \end{aligned} \quad (5.26)$$

- la densité (scalaire) $Q_q(\mathbf{r})$:

$$Q_q(\mathbf{r}) = \Delta \Delta' \rho_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \quad (5.27)$$

De la même manière, dans la partie impaire par renversement du temps, les nouvelles densités apparaissant sont :

- la densité $\Pi_{q,\mu}(\mathbf{r})$

$$\Pi_{q,\mu}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \nabla' j_{q,\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (5.28)$$

o la densité $S_{q,\mu}(\mathbf{r})$

$$S_{q,\mu}(\mathbf{r}) = \Delta \Delta' s_{q,\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \quad (5.29)$$

Dans les expressions précédentes, les densités $J_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, $j_{q,\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ et $\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ correspondent aux densités locales définies précédemment pour Skyrme NLO, mais pour lesquelles on a pas encore appliqué la règle $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$.

Contribution de Skyrme N2LO à la densité d'énergie $\mathcal{E}_{Sk}(\mathbf{r})$: cas particulier des densités mixtes.

Toutes les densités précédentes sont soit des densités paires, soit des densités impaires par renversement du temps. Pour Skyrme N2LO, deux densités doivent être décomposées en une partie réelle et une partie imaginaire, car celles-ci sont mixtes et n'ont pas un comportement bien défini par renversement du temps :

— la densité $\tau_{q,\mu\nu}$

$$\tau_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}) = \nabla_\mu \nabla'_\nu \rho_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \quad (5.30)$$

— la densité $K_{q,\mu\nu\kappa}(\mathbf{r})$

$$K_{q,\mu\nu\kappa}(\mathbf{r}) = \nabla_\mu \nabla'_\nu s_{q,\kappa}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \quad (5.31)$$

Comme il est possible de le voir dans les équations (5.24d) et (5.24b), seules la partie réelle de la densité $\tau_{q,\mu\nu}(\mathbf{r})$ et la partie imaginaire de $K_{q,\mu\nu\kappa}(\mathbf{r})$ sont paires par renversement du temps.

La densité d'énergie est tout à fait générale pour le moment, et permet de calculer la fonctionnelle quelque soit l'espace dans lequel on souhaite effectuer les calculs. Les formules des densités ont déjà été simplifiées, dans la mesure où l'on a directement considéré les versions locales de ces densités. De plus, celles-ci ont été directement exprimées en fonction de \mathbf{r} , dans la mesure où nous souhaitons obtenir l'équation du champ-moyen en symétrie sphérique. C'est ce que nous allons voir maintenant.

5.3 Equation du champ-moyen de Skyrme N2LO

Les équations du champ moyen pour les états de particules individuelles neutrons et protons sont obtenues à partir de techniques de variation de la fonctionnelle. On obtient à la fin du processus une équation de Schrödinger du type :

$$\hat{h}_q(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) . \quad (5.32)$$

En symétrie sphérique, la fonction d'onde $\psi_i(\mathbf{r})$ peut être écrite comme ci-dessous :

$$\psi_{n\ell jm_q}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} R_{n\ell j_q}(r) \Omega_{\ell jm}(\hat{r}) \quad , \quad (5.33)$$

c'est-à-dire décomposable en une partie radiale et une partie angulaire. \hat{r} correspond ainsi à l'angle solide de la fonction d'onde.

Cette fonction d'onde de particule individuelle est caractérisée par le nombre quantique principal n , le moment orbital ℓ , sa projection selon z , m_ℓ , le moment angulaire total j ainsi que la projection d'isospin q .

La première étape du calcul a été de déterminer les densités calculées avec des fonctions d'onde sphériques telles que dans l'Eq. (5.33). Les densités dans les sous-sections qui suivent ont été obtenues en utilisant les fonctions d'ondes de SLy4 après convergence avec une précision de 10^{-12} sur l'énergie de liaison. Elles peuvent ainsi être calculées dans un programme numérique calculant Skyrme NLO en symétrie sphérique.

5.3.1 Densités de Skyrme NLO en symétrie sphérique

En symétrie sphérique, les densités s'expriment en fonction de $R_{n\ell jq}(r)$, ou de manière équivalente $u_\alpha = R_{n\ell jq}(r)/r$. Pour les densités apparaissant à partir de Skyrme N2LO, nous avons fait le choix de laisser les deux formes, fournissant ainsi une étape intermédiaire du calcul. Les densités intervenant dans la partie impaire par renversement du temps de la fonctionnelle ne sont pas présentées ici car elles sont nulles en symétrie sphérique.

La densité de matière a pour expression :

$$\rho_0(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi} \frac{R_{\alpha}^2}{r^2} \quad (5.34)$$

Son calcul est détaillé dans l'annexe D.2 et permet de voir concrètement comment partir de l'Eq.(5.14) pour arriver à l'expression en symétrie sphérique. La sommation sur α se fait ici sur les nombres quantiques de la fonction d'onde (n, ℓ, j, q). Si l'on souhaite obtenir uniquement la densité de protons ou de neutrons, il suffit de ne pas sommer sur q . Cette sommation est toutefois uniquement effectuée sur les états occupés.

La densité τ intervenant dans l'énergie cinétique devient :

$$\tau_0(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r^2} \left[\left(R'_{\alpha} - \frac{R_{\alpha}}{r} \right)^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_{\alpha}^2 \right] \quad (5.35)$$

Ce terme se décompose en une partie radiale et une partie centrifuge, que l'on notera dans la suite de ce manuscrit τ_R et τ_C , tels que :

$$\tau_{0,R}(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r^2} \left(R'_{\alpha} - \frac{R_{\alpha}}{r} \right)^2, \quad (5.36)$$

$$\tau_{0,C}(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r^2} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_{\alpha}^2, \quad (5.37)$$

La dernière densité intervenant dans la fonctionnelle paire est la densité $J_{\mu\nu}$. Dans sa forme la plus générale, $J_{\mu\nu}$, cette densité est un tenseur de rang 2, dont seule la contribution d'ordre 1 n'est pas nulle en symétrie sphérique :

$$J_{0,\mu\nu} = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\kappa} J_{\kappa} = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\kappa} \frac{X_{\kappa}}{r} J_0(r), \quad (5.38)$$

où X_{μ} correspond à une coordonnée cartésienne. On adoptera, dans cette formule et dans les suivantes, la convention d'Einstein pour la sommation d'indices afin d'alléger les expressions. Dans ce cas, la répétition de l'indice κ indique donc une sommation sur les coordonnées cartésiennes. La partie radiale, qui est celle

représentée sur les graphiques, s'écrit :

$$J_0(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r} \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right] \frac{R_{\alpha}^2}{r^2}, \quad (5.39)$$

Le détail des calculs pour cette densité peut-être trouvé dans l'article [8]. Cette densité est appelée densité de spin-orbite pour deux raisons :

- elle possède un coefficient $[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}]$ directement issu d'un opérateur $\hat{\ell} \cdot \hat{\sigma}$.
- elle intervient dans la partie de la fonctionnelle issue de terme spin-orbite de Skyrme

Il est possible d'observer ces trois densités calculées pour cinq noyaux sphériques de masses différentes sur les figures 5.1, 5.2 et 5.3.

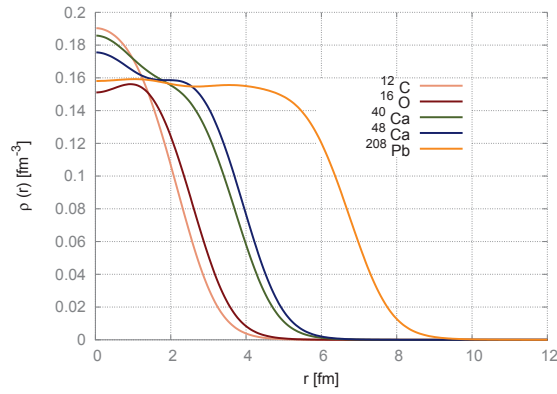


Figure 5.1 – Densité $\rho_0(r)$

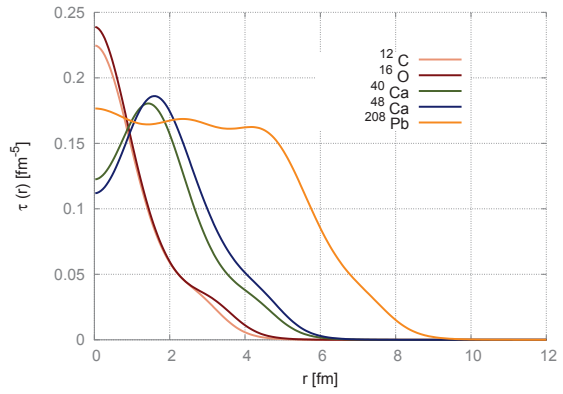


Figure 5.2 – Densité $\tau_0(r)$

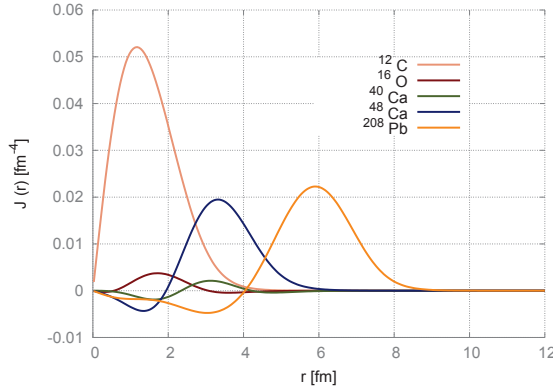


Figure 5.3 – Densité $J_0(r)$

5.3.2 Nouvelles densités de N2LO en symétrie sphérique

Nous allons maintenant donner les expressions des densités qui apparaissent avec Skyrme N2LO.

Densité $\tau_{0,\mu\nu}(\mathbf{r})$ La première constatation que l'on peut faire à partir de l'équation (5.25) est l'appari- tion, avec les gradients jusqu'à l'ordre 4, des dérivées de la densité de particule $\rho(r)$ jusqu'à l'ordre 2 dans la

fonctionnelle, ainsi que la dérivée de la densité $J(r)$. Celles-ci sont calculées numériquement, et leurs formes analytiques ne seront donc pas présentées dans cette section.

La densité $\tau_{0,\mu\nu}$ fait intervenir la partie radiale Eq. (5.35) et la partie centrifuge Eq. (5.37) de la densité NLO $\tau(r)$:

$$\tau_{0,\mu\nu}(r) = \frac{1}{2} \tau_{0,C} \delta_{\mu\nu} + \frac{X_\mu X_\nu}{r^2} \left[\tau_{0,R} - \frac{1}{2} \tau_{0,C} \right] \quad . \quad (5.40)$$

X_μ et X_ν représentent des coordonnées cartésiennes. On peut remarquer que la trace de cette densité est la densité τ ,

$$\sum_{\mu} \tau_{0,\mu\mu}(r) = \tau. \quad (5.41)$$

Les densités $\tau_R(r)$ et $\tau_C(r)$ sont représentées sur les figures 5.5 et 5.4.

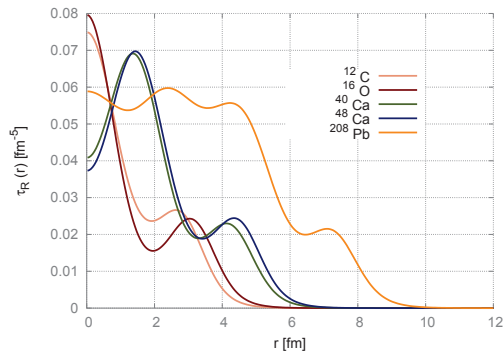


Figure 5.4 – Densité $\tau_{0,R}(r)$

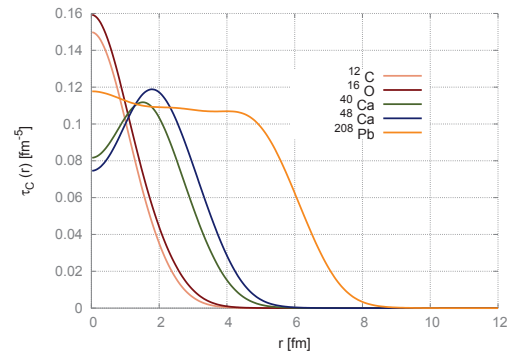


Figure 5.5 – Densité $\tau_{0,C}(r)$

Les contributions associées à cette densité dans la fonctionnelle s'écrivent explicitement comme :

$$\tau_{0,\mu\nu} \tau_{0,\mu\nu} = \tau_{0,R}^2 + \frac{1}{2} \tau_{0,C}^2 \quad (5.42)$$

$$\tau_{0,\mu\nu} \nabla_\mu \nabla_\nu \rho_0 = \rho_0'' \tau_{0,R} + \frac{\rho_0'}{r} \tau_{0,C} \quad (5.43)$$

Rappelons également que dans la suite nous identifierons $\tau_{\mu\nu}$ à sa partie réelle, la partie imaginaire étant nulle en symétrie sphérique.

Densité $Q(\mathbf{r})$ La densité $Q(\mathbf{r})$ peut se calculer facilement en sphérique en exploitant la relation sur la partie angulaire de la fonction d'onde :

$$\Delta Y_{\ell,m} = -\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} Y_{\ell,m}. \quad (5.44)$$

Il est alors aisé de montrer que :

$$\begin{aligned} Q_0(r) &= \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi} \left[\Delta u_{\alpha}(r) - \ell(\ell+1) \frac{u_{\alpha}(r)}{r^2} \right]^2 \\ &= \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r^2} \left[R_{\alpha}''^2(r) - 2 \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_{\alpha}(r) R_{\alpha}''(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \frac{R_{\alpha}^2(r)}{r^2} \right]. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Cette densité est représentée sur la figure 5.6. On peut notamment y voir que son amplitude est plus importante que la densité de particule ρ_0 . Pour cette raison, nous verrons dans la suite de ce chapitre qu'une grande partie de la contribution à l'énergie de Skyrme N2LO provient de cette densité.

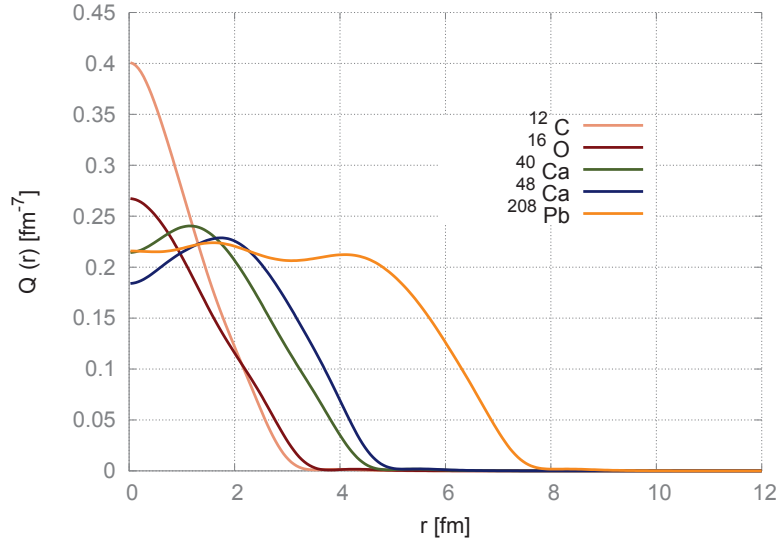


Figure 5.6 – Densité $Q_0(r)$ calculée avec les fonctions d'onde de SLy4 après convergence.

Cas particulier du Supertau Lors du développement de l'interaction Skyrme N3LO, nous nous sommes rendus compte qu'apparaissait dans le développement une densité englobant plusieurs densités présentées ici.

La relation est la suivante :

$$\mathcal{S}\tau_0(r) = \Delta\tau_0(r) + Q_0(r) - \nabla_\mu \nabla_\nu \tau_{0,\mu\nu} \quad (5.46)$$

Cette densité a été tracée sur la figure 5.7

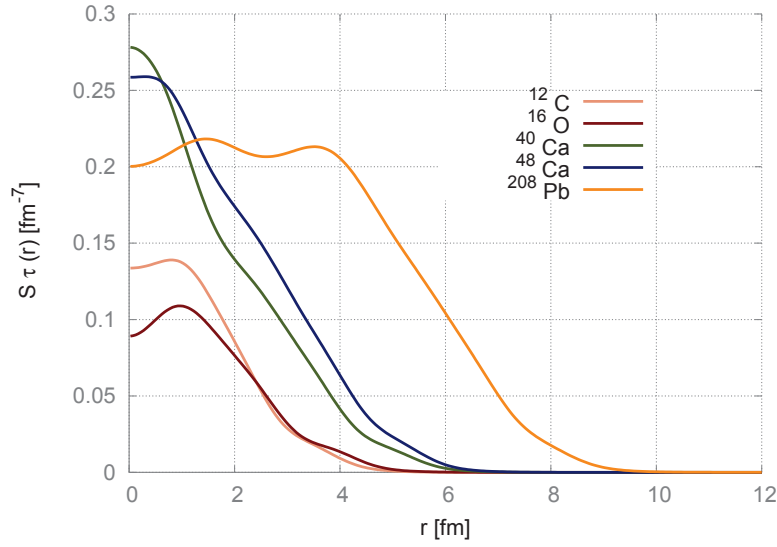


Figure 5.7 – Densité $S\tau_0(r)$ calculée avec les fonctions d'ondes de SLy4 après convergence.

L'avantage de cette densité est qu'elle s'introduit de manière naturelle lorsque l'on cherche à construire les densités ordre par ordre.

Densité $V_{0,\mu\nu}(\mathbf{r})$ La densité $V_{0,\mu\nu}(r)$ correspond à un tenseur de rang 2. Il est toutefois possible de voir Eq. (5.26) que celle-ci peut-être exprimée en fonction de la densité $J_{0,\mu\nu}(r)$ et garde la même structure. Seule la partie de rang 1 subsistera donc en symétrie sphérique :

$$V_{0,\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\kappa} \frac{X_\kappa}{r} V_0(r). \quad (5.47)$$

La partie dépendant de r s'écrit :

$$\begin{aligned} V_0(r) &= \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi} C_{\alpha} \left[\frac{u_{\alpha}^2}{r^3} [\ell(\ell+1) - 1] - 2 \frac{u'_{\alpha} u_{\alpha}}{r^2} + \frac{[u'_{\alpha}]^2}{r} \right] \\ &= \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r^3} C_{\alpha} \left[R_{\alpha}'^2(r) - \frac{4}{r} R_{\alpha}'(r) R_{\alpha}(r) + [2 + \ell(\ell+1)] \frac{R_{\alpha}^2(r)}{r^2} \right], \end{aligned} \quad (5.48)$$

avec $C_{\alpha} = j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}$.

Comme pour la densité $J_{0,\mu\nu}(r)$, on voit apparaître en facteur un coefficient spin-orbite que l'on notera désormais C_{α} .

La densité $V_0(r)$ est représentée sur la figure 5.8. Comme pour le $J_0(r)$, on constate que cette densité est petite en amplitude par rapport aux autres densités. Nous verrons que comme ce dernier, celle-ci apparaîtra dans les termes pilotant le spin-orbite.

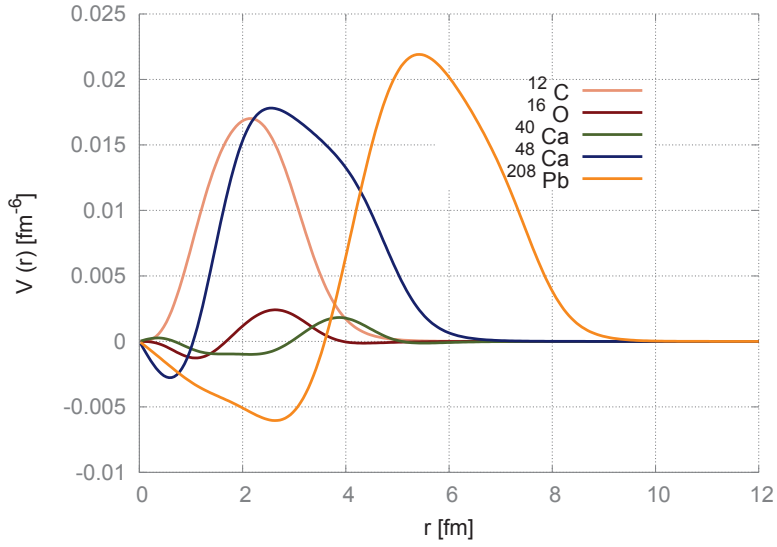


Figure 5.8 – Densité $V_0(r)$ calculée avec les fonctions d'ondes de SLy4 après convergence.

L'équation (5.26) montre que cette densité peut aussi être calculée à partir de la densité $\tau(r)$. La fonction $V_0(r)$ a ainsi une structure également analogue à cette dernière, avec une décomposition possible en une partie radiale et une partie centrifuge. On définit donc par analogie :

$$V_{0,R}(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r^3} C_{\alpha} \left[R_{\alpha}^{\prime 2}(r) - \frac{4}{r} R_{\alpha}^{\prime}(r) R_{\alpha}(r) + \frac{2}{r^2} R_{\alpha}^2(r) \right]. \quad (5.49)$$

$$V_{0,C}(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r^3} C_{\alpha} \left[\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_{\alpha}^2(r) \right]. \quad (5.50)$$

Si l'on trace ces deux contributions avec les fonctions d'ondes de SLy4 après convergence, on obtient les figures 5.9 et 5.10. On remarque très clairement sur ces deux courbes que les deux contributions divergent à l'origine, alors même que leur somme converge.

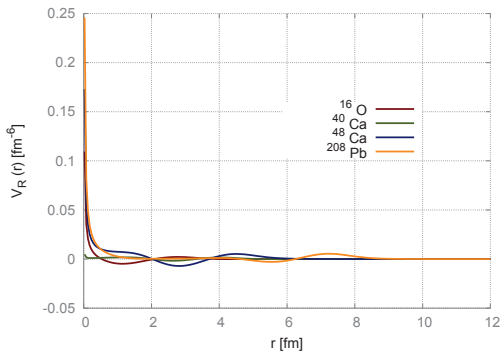


Figure 5.9 – Densité $V_{0,R}(r)$

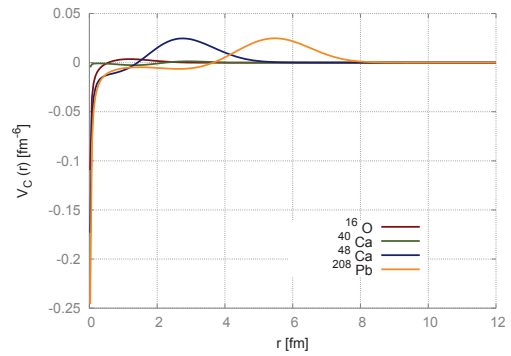


Figure 5.10 – Densité $V_{0,C}(r)$

Le ^{12}Ca qui est usuellement représenté a été ici laissé de côté pour des raisons de lisibilité, celui-ci divergeant

d'un ordre de grandeur supplémentaire. Ce noyau ne sera d'ailleurs pas considéré pour l'ajustement présenté dans la dernière section, car on sait que l'approximation de champ moyen n'est pas réaliste pour les noyaux légers. Il est possible de voir que la somme de ses contributions se comporte correctement sur la figure 5.8. Contrairement à $V_O(r)$, on remarque que l'amplitude des densités $V_{0,R}(r)$ et $V_{0,C}(r)$ n'est pas négligeable devant celle de la densité de particule ρ_0 . Une telle divergence peut malgré tout avoir des effets au niveau du processus numérique. Nous expliquerons la manière dont nous avons procédé dans la partie dédiée au code numérique.

Il est possible de montrer très simplement que cette densité est finie à l'origine. La méthode est explicitée dans l'encadré 5.5.1. Celle-ci a été systématiquement employée sur nos résultats pour les densités N2LO (et N3LO). Elle peut aussi être employée pour vérifier le bon comportement des coefficients de l'équation différentielle de la section suivante à l'origine.

La contribution associée à cette densité dans la fonctionnelle a également été calculée grâce aux équations (5.38,5.47) :

$$\begin{aligned} J_{0,\mu\nu} V_{0,\mu\nu} &= \frac{1}{4} \epsilon_{\mu\nu\kappa} \epsilon_{\mu\nu\lambda} \frac{X_\kappa X_\lambda}{r^2} J_0(r) V_0(r) \\ &= \frac{1}{2} J_0(r) V_0(r) \end{aligned} \tag{5.51}$$

en exploitant le fait que $X_\kappa X_\kappa = r^2$ et $\epsilon_{\mu\nu\kappa} \epsilon_{\mu\nu\lambda} = 2\delta_{\kappa\lambda}$.

Exemple 5.3.1 : Comportement de la densité $V_0(\mathbf{r})$ à l'origine

On rappelle que les fonctions d'ondes de Skyrme NLO se comportent comme $R_\alpha(r) = r^{\ell+1}$. On a alors

$$V_{0,R}(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r^3} C_{\alpha} [(\ell+1)^2 r^{2\ell} - 4\ell(\ell+1)r^{2\ell} + 2r^{2\ell}] \quad (5.52)$$

$$V_{0,C}(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi r^3} C_{\alpha} [\ell(\ell+1)r^{2\ell}] \quad (5.53)$$

avec la convention pour C_{α} choisie plus haut. Ce coefficient permet d'annuler les expressions pour $\ell = 0$. En factorisant les expressions, on obtient :

$$V_{0,R}(r) = \sum_{\alpha} C'_{\alpha} r^{2\ell-3} [(\ell+1)^2 - 4\ell(\ell+1) + 2] \quad (5.54)$$

$$V_{0,C}(r) = \sum_{\alpha} C'_{\alpha} r^{2\ell-3} [\ell(\ell+1)] \quad (5.55)$$

où l'on définit $C'_{\alpha} = \frac{(2j+1)}{4\pi} C_{\alpha}$ qui s'annule toujours pour $\ell = 0$. On voit bien que les expressions ci-dessus s'annulent donc pour $\ell = 0$ et ne divergent pas pour $\ell \geq 2$. La divergence a donc lieu pour $\ell = 1$, où on obtient :

$$V_{0,R}(r) = -\frac{2}{r} \sum_{\alpha} C'_{\alpha} \quad (5.56)$$

$$V_{0,C}(r) = \frac{2}{r} \sum_{\alpha} C'_{\alpha} \quad (5.57)$$

Les deux termes divergent, mais leur somme est nulle, et le comportement de $V_0(\mathbf{r})$ est donc bien celui observé.

Densité $K_{0,\mu\nu\kappa}(\mathbf{r})$ Cette densité a pour particularité d'être, en symétrie sphérique, purement imaginaire. Cette densité n'intervenant jamais seule, mais uniquement au carré, nous pouvons malgré tout l'utiliser comme n'importe quelle autre densité.

En symétrie sphérique, on obtient le résultat :

$$K_{0,\mu\nu\kappa}(\mathbf{r}) = -iK_{10}(r)\epsilon_{\mu\nu\kappa} - iK_{20} \left[\epsilon_{\mu\kappa M} \frac{X_M X_{\nu}}{r^2} + \epsilon_{\mu\nu M} \frac{X_M X_{\kappa}}{r^2} \epsilon_{\kappa\nu M} \frac{X_M X_{\mu}}{r^2} \right]. \quad (5.58)$$

où les fonctions K_{10} et K_{20} sont définies comme

$$K_{10}(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{16\pi r^3} C_{\alpha} R'_{\alpha}(r) R_{\alpha}(r), \quad (5.59)$$

$$K_{20}(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{16\pi r^3} C_{\alpha} \left[\frac{2}{r} R_{\alpha}(r)^2 - R'_{\alpha}(r) R_{\alpha}(r) \right]. \quad (5.60)$$

C_{α} est défini comme précédemment.

On voit que les contribution $K_{10}(\mathbf{r})$ et $K_{20}(\mathbf{r})$ possèdent un coefficient de spin-orbite, mais pas de termes centrifuges. Il s'agit de la première densité de ce type que nous rencontrons. Les parties radiales de cette densité sont tracées sur les figures 5.11-5.12.

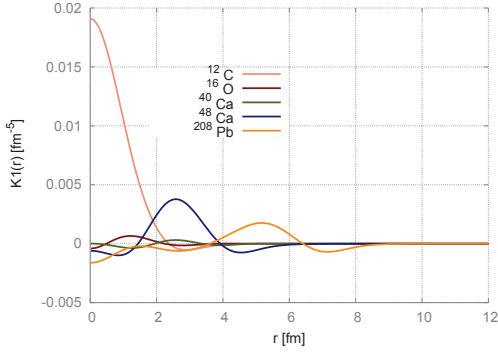


Figure 5.11 – Densité $K_{10}(\mathbf{r})$

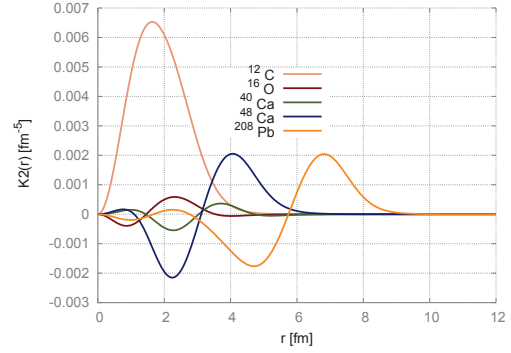


Figure 5.12 – Densité $K_{20}(\mathbf{r})$

On peut voir que ces contributions sont très petites devant celles d'une densité de particules, d'autant plus que la constante de couplage qui y est associée est plus petite et que ces fonctions interviennent généralement au carré (voir 5.61).

La contribution associée à cette densité dans la fonctionnelle a également été calculée :

$$K_{0,\mu\nu\kappa}K_{0,\mu\nu\kappa} = 6K_{10}(r)^2 + 6K_{20}(r)^2 - 4K_{10}(r)K_{20}(r). \quad (5.61)$$

Les fonctions K_{10} et K_{20} sont celles de l'équation (5.59).

Nous pouvons également définir une fonction $K_0(r)$, qui représente la contribution à l'équation différentielle :

$$K_0(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{2\pi r^3} C_{\alpha} \left[R_{\alpha}''(r)R_{\alpha}(r) - \frac{4}{r}R_{\alpha}'(r)R_{\alpha}(r) + R_{\alpha}'^2(r) + \frac{2}{r^2}R_{\alpha}^2(r) \right]. \quad (5.62)$$

Celle-ci est représentée sur la figure 5.13.

On peut y voir que la contribution est petite par rapport à des termes comme la densité de particule ρ . Notons toutefois la disparité de comportement en fonction du noyau concerné, tout particulièrement pour le ^{12}C . Ce noyau n'ayant pas vocation à être utilisé dans le processus d'ajustement, nous avons laissé ce phénomène de côté, en faisant attention que ce genre de comportement n'apparaissait pas dans les noyaux du processus d'ajustement.

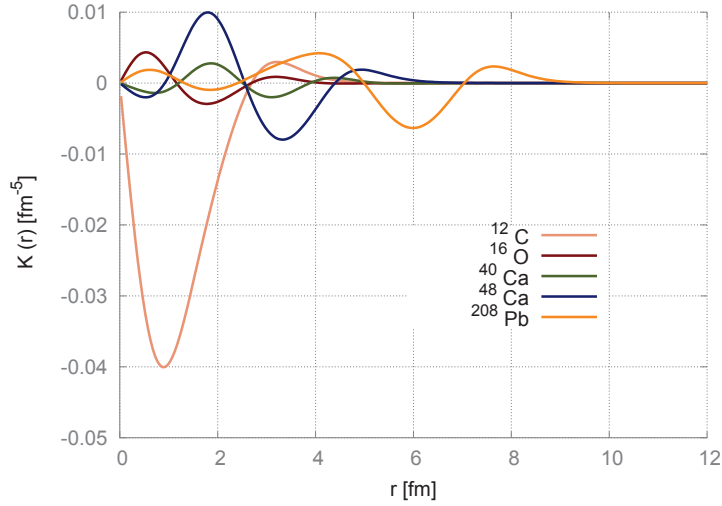


Figure 5.13 – Densité $K_0(r)$ calculée avec les fonctions d'ondes de SLy4 après convergence.

Une fois obtenue l'expression de ces densités, nous pouvons appliquer le principe variationnel sur la fonctionnelle afin d'obtenir l'équation de champ moyen. C'est ce que nous allons présenter dans la section suivante.

5.3.3 Équation du champ-moyen de Skyrme N2LO en symétrie sphérique

L'équation du champ moyen pour Skyrme NLO étant du second ordre, on s'attend naturellement à obtenir pour Skyrme N2LO une équation différentielle du quatrième ordre. Le hamiltonien à un corps devrait ainsi pouvoir se mettre sous la forme

$$A_4 R_{nlj}^{(4)} + A_3 R_{nlj}^{(3)} + A_2 R_{nlj}^{(2)} + A_1 R_{nlj}^{(1)} + A_0 R_{nlj} = \epsilon_{nlj} R_{nlj}, \quad (5.63)$$

où ϵ_{nlj} est l'énergie de particule individuelle du nucléon satisfaisant cette équation. Pour un noyau composé de A nucléons, on aura donc un système de A équations de ce type.

Pour obtenir la forme exacte de l'équation (5.63), il suffit de considérer une variation infinitésimale de la densité d'énergie totale par rapport à la fonction d'onde. Le système étant dans son état fondamental, et donc stable, une variation infime ne modifiera pas ce dernier au premier ordre. On a le choix d'effectuer la variation par rapport à la fonction d'onde ou la fonction d'onde conjuguée. Le résultat est le même à une constante près. On fait donc le choix historique de minimiser par rapport à Φ_q^* .

En pratique, on calcule :

$$\frac{\delta \mathcal{E}(\mathbf{r})}{\delta \Phi_q^*} \quad (5.64)$$

avec $\mathcal{E}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}[\rho(r), \tau(r), J_{\mu\nu}(r), \tau_{\mu\nu}(r), Q(r), V_{\mu\nu}(r), K_{\mu\nu\rho}(r)]$.

On utilise pour ce faire un processus analogue à l'obtention des équations du mouvement d'Euler-Lagrange. La fonctionnelle contenant des dépendances en densité jusqu'à $\Delta\Phi$, on doit donc considérer³ :

$$\frac{\delta \mathcal{E}(\mathbf{r})}{\delta \Phi_q^*} = \frac{\delta \mathcal{E}(\mathbf{r})}{\delta A(r)} \frac{\delta A(r)}{\delta \Phi_q^*} - \nabla \left[\frac{\delta \mathcal{E}(\mathbf{r})}{\delta A(r)} \frac{\delta A(r)}{\delta \nabla \Phi_q^*} \right] + \Delta \left[\frac{\delta \mathcal{E}(\mathbf{r})}{\delta A(r)} \frac{\delta A(r)}{\delta \Delta \Phi_q^*} \right] \quad (5.65)$$

3. On prend une densité scalaire $A(r)$ pour simplifier.

Les variations des densités non nulles en fonction des dérivées de la fonction d'onde conjuguée sont, d'après les formules de la section 5.2 :

$$\frac{\delta\rho_q}{\delta\Phi_q^*} = \Phi_q \quad (5.66)$$

$$\frac{\delta\tau_q}{\delta\nabla_\mu\Phi_q^*} = \nabla_\mu\Phi_q \quad (5.67)$$

$$\frac{\delta J_{\mu\nu q}}{\delta\Phi_q^*} = -\frac{i}{2}\nabla_\mu\Phi_q\sigma_\nu \quad (5.68)$$

$$\frac{\delta J_{\mu\nu q}}{\delta\nabla_\rho\Phi_q^*} = \frac{i}{2}\Phi_q\sigma_\nu\delta_{\rho\mu} \quad (5.69)$$

$$\frac{\delta\tau_{\mu\nu q}}{\delta\nabla_\rho\Phi_q^*} = \nabla_\mu\Phi_q\delta_{\rho\nu} \quad (5.70)$$

$$\frac{\delta Q_q}{\delta\Delta\Phi_q^*} = \Delta\Phi_q \quad (5.71)$$

$$\frac{\delta V_{\mu\nu q}}{\delta\nabla_\rho\Phi_q^*} = -\frac{i}{2}\nabla_\rho\nabla_\mu\Phi_q\sigma_\nu \quad (5.72)$$

$$\frac{\delta V_{\mu\nu q}}{\delta\nabla_\rho\nabla_\kappa\Phi_q^*} = \frac{i}{2}\nabla_\rho\Phi_q\sigma_\nu\delta_{\kappa\mu} \quad (5.73)$$

$$\frac{\delta K_{\mu\nu\kappa q}}{\delta\nabla_\rho\Phi_q^*} = \nabla_\mu\Phi_q\sigma_\kappa\delta_{\rho\nu} \quad (5.74)$$

Les variations de la fonctionnelle par rapport aux densités sont quant à elles :

$$\frac{\delta\epsilon}{\delta Q_q} = [C_0^{(4)M\rho} - C_1^{(4)M\rho}] \rho_0 + 2C_1^{(4)M\rho} \rho_q \quad (5.75)$$

$$\frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_q} = \frac{\hbar^2}{2m} + [C_0^\tau - C_1^\tau] \rho_0 + 2C_1^\tau \rho_q + 2[C_0^{(4)M\rho} - C_1^{(4)M\rho}] \tau_0 + 4C_1^{(4)M\rho} \tau_q \quad (5.76)$$

$$\frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_{\mu\nu q}} = 2[C_0^{(4)M\rho} - C_1^{(4)M\rho}] [2\tau_{\mu\nu 0} - \nabla_\mu\nabla_\nu\rho_0] + 4C_1^{(4)M\rho} [2\tau_{\mu\nu q} - \nabla_\mu\nabla_\nu\rho_q] \quad (5.77)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta\epsilon}{\delta J_{\mu\nu q}} = & -2[C_0^T - C_1^T] J_{\mu\nu 0} - 4C_1^T J_{\mu\nu q} - [C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}] \epsilon_{\mu\nu\rho} \frac{X_\rho}{r} \rho_0^{(1)} - 2C_1^{\nabla J} \epsilon_{\mu\nu\rho} \frac{X_\rho}{r} \rho_q^{(1)} \\ & + 2[C_0^{(4)Ms} - C_1^{(4)Ms}] [\nabla_\mu\nabla_\kappa J_{\kappa\nu 0} - 2V_{\mu\nu 0}] + 4C_1^{(4)Ms} [\nabla_\mu\nabla_\kappa J_{\kappa\nu q} - 2V_{\mu\nu q}] \end{aligned} \quad (5.78)$$

$$\frac{\delta\epsilon}{\delta V_{\mu\nu q}} = -4[C_0^{(4)Ms} - C_1^{(4)Ms}] J_{\mu\nu 0} - 8C_1^{(4)Ms} J_{\mu\nu q} \quad (5.79)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\epsilon}{\delta\rho_q} = & 2[C_0^\rho - C_1^\rho] \rho_0 + 4C_1^\rho \rho_q + 2[C_0^{\Delta\rho} - C_1^{\Delta\rho}] \Delta\rho_0 + 4C_1^{\Delta\rho} \Delta\rho_q + [C_0^\tau - C_1^\tau] \tau_0 + 2C_1^\tau \tau_q \\
& + 2[C_0^{(4)\Delta\rho} - C_1^{(4)\Delta\rho}] \Delta\Delta\rho_0 + 4C_1^{(4)\Delta\rho} \Delta\Delta\rho_q \\
& - 2[C_0^{(4)M\rho} - C_1^{(4)M\rho}] \nabla_\mu \nabla_\nu \tau_{\mu\nu_0} - 4C_1^{(4)M\rho} \nabla_\mu \nabla_\nu \tau_{\mu\nu_q} + [C_0^{(4)M\rho} - C_1^{(4)M\rho}] Q_0 + 2C_1^{(4)M\rho} Q_q \\
& + [C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J}] \nabla \cdot J_0 + 2C_1^{\nabla J} \nabla \cdot J_q
\end{aligned} \tag{5.80}$$

$$\frac{\delta\epsilon}{\delta K_{\mu\nu\kappa_q}} = -2[C_0^{(4)Ms} - C_1^{(4)Ms}] K_{\mu\nu\kappa_0} - 4C_1^{(4)Ms} K_{\mu\nu\kappa_q} \tag{5.81}$$

La somme de toutes les contributions nous donne alors :

$$\begin{aligned}
\epsilon_{n\ell j} \Phi_q = & \frac{\delta\epsilon}{\delta\rho_q} \Phi_q - \frac{i}{2} \frac{\delta\epsilon}{\delta J_{\mu\nu_q}} \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\nu \\
& - \nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_q} \nabla_\mu \Phi_q + \frac{i}{2} \frac{\delta\epsilon}{\delta J_{\mu\nu_q}} \Phi_q \sigma_\nu \right] \\
& - \nabla_\nu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_{\mu\nu_q}} \nabla_\mu \Phi_q + \frac{\delta\epsilon}{\delta K_{\mu\nu\kappa_q}} \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\kappa \right] \\
& + \frac{i}{2} \nabla_\rho \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta V_{\mu\nu_q}} \nabla_\rho \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\nu \right] \\
& + \frac{i}{2} \nabla_\rho \nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta V_{\mu\nu_q}} \nabla_\rho \Phi_q \sigma_\nu \right] \\
& + \Delta \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta Q_q} \Delta \Phi_q \right]
\end{aligned} \tag{5.82}$$

Il est possible de décomposer cette équation en deux parties :

— la partie sans σ_ν , appelée terme central :

$$\frac{\delta\epsilon}{\delta\rho_q} \Phi_q - \nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_q} \nabla_\mu \Phi_q \right] - \nabla_\nu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_{\mu\nu_q}} \nabla_\mu \Phi_q \right] + \Delta \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta Q_q} \Delta \Phi_q \right] \tag{5.83}$$

— la partie avec σ_ν , appelée partie spin-orbite :

$$\begin{aligned}
& - \frac{i}{2} \frac{\delta\epsilon}{\delta J_{\mu\nu_q}} \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\nu + \frac{i}{2} \nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta J_{\mu\nu_q}} \Phi_q \sigma_\nu \right] - \nabla_\nu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta K_{\mu\nu\kappa_q}} \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\kappa \right] \\
& + \frac{i}{2} \nabla_\rho \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta V_{\mu\nu_q}} \nabla_\rho \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\nu \right] + \frac{i}{2} \nabla_\rho \nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta V_{\mu\nu_q}} \nabla_\rho \Phi_q \sigma_\nu \right]
\end{aligned} \tag{5.84}$$

Ces deux parties peuvent se réécrire :

— Terme central :

$$\begin{aligned}
& \frac{\delta\epsilon}{\delta\rho_q}\Phi_q - \nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_q} \right] \nabla_\mu \Phi_q - \frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_q} \Delta\Phi_q - \nabla_\nu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_{\mu\nu_q}} \right] \nabla_\mu \Phi_q \\
& - \frac{\delta\epsilon}{\delta\tau_{\mu\nu_q}} \nabla_\nu \nabla_\mu \Phi_q + \Delta \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta Q_q} \right] \Delta\Phi_q + \frac{\delta\epsilon}{\delta Q_q} \Delta\Delta\Phi_q \\
& + 2\nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta Q_q} \right] \nabla_\mu [\Delta\Phi_q]. \tag{5.85}
\end{aligned}$$

— Terme de spin-orbite :

$$\begin{aligned}
& - i \frac{\delta\epsilon}{\delta J_{\mu\nu_q}} \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\nu - \frac{i}{2} \nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta J_{\mu\nu_q}} \right] \Phi_q \sigma_\nu + i \nabla_\rho \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta V_{\mu\nu_q}} \right] \nabla_\rho \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\nu \\
& + \frac{i}{2} \nabla_\rho \nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta V_{\mu\nu_q}} \right] \nabla_\rho \Phi_q \sigma_\nu + i \frac{\delta\epsilon}{\delta V_{\mu\nu_q}} \nabla_\mu \Delta\Phi_q \sigma_\nu + \frac{i}{2} \nabla_\mu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta V_{\mu\nu_q}} \right] \Delta \Phi_q \sigma_\nu \\
& - \nabla_\nu \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta K_{\mu\nu\kappa_q}} \right] \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\kappa - \left[\frac{\delta\epsilon}{\delta K_{\mu\nu\kappa_q}} \right] \nabla_\nu \nabla_\mu \Phi_q \sigma_\kappa \tag{5.86}
\end{aligned}$$

Après contraction des indices, on obtient bien une équation du quatrième ordre en fonction de la fonction d'onde $R_{n\ell j}$:

$$\begin{aligned}
& A_4 R_{n\ell j}^{(4)} + A_3 R_{n\ell j}^{(3)} + A_{2R} R_{n\ell j}^{(2)} + A_{1R} R_{n\ell j}^{(1)} + A_{0R} R_{n\ell j} \\
& + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \left[A_{2C} R_{n\ell j}^{(2)} + A_{1C} R_{n\ell j}^{(1)} + A_{0C} R_{n\ell j} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} A_{0CC} R_{n\ell j} \right] = \epsilon_{n\ell j} R_{n\ell j}. \tag{5.87}
\end{aligned}$$

L'indice (i) dans le coin supérieur droit d'une fonction radiale signifie que nous prenons sa i -ème dérivée par rapport à r . Lorsqu'une constante de couplage est notée C_-^ρ , il s'agit de la différence entre C_0^ρ et C_1^ρ . Il est possible d'organiser l'équation différentielle avec C_0^ρ et C_1^ρ uniquement, comme pour la fonctionnelle, mais nous avons pris le parti de conserver l'organisation apparaissant dans la littérature. Les constantes de couplages de Skyrme N2LO ont un indice (4) dans le coin supérieur gauche. Les autres constantes de couplages sont celles de Skyrme NLO. En mettant toutes les constantes de couplage de Skyrme N2LO à zéro, on retrouve naturellement l'équation du champ-moyen pour Skyrme NLO. Les coefficients A_i de l'équation différentielle sont donnés ci-dessous et sont toujours séparés entre leur partie radiale et leur partie centrifuge ⁴ :

4. Les termes A_{0CC} et $A_{0C} \frac{\rho_0}{r^2}$ peuvent être recomposés pour donner une contribution égale à $\ell(\ell+1)(\ell-2)(\ell+3) \frac{\rho_0}{r^4}$. Nous avons choisi de garder ces deux contributions séparées.

$$A_4 = C_-^{(4)M\rho} \rho_0 + 2 C_1^{(4)M\rho} \rho_q \quad (5.88)$$

$$A_3 = 2 C_-^{(4)M\rho} \rho_0^{(1)} + 4 C_1^{(4)M\rho} \rho_q^{(1)} \quad (5.89)$$

$$A_{2R} = W_{2R_q}(r) - \frac{\hbar^2}{2m} - C_-^\tau \rho_0 - 2C_1^\tau \rho_q + C_-^{(4)M\rho} \left[3\rho_0^{(2)} - 6\tau_{0R} - 2\tau_{0C} \right] \quad (5.90)$$

$$+ 2 C_1^{(4)M\rho} \left[3\rho_q^{(2)} - 6\tau_{qR} - 2\tau_{qC} \right] \quad (5.91)$$

$$A_{2C} = -2 C_-^{(4)M\rho} \rho_0 - 4 C_1^{(4)M\rho} \rho_q \quad (5.92)$$

$$A_{1R} = W_{1R_q}(r) - C_-^\tau \rho_0^{(1)} - 2C_1^\tau \rho_0^{(1)} + 2 C_-^{(4)M\rho} \left[\rho_0^{(3)} - 3\tau_{0R}^{(1)} - \tau_{0C}^{(1)} \right] + 4 C_1^{(4)M\rho} \left[\rho_q^{(3)} - 3\tau_{qR}^{(1)} - \tau_{qC}^{(1)} \right] \quad (5.93)$$

$$A_{1C} = 2 C_-^{(4)M\rho} \left(2\frac{\rho_0}{r} - \rho_0^{(1)} \right) + 4 C_1^{(4)M\rho} \left(-\rho_q^{(1)} + 2\frac{\rho_q}{r} \right),$$

$$A_{0R} = U_q(r) + W_{0R_q} + C_-^\tau \frac{\rho_0^{(1)}}{r} + 2 C_1^\tau \frac{\rho_q^{(1)}}{r} + 2 C_-^{(4)M\rho} \left[3\frac{\tau_{0R}^{(1)}}{r} + \frac{\tau_{0C}^{(1)}}{r} - \frac{\rho_0^{(3)}}{r} \right] + 4 C_1^{(4)M\rho} \left[3\frac{\tau_{qR}^{(1)}}{r} + \frac{\tau_{qC}^{(1)}}{r} - \frac{\rho_q^{(3)}}{r} \right] \quad (5.94)$$

$$A_{0C} = W_{0C_q}(r) + \frac{\hbar^2}{2m} + C_-^\tau \rho_0 + 2C_1^\tau \rho_q \quad (5.95)$$

$$+ C_-^{(4)M\rho} \left[2\tau_{0R} + 4\tau_{0C} + 2\frac{\rho_0^{(1)}}{r} - \rho_0^{(2)} - 6\frac{\rho_0}{r^2} \right]$$

$$+ 2 C_1^{(4)M\rho} \left[2\tau_{qR} + 4\tau_{qC} + 2\frac{\rho_q^{(1)}}{r} - \rho_q^{(2)} - 6\frac{\rho_q}{r^2} \right] \quad (5.96)$$

$$A_{0CC} = C_-^{(4)M\rho} \rho_0 + 2 C_1^{(4)M\rho} \rho_q. \quad (5.97)$$

Le champ $U_q(r)$ central apparaissant ci-dessus s'écrit :

$$\begin{aligned} U_q(r) &= \frac{\delta\epsilon}{\delta\rho_q} \\ &= 2[C_0^\rho - C_1^\rho] \rho_0 + 4 C_1^\rho \rho_q + 2 \left[C_0^{\Delta\rho} - C_1^{\Delta\rho} \right] \Delta\rho_0 + 4 C_1^{\Delta\rho} \Delta\rho_q + [C_0^\tau - C_1^\tau] \tau_0 + 2 C_1^\tau \tau_q \\ &+ 2 \left[C_0^{(4)\Delta\rho} - C_1^{(4)\Delta\rho} \right] \Delta\Delta\rho_0 + 4 C_1^{(4)\Delta\rho} \Delta\Delta\rho_q \\ &- 2 \left[C_0^{(4)M\rho} - C_1^{(4)M\rho} \right] \nabla_\mu \nabla_\nu \tau_{\mu\nu_0} - 4 C_1^{(4)M\rho} \nabla_\mu \nabla_\nu \tau_{\mu\nu_q} + \left[C_0^{(4)M\rho} - C_1^{(4)M\rho} \right] Q_0 + 2 C_1^{(4)M\rho} Q_q \\ &+ \left[C_0^{\nabla J} - C_1^{\nabla J} \right] \nabla \cdot J_0 + 2 C_1^{\nabla J} \nabla \cdot J_q \end{aligned} \quad (5.98)$$

Les termes issus du spin-orbite sont :

$$W_{0R_q}(r) = C_\alpha \left[-C_-^T \frac{J_0}{r} - 2C_1^T \frac{J_q}{r} - C_-^{\nabla J} \frac{\rho_0^{(1)}}{r} - 2C_1^{\nabla J} \frac{\rho_q^{(1)}}{r} \right] \quad (5.99)$$

$$+ C_\alpha \left[2C_-^{(4)Ms} \left(\frac{J_0}{r^3} - \frac{J_0^{(1)}}{r^2} - \frac{V_0(r)}{r} + 2 \frac{K_0(r)}{r} \right) + 4C_1^{(4)Ms} \left(\frac{J_q}{r^3} - \frac{J_q^{(1)}}{r^2} - \frac{V_q(r)}{r} + 2 \frac{K_q(r)}{r} \right) \right]$$

$$W_{0C_q}(r) = C_\alpha \left[-2C_-^{(4)Ms} \frac{J_0(r)}{r} - 4C_1^{(4)Ms} \frac{J_q(r)}{r} \right], \quad (5.100)$$

$$W_{1R_q}(r) = C_\alpha \left[2C_-^{(4)Ms} \left(\frac{J_0^{(1)}(r)}{r} - \frac{J_0(r)}{r^2} \right) + 4C_1^{(4)Ms} \left(\frac{J_q^{(1)}(r)}{r} - \frac{J_q(r)}{r^2} \right) \right], \quad (5.101)$$

$$W_{2R_q}(r) = C_\alpha \left[2C_-^{(4)Ms} \frac{J_0(r)}{r} + 4C_1^{(4)Ms} \frac{J_q(r)}{r} \right], \quad (5.102)$$

où on rappelle que $C_\alpha = j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}$. On a calculé $K_0(r)$ comme

$$K_0(r) = -K_2' - 2 \frac{K_2}{r} + K_1'. \quad (5.103)$$

On peut voir que les coefficients sont composés des densités définies dans la section précédente. Il s'agit d'une équation différentielle d'ordre 4, dont la particularité est d'avoir quatre nouvelles contributions spin-orbite. Ces termes spin-orbite ont la particularité de contribuer jusqu'à la dérivée seconde. L'un d'eux est également centrifuge $W_{0C_q}(r)$, ce qui offre la possibilité de découpler la partie radiale et centrifuge du spin-orbite, et probablement d'agir d'une manière inédite sur la physique du noyau. Traditionnellement, les termes spin-orbite de l'équation différentielle permettent d'améliorer les propriétés spectroscopiques d'une interaction. L'un des enjeux de Skyrme N2LO est d'explorer la physique que peuvent décrire ces nouveaux termes.

5.3.4 Comportement de la fonction d'onde du système à l'origine pour Skyrme N2LO

Afin d'implémenter correctement la méthode numérique de Hooverman, que nous présenterons dans la section suivante, il est nécessaire de déterminer le comportement des fonctions d'ondes avec Skyrme N2LO aux extrémités de la boîte dans laquelle est effectuée le calcul des noyaux. Pour N1LO, le comportement à l'origine des fonctions d'ondes radiales $R_\alpha(r)$ ⁵ est r^{l+1} tandis qu'à l'extrémité, la valeur de la fonction d'onde doit être zéro. La particule est en effet confinée au sein du noyau et doit être nulle au-delà. Cette méthode est inspirée par un calcul trouvé dans la référence [126]. Pour N2LO, ce comportement asymptotique n'est plus forcément vrai et on doit le déterminer à nouveau. On suppose une fonction d'onde avec un comportement $R_\alpha(r) = r^\beta$ à l'origine.

L'équation différentielle (5.87) est alors :

$$\begin{aligned} \epsilon_\alpha r^4 = & \beta(\beta-1)(\beta-2)(\beta-3)A_4 + \beta(\beta-1)(\beta-2)A_3r + \beta(\beta-1)A_2Rr^2 + \beta A_1Rr^3 \\ & + A_0Rr^4 + \ell(\ell+1) [\beta(\beta-1)A_2C + \beta A_1Cr + A_0Cr^2 + \ell(\ell+1)A_0CC] \\ & + \left(j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right) [W_0Rr^4 + \ell(\ell+1)W_0Cr^2 + \beta W_1Rr^3 + \beta(\beta-1)W_2Rr^2] \end{aligned} \quad (5.104)$$

5. $\alpha = qnlj$

On prend maintenant la limite $r \rightarrow 0$ pour les coefficients. On rappelle que A_{1C} contient une contribution en $1/r$ et A_{0C} une contribution en $1/r^2$, on les note respectivement $A_{1C}[1/r]$ et $A_{0C}[1/r^2]$. Ces deux termes ne s'éliminent donc pas lorsque l'on prend la limite.

On a alors :

$$\beta(\beta - 1)(\beta - 2)(\beta - 3)A_4 + \ell(\ell + 1) [\beta(\beta - 1)A_{2C} + \beta A_{1C} + A_{0C} + \ell(\ell + 1)A_{0CC}] \simeq 0 \quad (5.105)$$

On peut remarquer que dans la limite $r \rightarrow 0$:

$$A_{2C} = -2A_4 \quad A_{1C} = 4A_4 \quad A_{0C} = -6A_4 \quad A_{0CC} = A_4 \quad (5.106)$$

Après avoir simplifié par A_4 (qui ne dépend que de ρ_0 , non nul en $r = 0$), on aboutit au polynôme du quatrième ordre :

$$\beta^4 - 6\beta^3 + \beta^2 (-2\ell^2 - 2\ell + 11) + 6\beta (\ell^2 + \ell - 1) + \ell(\ell + 1) (\ell^2 + \ell - 6) \simeq 0 \quad (5.107)$$

Cette équation à 4 solutions :

$$\beta = 2 - \ell \quad \beta = -\ell \quad \beta = \ell + 1 \quad \beta = \ell + 3 \quad (5.108)$$

Les deux première solutions sont divergentes pour $\ell > 3$, et l'on garde la plus petite des deux restantes, qui correspond à $\beta = \ell + 1$. Le comportement de la fonction d'onde avec Skyrme N2LO est donc le même à l'origine que celui de Skyrme NLO. Cette information s'avérera importante lorsque nous discuterons de la méthode numérique.

5.3.5 Comportement des termes dépendants de la densité $\rho_0(\mathbf{r})$ à l'origine dans Skyrme N2LO

Nous avons montré dans la section précédente que le comportement des fonctions d'ondes à l'origine pour Skyrme N2LO est $r^{\ell+1}$. En regardant les termes individuellement (et les contributions numériques), nous nous sommes rendus compte que certains termes divergeaient individuellement. De manière analogue à ce que nous avons fait pour la densité $V_{\mu\nu}(r)$ dans la section 5.3.2, nous montrons ici que ces contributions se compensent :

Comportement de la densité ρ et de ses dérivées à l'origine En se basant sur l'Eq. (5.34), avec un comportement $r^{\ell+1}$ à l'origine, on obtient :

$$\begin{aligned} \rho_0 &\propto r^{2\ell} \\ \rho_0^{(1)} &\propto 2\ell r^{2\ell-1} \\ \rho_0^{(2)} &\propto 2\ell(2\ell - 1) r^{2(\ell-1)} \\ \rho_0^{(3)} &\propto 4\ell(\ell - 1)(2\ell - 1) r^{2\ell-3} \\ \rho_0^{(4)} &\propto 4\ell(\ell - 1)(2\ell - 1)(2\ell - 3) r^{2(\ell-2)}. \end{aligned} \quad (5.109)$$

On peut noter que toutes les ondes partielles contribuent à l'origine à ρ_0 , puis que toutes sauf $l = 0$ contribuent à sa dérivée $\rho^{(1)}$ et ainsi de suite.

Comportement des termes en $C^{M\rho} \rho_0$ à l'origine On a quatre termes associés avec la contribution $C^{M\rho} \rho_0$:

$$\underbrace{\ell(\ell+1)(\ell-1)(\ell-2)\rho_0 r^{\ell-3}}_{A_4} - \underbrace{2\ell^2(\ell+1)^2\rho_0 r^{\ell-3}}_{A_{2C}} + \underbrace{4\ell(\ell+1)^2\rho_0 r^{\ell-3}}_{A_{1C}} - \underbrace{6\ell(\ell+1)\rho_0 r^{\ell-3}}_{A_{oC}} + \underbrace{\ell(\ell+1)\rho_0 r^{\ell-3}}_{A_{oCC}} = 0 \quad (5.110)$$

La somme de ces termes se comportent bien à l'origine, mais peuvent diverger individuellement.

Comportement des termes en $C^{M\rho} \rho_0^{(1)}$ à l'origine On a trois termes associés avec la contribution $C^{M\rho} \rho_0^{(1)}$:

$$\underbrace{2\ell(\ell+1)(\ell-1)\rho_0^{(1)} r^{\ell-2}}_{A_3} - \underbrace{2\ell(\ell+1)^2\rho_0^{(1)} r^{\ell-2}}_{A_{1C}} + \underbrace{2\ell(\ell+1)\rho_0^{(1)} r^{\ell-2}}_{A_{oC}} = -2\ell(\ell+1)\rho^{(1)} r^{\ell-2} \quad (5.111)$$

En prenant en compte l'Eq. (5.109), on voit que ces termes se comportent comme $-4\ell^2(\ell+1)r^{3\ell-3}$. On remarque que pour $\ell = 0$, cette contribution est nulle et pour $\ell \geq 1$, celle-ci est finie.

Comportement des termes en $C^{M\rho} \rho_0^{(2)}$ à l'origine On a deux termes associés avec la contribution $C^{M\rho} \rho_0^{(2)}$:

$$\underbrace{3\ell(\ell+1)\rho_0^{(2)} r^{\ell-1}}_{A_{2R}} - \underbrace{\ell(\ell+1)\rho_0^{(2)} r^{\ell-1}}_{A_{oC}} = 2\ell(\ell+1)\rho_0^{(2)} r^{\ell-1} \quad (5.112)$$

En prenant en compte (5.109), on voit que ces termes se comportent comme $2\ell^2(\ell+1)(2\ell-1)r^{3\ell-3}$. On remarque que pour $\ell = 0$, cette contribution est nulle et pour $\ell \geq 1$, celle-ci est finie.

Comportement des termes en $C^{M\rho} \rho_0^{(3)}$ à l'origine On a deux termes associés avec cette contribution :

$$\underbrace{2(\ell+1)\rho_0^{(3)} r^\ell}_{A_{1R}} - \underbrace{2\rho_0^{(3)} r^\ell}_{A_{oC}} = 2\ell\rho_0^{(3)} r^\ell \quad (5.113)$$

En prenant en compte (5.109), on voit que ces termes se comportent comme $8\ell^2(\ell+1)(\ell-1)(2\ell-1)r^{3\ell-3}$. On remarque que pour $\ell = 0$, cette contribution est nulle et pour $\ell \geq 1$, celle-ci est finie.

Ces comportements, où d'éventuelles divergences individuelles se compensent au niveau de l'équation de champ-moyen, ont motivé en partie le choix de la méthode numérique permettant le traitement de Skyrme N2LO. Cet exercice nous a aussi permis, en le généralisant à tous les termes, de vérifier l'homogénéité de notre équation de champ-moyen.

5.4 Résolution numérique de Skyrme N2LO à l'approximation Hartree-Fock : WHISKY₂

Nous allons dans cette section présenter le développement et les méthodes numériques à l'oeuvre dans notre code numérique pour le calcul des noyaux avec Skyrme N2LO. La structure générale de ce code peut-être trouvée sur la figure 5.14. Elle est analogue à la structure d'un code Hartree-Fock classique, mais emploie une méthode de résolution peu connue que nous allons détailler. Dans le reste de ce manuscrit, le code sera appelé par son acronyme, WHISKY₂⁶.

6. Wise Hartree-fock Implementation of a SKYrme n2lo interaction.

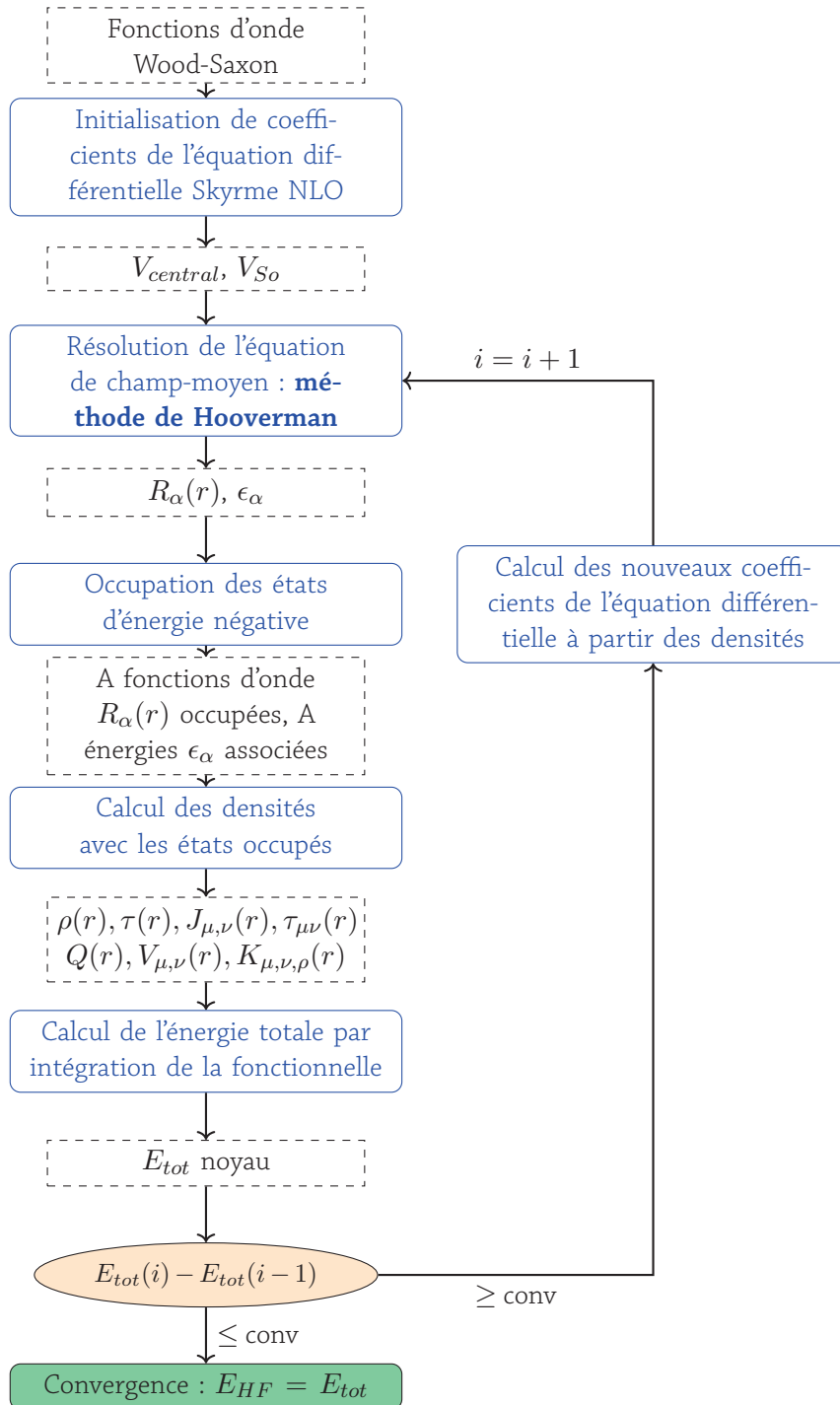


Figure 5.14 – Structure du programme WHISKY2. Le paramètre *conv* correspond à la convergence requise, typiquement de l'ordre de 10^{-13} dans notre cas. L'indice *i* correspond à l'itération en cours et *A* au nombre de nucléons du noyau calculé. E_{tot} correspond à l'énergie de liaison du noyau.

5.4.1 Méthode de Hooverman

La méthode de Hooverman [127] est la méthode qui intervient dans WHISKY2 au niveau de la résolution Hartree-Fock de l'équation de champ-moyen. Pour chaque triplet de nombres quantiques $\alpha = (\ell, j, q)$, on remplit une matrice de taille $N \times N$, où N est le nombre de points du maillage. Cette matrice correspond au hamiltonien pour les nombres quantiques donnés, et l'on sait que l'hamiltonien de champ moyen satisfait à l'équation

$$H_i \Psi_i = \epsilon_i \Psi_i, \quad (5.114)$$

pour un nucléon donné. Nous avons un hamiltonien représenté par une matrice de dimension $N \times N$, sa diagonalisation nous donnera donc N valeurs propres (énergies ϵ_α) et les N vecteurs propres (fonctions d'ondes R_α) correspondant à ces valeurs propres. On répète ce processus pour chacun des triplets de nombres quantiques, en stockant à chaque fois toutes les énergies et fonctions d'ondes obtenues.

Comme indiqué sur la figure 5.14, on remplit ensuite les états de particule individuelle. Comme on connaît le nombre de neutrons et de protons, on classe les énergies obtenues par ordre croissant et on remplit, séparément pour les protons et les neutrons, les couches ainsi ordonnées les unes après les autres en partant de la plus liée.

L'originalité de la méthode réside dans la manière dont est représenté le hamiltonien, et la manière dont sont prises en compte les conditions aux bords de la boîte.

Remplissage du hamiltonien pour un triplet donné Dans une forme simplifiée de notre équation du champ-moyen⁷, celle-ci peut s'écrire :

$$A_4(r)R_{n\ell j}^{(4)} + A_3(r)R_{n\ell j}^{(3)} + A_2(r)R_{n\ell j}^{(2)} + A_1(r)R_{n\ell j}^{(1)} + A_0(r)R_{n\ell j} = \epsilon_{n\ell j} R_{n\ell j}. \quad (5.115)$$

Cette équation fait intervenir des dérivées jusqu'à l'ordre 4 aussi bien pour la fonction radiale R_α qu'à l'intérieur des coefficients A_i (dérivées des densités). On définit donc des formules de différence finies pour le calcul de l'ensemble des dérivées. Nous avons vu que les coefficients sont composés de densités qui dépendent de r . On définit donc ceux-ci pour chacun des points de l'espace. Ces coefficients n'agissent pas que sur la fonction d'onde, mais également sur ses dérivées. On définit, par les formules de différences finies, les densités qui sont nécessaires. Pour Skyrme N2LO, on définit donc les dérivées jusqu'à l'ordre 4 :

```

d1_7p = (/ -1, 9, -45, 0, 45, -9, 1 /) / dr / 60.0d0
!
d2_7p = (/ 2, -27, 270, -490, 270, -27, 2/) / dr**2 / 180.0d0
!
d3_7p = (/ 1, -8, +13, 0, -13, +8, -1 /) / dr**3 / 8.0d0
!
d4_7p = (/ -1, 12, -39, 56, -39, 12, -1 /) / dr**4 / 6.0d0

```

où dr correspond au pas dans le programme. On choisit de prendre les dérivées centrales car celles-ci fournissent d'une meilleure précision. Par exemple, pour une dérivée seconde à 5 points, l'incertitude sur la formule centrale est de $dr^6/180$ alors que les formules décalées ont une précision de $dr^5/24$ [128]. On prend les dérivées à 7 points car les dérivées à davantage de points n'apportent que peu de précision supplémentaire,

7. on ne considère pas les termes centrifuges ou spin-orbite pour la clarté de l'exposé.

que 7 points sont nécessaire si nous désirons implémenter Skyrme N3LO. Comme le nombre de points de la dérivée est relié à la taille de la matrice à diagonaliser, augmenter le nombre de points augmenterait également le temps de calcul.

Pour remplir le hamiltonien H, il suffit maintenant de procéder ligne par ligne. Nous excluons les trois premières lignes en expliquant pourquoi dans le prochain paragraphe. Par exemple, la contribution d'un coefficient quelconque à la ième ligne sera donnée par :

$$(A_n(i) * dn_7p(1), A_n(i) * dn_7p(2), A_n(i) * dn_7p(3), \\ A_n(i) * dn_7p(4), A_n(i) * dn_7p(5), A_n(i) * dn_7p(6), A_n(i) * dn_7p(7)) \quad (5.116)$$

Le coefficient en rouge est la contribution qui se trouve sur la diagonale. La matrice obtenue est donc une matrice diagonale "par bande" où la largeur de la bande correspond au nombre de points de la dérivée.

Conditions initiales Le choix de la méthode numérique a été conditionné par la recherche des conditions initiales pour notre problème. L'équation du champ-moyen de Skyrme NLO est une équation du deuxième ordre, et nécessitait donc deux conditions initiales pour trouver une solution unique. Les choix usuels consistaient à fixer $R_\alpha(r \rightarrow 0) = r^{\ell+1}$ et $R_\alpha(R_b) = 0$ où R_b est la rayon de la boîte. Pour Skyrme N2LO, il a donc été nécessaire de trouver deux nouvelles conditions initiales pour résoudre le système. Nous avons opté pour les conditions sur les dérivées qui s'intègrent naturellement à la méthode de Hooverman.

Il a en effet été rappelé à plusieurs reprises dans ce manuscrit que le comportement de la fonction d'onde à l'origine est $r^{\ell+1}$. Sous cette hypothèse, le comportement au niveau du bord de la boîte est bien défini, et correspond à ce qui est présenté sur la figure 5.15.

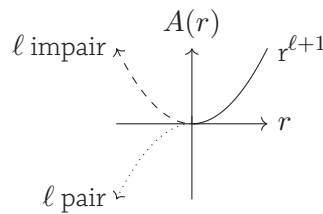


Figure 5.15 – Hypothèses sur les conditions initiales d'une fonction d'onde à l'origine.

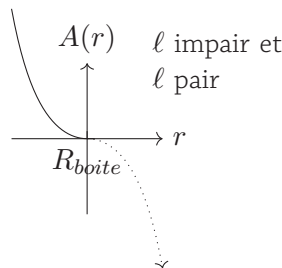


Figure 5.16 – Hypothèses sur les conditions initiales au bout de la boîte.

Seulement, la fonction d'onde n'intervient pas directement dans le remplissage de l'hamiltonien. La solution pour prendre en compte ces conditions aux bords a été de symétriser ou anti-symétriser les dérivées

des différences finies suivant la valeur de ℓ . Voyons un exemple concret de l'utilisation de cette méthode avec l'oscillateur harmonique dans la section suivante.

5.4.2 Application de la méthode de Hooverman au cas pratique de l'oscillateur harmonique

Pour expliciter la méthode, prenons le cas simple de l'oscillateur harmonique. Son hamiltonien est :

$$\hat{H}\Phi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Phi(r) + \frac{m\omega^2}{2}r^2\Phi(r) = E\Phi(r) \quad (5.117)$$

Dans notre cas particulier, on prendra la masse moyenne des nucléons, à savoir $\frac{m_n+m_p}{2} = 938.9187125$ MeV c^2 . Afin de simplifier la lecture des résultats, on choisit $\hbar = 1$.

Traitement de la dérivée La première étape est de symétriser les dérivées à l'origine. Ici, seule la dérivée seconde intervient. La dérivée centrale à 7 points s'approximera en utilisant :

$$d2_{7p} = (/2, -27, 270, -490, 270, -27, 2/) \frac{dr^2}{180} \quad (5.118)$$

Cela signifie qu'une fonction u aura pour dérivée seconde, au premier point du réseau⁸ :

$$u''_1 = (2u_{-3} - 7u_{-2} + 270u_{-1} - 490u_1 + 270u_2 - 7u_3 + 2u_4) \frac{1}{180dr^2} \quad (5.119)$$

Comme nous sommes sur le premier point du réseau, les trois points -3 , -2 et -1 n'existent pas dans la boîte. Pour autant, grâce à l'hypothèse formulée sur la figure 5.15, on peut raisonner sur la parité de la fonction à l'origine :

- si la fonction est paire, $u_{-3} = u_3$, $u_{-2} = u_2$ et $u_{-1} = u_1$: On obtient alors pour la dérivée seconde du premier point

$$u''_1 = -220u_1 + 243u_2 - 25u_3 + 2u_4$$

et des deux suivants :

$$u''_2 = 243u_1 - 488u_2 + 270u_3 - 27u_4 + 2u_5$$

$$u''_3 = -25u_1 + 270u_2 - 490u_3 + 270u_4 - 7u_5 + 2u_6$$

- si la fonction est impaire, $u_{-3} = -u_3$, $u_{-2} = -u_2$ et $u_{-1} = -u_1$: On obtient alors pour la dérivée seconde des trois premiers points

$$u''_1 = -760u_1 + 297u_2 - 29u_3 + 2u_4$$

$$u''_2 = 297u_1 - 492u_2 + 270u_3 - 27u_4 + 2u_5$$

$$u''_3 = -29u_1 + 270u_2 - 490u_3 + 270u_4 - 7u_5 + 2u_6$$

8. Pour la lisibilité, on omet le dénominateur dans la suite du développement et les points du réseau sont numérotés par des indices.

Ensuite, les coefficients dans le hamiltonien seront ceux présentés en (5.118). On se retrouve néanmoins avec le même problème de l'autre côté de la boîte. En effet, le dernier point a pour dérivée :

$$u''_N = 2u_{N-3} - 7u_{N-2} + 270u_{N-1} - 490u_N + 270u_{N+1} - 7u_{N+2} + 2u_{N+3}.$$

Les trois points $N + 1$, $N + 2$ et $N + 3$ ne sont pas dans la boîte. On sait qu'à ce stade, la fonction d'onde est supposée être nulle. Il est donc possible de fixer ces points à 0. Dans le cas où la fonction arrive avec une incidence non nulle, nous avons préféré une solution plus conservative (5.16) en supposant la fonction impaire. Bien sûr, cela n'a pas d'effet si elle est déjà nulle. Les équations étant identiques, il suffit de reprendre les coefficients obtenus pour la fonction impaire, et de les renverser.

$$\begin{aligned} u''_N &= 2u_{N-3} - 29u_{N-2} + 297u_{N-1} - 760u_N \\ u''_{N-1} &= 2u_{N-4} - 27u_{N-3} + 270u_{N-2} - 492u_{N-1} + 297u_N \\ u''_{N-2} &= 2u_{N-5} - 27u_{N-4} + 270u_{N-3} - 490u_{N-2} + 270u_{N-1} - 29u_N \end{aligned}$$

On considère ces coefficients à la fois pour la dérivée paire et impaire.

Remplissage de la matrice du Hamiltonien On peut maintenant résoudre l'équation (5.117). En fixant $\omega = 1 \text{ c fm}^{-1}$, la première ligne du l'hamiltonien, dans le cas où l'on considère la dérivée paire s'écrit :

$$\text{ham}(1,1:4) = (220 / b + m r(1)/2 , - 243 / b , 25 / b , - 2 / b)$$

où m est la masse moyenne des nucléons, $r(1) = 0.001/2^9$ est le premier point du réseau et $b = 2m \times 180 dr^2$. Le reste de la ligne est égale à 0. On remarquera que les coefficients changent de signes à cause du signe moins dans l'hamiltonien. On donne encore l'exemple de la deuxième ligne :

$$\text{ham}(2,1:5) = (-243 / b , 488 / b + m r(2)/2 , - 270 / b , 27 / b , - 2 / b)$$

De manière générale, excepté aux bords de la boîte, on remplira donc pour la ligne i les colonnes $i-3$ à $i+3$ (pour les dérivées à 7 points). Les autres colonnes seront égales à 0. Les termes associés aux dérivées de fonctions d'ondes contribueront sur toute la largeur, tandis que les termes associés à la fonction d'onde ne contribueront que sur la diagonale :

$$\text{ham}(i,i-3:i+3) = (-2 / b , 27 / b , - 270 / b , 490 + m r(i)/2 , - 270 / b , 27 / b , - 2 / b)$$

Résultats Pour illustrer la méthode, on considère le cas où $N=600$ points pour notre matrice et un pas dr de 0.001 fm pour notre code. On sait que les énergies propres de l'oscillateur harmonique sont :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), n \text{ entier} \geq 0 \quad (5.120)$$

Comme on a choisit de prendre une valeur de 1 pour ω et \hbar , on s'attend donc à obtenir $E_n = n + \frac{1}{2}$. On sait aussi que la parité des fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique est la même que n . Les résultats

9. Notre maillage est décalé pour éviter le coeur à $r=0$.

figurent dans le tableau 5.1. On peut y voir que les 12 premiers états sont reproduits avec une précision allant jusqu'à 10^{-7} pour les premières énergies. On note également que la précision décroît ensuite. La raison est le nombre élevé de points qui implique l'existence à hautes énergies (jusqu'à 3 GeV ici) qui polluent, lors de la diagonalisation, les états de plus basse énergie. C'est malgré tout une condition nécessaire pour diminuer le pas, et ainsi avoir une meilleure résolution en énergie. En effet, les dérivées sont par exemple plus précises à mesure que le pas est petit, comme nous l'avons vu dans le paragraphe précédent. Notons également que, dans les calculs de noyaux, nous répétons ce processus pour chaque triplet (ℓ, j, q) , et que pour chacun de ces triplets, on ne remplira effectivement que les deux ou trois premiers états liés les plus profonds obtenus. Or, une précision de 10^{-7} sur les états de particules individuelles est suffisante.

Énergies avec dérivée paire	Énergies avec dérivé impaire
0.49999999081749597	1.4999999357422940
2.4999997705349926	3.4999994218164829
4.4999988162538784	5.4999978805569754
6.4999965414724556	7.4999947257932718
8.4999923603544403	9.4999893720401474
10.499985687761750	11.499981234489667

Table 5.1 – 12 premières énergies obtenues par la méthode de Hooverman avec $\omega = 1$ et $\hbar=1$

Inconvénients de la méthode de Hooverman La méthode d'Hooverman, en dépit de sa simplicité, possède quatre inconvénients :

- si l'on considère un boîte avec 200 points, pour chaque onde partielle, on génère 200 énergies et 200 fonctions d'ondes. Parmi les énergies, seules trois ou quatre seront négatives. Cela signifie qu'un grand nombre d'états pouvant atteindre une énergie de 1 GeV ne sera pas liés. On a constaté que dans le processus itératif, ces états pouvaient polluer la diagonalisation au fil des itérations, et altérer significativement les résultats, entraînant surtout des problèmes de convergences de l'énergie. Nous avons mis en place la méthode à deux bases du paragraphe suivant principalement pour supprimer cette pathologie.
- en raison de la symétrisation des dérivées à l'origine, les matrices à diagonaliser ne sont pas symétriques. Cela signifie que l'on doit employer des routines qui prennent plus de temps de calcul et être moins précises à cause du grand nombre d'opérations numériques à effectuer. Nous avons néanmoins testé Skyrme NLO (dont l'asymétrie est faible car les contributions des dérivées dans l'hamiltonien sont moindres) avec une routine pour les matrices symétriques et pour les matrices générales, et nous n'avons pas constaté de baisse de précision. Cet inconvénient est également pallié par la méthode à deux bases.
- pour une itération, il est nécessaire de diagonaliser jusqu'à 20 matrices de dimension 200 x 200, ces matrices n'étant pas symétriques. Le temps de calcul ($\simeq 3$ min pour un ^{40}Ca) avec la méthode de Hooverman en l'état n'était donc pas compatible avec un ajustement de l'interaction Skyrme N2LO. L'utilisation de la méthode à deux bases a permis d'accélérer considérablement le programme, pour permettre un ajustement.
- l'hypothèse de symétrisation de la dérivée par parité de la fonction d'onde est vraie si la résolution dans l'espace est suffisamment élevée. Dans notre cas, le pas est toujours suffisamment faible (≤ 0.3 fm) pour que nous n'ayons rien constaté invalidant cette hypothèse. Une étude de l'influence du pas

sera proposée dans la section 5.4.4.

Pour autant, celle-ci à l'avantage d'être modulaire et de pouvoir a priori résoudre des équations différentielles d'ordre 4, voire d'ordre 6 dans la perspective de Skyrme N₃LO. L'appariement a également été facile à implémenter étant donné que nous travaillons déjà avec une matrice. Enfin, le programme en espace r est précis et permet de mieux détecter les instabilités qu'avec un calcul sur une base.

5.4.3 Utilisation d'une méthode à deux bases

Pour pallier aux inconvénients de la méthode de Hooverman, nous avons implémenté la possibilité de diagonaliser la matrice dans une autre base que la base r . Comme on utilise des fonctions Woods-Saxon pour initialiser le système, notre choix s'est porté sur ces mêmes fonctions. La structure du code incorporant cet aspect est représenté sur la figure 5.17.

A l'issue de la première itération, le programme a déterminé les valeurs propres et les vecteurs propres pour des coefficients de l'équation différentielle Skyrme NLO calculés avec des fonctions de Woods-Saxon. On définit alors une énergie de coupure, qui indiquera au programme qu'il ne doit conserver que les fonctions d'ondes dont l'énergie est inférieure à cette valeur. L'avantage d'effectuer la diagonalisation dans une telle base est donc de pouvoir tronquer une partie des fonctions d'onde, et notamment les états à haute énergie non liés qui apparaissent avec un grand nombre de points dont nous avons discuté auparavant. Lors de la seconde itération, le programme remplit le hamiltonien dans la base r , comme précédemment. A l'issue du remplissage, il utilise les fonctions d'onde de Woods-Saxon stockées lors de la première itération pour passer dans une base de Woods-Saxon. Par exemple, pour une coupure à 300 MeV, la matrice qui était auparavant une matrice 200 x 200 devient ainsi une matrice de dimension 20 x 20. Cette matrice étant par définition diagonale dans la base Woods-Saxon, on peut alors utiliser une routine plus précise et plus rapide que pour le cas général. Une fois la diagonalisation effectuée, on obtient les énergies de particules individuelles (qui sont les mêmes indépendamment de la base) et les fonctions d'ondes dans la base Woods-Saxon. On refait un dernier changement de base pour les remettre dans la base r , pour calculer les densités, les coefficients de l'équation différentielle et l'énergie issue de la fonctionnelle.

Pour accélérer la procédure et converger plus rapidement, il est possible d'utiliser à chaque itération les fonctions d'ondes de l'itération précédente pour le changement de base. Il est aussi possible d'utiliser un mélange de fonctions d'ondes, dans l'esprit de ce qui est fait pour les champs. Cette fonctionnalité a été implémentée dans le code, mais n'a pas encore été rigoureusement testée.

Dans la sous-section suivante, nous présentons des tests numériques effectués avec WHISKY₂.

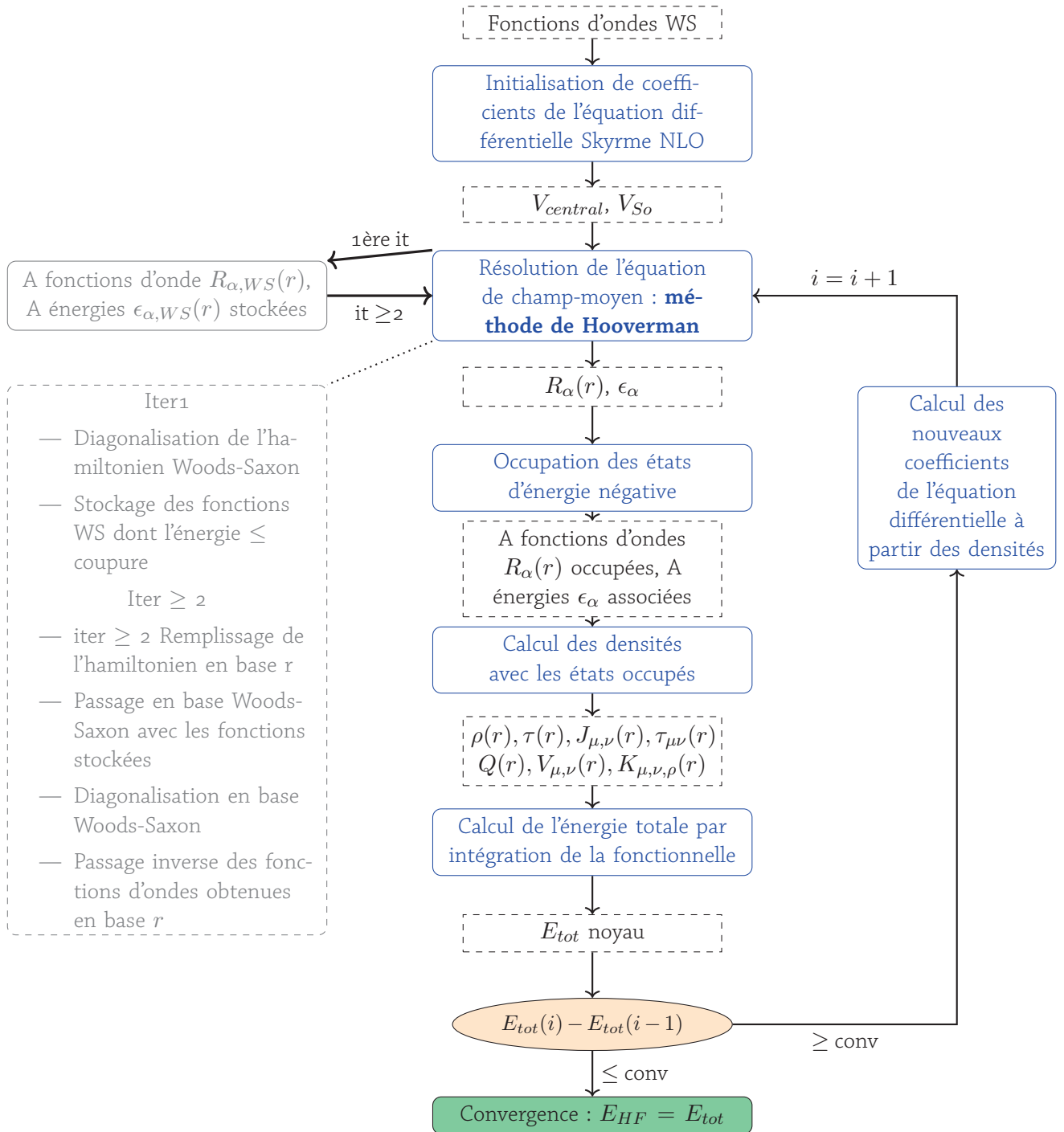


Figure 5.17 – Structure du programme WHISKY2 avec la méthode à deux bases. Le paramètre *conv* correspond à la convergence requise, typiquement de l'ordre de 10^{-13} dans notre cas. L'indice *i* correspond à l'itération en cours et *A* au nombre de nucléons du noyau calculé. E_{tot} correspond à l'énergie de liaison du noyau.

5.4.4 Tests numériques effectués avec WHISKY2

Influence du pas Nous avons conservé la taille de la boîte fixe en faisant varier le pas (et par conséquent le nombre de points). C'est un test important car le pas intervient dans les dérivées des fonctions du programme (voir Eq.(5.118)). Les résultats sont tabulés dans le tableau 5.2. Il est possible d'y voir que les énergies de liaison du ^{40}Ca restent compatibles entre elles à moins de 100 keV. Les calculs avec un pas faible nécessitent un grand nombre de points, signifiant la manipulation de grandes matrices qui sont coûteuses en mémoire et en temps de calcul. Nous adopterons donc un pas par défaut de 0.05 dans le cadre de l'ajustement des paramètres. Cela correspond à un compromis entre la précision (de l'ordre du keV) et un nombre de points raisonnables (400 ici).

Pas [fm]	Nombre de points	Énergie [MeV]
0.02	1000	-344.262616
0.03	500	-344.261710
0.05	400	-344.261031
0.075	300	-344.258959
0.1	200	-344.255373
0.2	100	-344.232758
0.3	67	-344.195620

Table 5.2 – Influence de la valeur du pas pour un noyau de ^{40}Ca dans le code WHISKY2.

Les observations du tableau 5.2 restent vérifiées pour les autres noyaux que nous avons déjà calculés.

Influence de la taille de la boîte Nous avons fixé le pas à 0.1 fm, et nous avons fait varier le nombre de points de 100 à 800, afin de faire varier la taille de la boîte. Les résultats sont tabulés dans le tableau 5.3.

Nombre de points	Énergie ^{40}Ca [MeV]	Énergie ^{208}Pb [MeV]
80	-343.750395	-1331.464065
100	-344.240585	-1624.895640
120	-344.255141	-1635.244691
140	-344.255759	-1635.646497
160	-344.255840	-1635.668268
180	-344.255209	-1635.669755
200	-344.255374	-1635.669936
400	-344.255528	-1635.669850
800	-344.255409	-1635.669807

Table 5.3 – Influence de la taille de la boîte pour un noyau de ^{40}Ca et un noyau de ^{208}Pb avec un pas fixe de 0.1 fm dans le code WHISKY2.

Pour calculer le rayon d'un noyau, on a fait l'hypothèse que celui-ci possède une densité constante et une surface "abrupte" [27]. On peut alors écrire $R_{\text{noyau}} = 1,2 A^{1/3}$ fm. On estime ainsi le rayon du ^{40}Ca à environ 4 fm et celui du ^{208}Pb à environ 7 fm. Pour qu'un code numérique Hartree-Fock donne un résultat correct, on considère généralement que la taille de la boîte doit être le double de ces valeurs. En effet, il convient de ne pas couper artificiellement la queue des fonctions d'onde, ce qui impliquerait des instabilités numériques, et éventuellement la non-conservation du nombre de particules. Ces rayons correspondent à un nombre de

points respectivement égal à 80 et 140. On se rend compte que le code ne parvient évidemment pas à calculer le plomb avec 80 points, la boîte n'étant pas assez grande. On voit aussi que les énergies de liaison restent précises au MeV près sur les tailles de boîte "raisonnables" testées. Une fois la boîte suffisamment grande, on constate que l'on obtient une précision au keV près, et qu'une taille déraisonnablement grande de boîte (80 fm) ne modifie que l'énergie de liaison de l'ordre du dixième de keV. On peut donc prendre par défaut la valeur du ^{208}Pb sans voir se détériorer les énergies de noyaux plus légers lors de l'ajustement des paramètres.

Vérification de la cohérence des calculs Afin de vérifier la cohérence de nos calculs, nous avons calculé numériquement les 2 membres de l'équation ci-dessous qui découle de la théorie Hartree-Fock :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} - \frac{1}{2} e_{kin} + \frac{1}{3} E_{Coul}^{ExSlater} - 2\pi \int_0^{\infty} r^2 dr \alpha \rho_0^{\alpha} \left[C_{-}^{(3),\rho} \rho_0^2 + 2C_{1}^{(3),\rho} \rho_q^2 \right], \quad (5.121)$$

où ϵ_{α} est une somme sur les énergies de particules individuelles des états occupés, $E_{Coul}^{ExSlater}$ est l'énergie d'échange de Coulomb calculée avec l'approximation de Slater. Les constantes de couplages $C_{-}^{(3),\rho}$ correspondent aux constantes de couplages C_{-}^{ρ} dans l'annexe D.1, mais où on ne conserve que la partie dépendant du paramètre t_3 .

Cette formule est d'ailleurs parfois utilisée comme critère de convergence dans les procédures Hartree-Fock. Elle permet de s'assurer qu'il y a un accord entre les termes de la fonctionnelle et les coefficients de l'équation différentielle. On rappelle en effet que ces derniers sont issus des premiers. La formule ci-dessus permet donc de tester la procédure *self-consistent* du code. Cette formule est la même que pour Skyrme NLO, nos nouveaux termes n'ajoutant pas de dépendance en densité dans l'interaction.

Noyau	Énergie avec fonctionnelle [MeV]	Equation 5.121 [MeV]	Précision [MeV]
^{12}C	-90.5873906	-90.5873897	-0.8720E-06
^{16}O	-128.4978150	-128.4978150	0.2723E-07
^{40}Ca	-344.2617066	-344.2617066	0.3114E-08
^{42}Ca	-362.5384447	-362.5384447	0.1211E-07
^{48}Ca	-417.9110244	-417.9110245	0.3680E-07
^{208}Pb	-1635.6934814	-1635.6934813	-0.8060E-07

Table 5.4 – Précision de la l'équation 5.121 dans le code WHISKY2 pour SLy4.

Il est possible de voir dans le tableau 5.4 que WHISKY2 est robuste lors du calcul de la formule (5.121) pour l'interaction SLy4, pour une précision de l'ordre du centième de keV en moyenne.

Pour une interaction test de Skyrme N2LO, on obtient les résultats dans le tableau 5.5.

Noyau	Énergie avec fonctionnelle [MeV]	Equation 5.121 [MeV]	Précision [MeV]
^{12}C	-86.0767889	-86.0767885	-0.3807E-06
^{16}O	-123.7275611	-123.7275617	0.5441E-06
^{40}Ca	-330.1861934	-330.1861943	0.8442E-06
^{42}Ca	-347.1701037	-347.1701045	0.8783E-06
^{48}Ca	-398.2264743	-398.2264753	0.9578E-06
^{208}Pb	-1539.5928629	-1539.5928641	0.1151E-05

Table 5.5 – Précision de l'équation (5.121) dans le code WHISKY2 avec une interaction test Skyrme N2LO.

Pour être sûr de notre résultat, il est nécessaire d'avoir une différence de l'ordre du dixième de keV entre les deux membres de l'équation. On voit que c'est toujours le cas pour Skyrme N2LO, bien que l'on constate une baisse de la précision à cause de la présence des dérivées d'ordres supérieurs.

Influence de la coupure en énergie dans la base Woods-Saxon Sur la figure 5.18, on a représenté la précision obtenue sur l'énergie du noyau en fonction de la coupure choisie pour la base Woods-Saxon. La valeur de l'énergie de référence pour l'interaction SLy4 est obtenue avec le programme lenteur [129]. On constate qu'une valeur raisonnable pour la coupure est 200 MeV. Cette valeur correspond à une base contenant 20 fonctions d'ondes de Woods-Saxon environ et permet de rendre le code numérique significativement plus rapide que pour une coupure à 1 GeV (200 fonctions d'ondes).

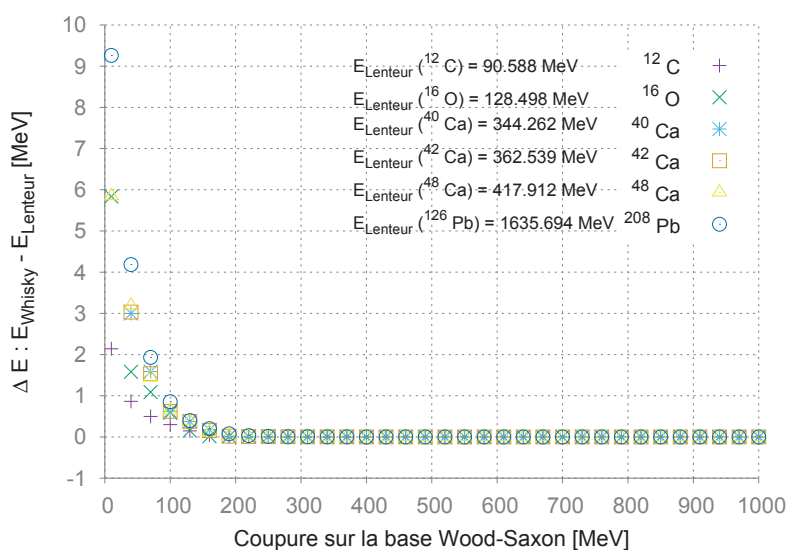


Figure 5.18 – Différence d'énergie obtenue pour SLy4 avec le code lenteur en fonction de la coupure dans la base Wodd-Saxon utilisée dans le calcul Hartree-Fock pour des noyaux de masses variées.

Pour pouvoir exclure qu'une valeur si faible de coupure a un impact significatif, nous avons également étudié l'évolution de la précision de la formule (5.121) en fonction de la coupure, qui est représentée sur la figure 5.19. On constate que si l'évolution est moins progressive, une coupure de 200 MeV est satisfaisante pour ne plus avoir de grandes variations. Malgré tout, nous avons choisi pour nos calculs dans les noyaux, et notamment dans l'ajustement de Skyrme N2LO, une valeur plus conservatrice de 300 MeV, afin d'éviter une éventuelle influence sur les états de particules individuelles, a priori exclue par la figure 5.19.

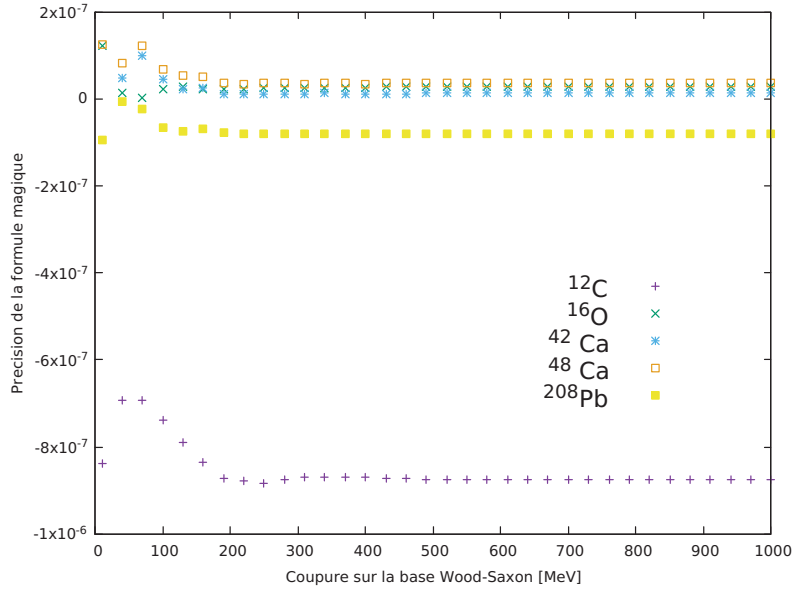


Figure 5.19 – Précision sur l'équation (5.121) pour SLy4 en fonction de la coupure dans la base Woods-Saxon utilisée dans le calcul Hartree-Fock de WHISKY2 pour des noyaux de masses variées.

Comportement de la queue de la densité de particule Nous avons étudié le comportement de la queue de la densité de particules. Celle-ci est en effet la somme des fonctions d'ondes occupées et permet de s'assurer que les conditions asymptotiques de ces dernières au bord de la boîte sont correctes. Il est possible de voir sur la figure 5.20 que c'est effectivement le cas lorsque nous prenons une coupure à 0 MeV. Ainsi, la densité ρ_0 décroît continuellement jusqu'à 10^{-16} fm^{-3} , voir 10^{-20} fm^{-3} pour le ^{48}Ca .

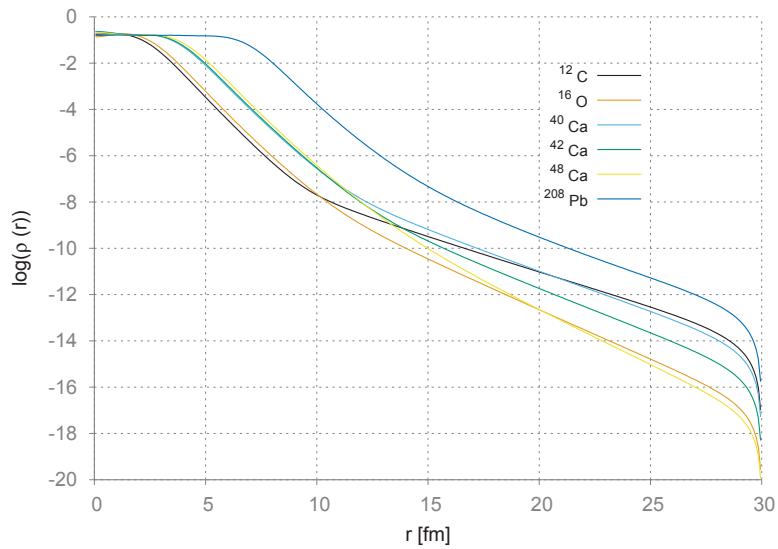


Figure 5.20 – Densité de particule totale ρ_0 obtenue avec SLy4 tracée en échelle semi-logarithmique en fonction de r . La coupure de la base Woods-Saxon a été fixée à 0 MeV. On néglige donc les états de diffusion.

En revanche, dans le cas où la coupure est non nulle (figure 5.21), on voit apparaître des oscillations vers

10^{-16} fm^{-3} . On peut faire deux hypothèses concernant ces oscillations :

- l'hypothèse de symétrie impaire sur le bord de la boîte pour le calcul des dérivées est trop forte et entraîne des oscillations. Nous avons essayé d'écarter la dépendance de taille de la boîte en traçant les courbes dans une boîte plus grande que nécessaire pour les noyaux, et l'on voit que sur la figure 5.20 que les oscillations continuent avec une légère tendance à la baisse.
- les états non liés polluent la queue des fonctions d'onde lors de la diagonalisation de la matrice. Il s'agirait alors d'un effet résiduel du constat que nous avons effectué sur la méthode d'Hooverman avant l'implémentation de la méthode à deux bases. Des tests sont actuellement effectués pour valider cette hypothèse.

Nous avons néanmoins vu précédemment que ces oscillations ne nous empêchent pas d'avoir des valeurs raisonnables de l'énergie en considérant une coupure en énergie de 300 MeV.

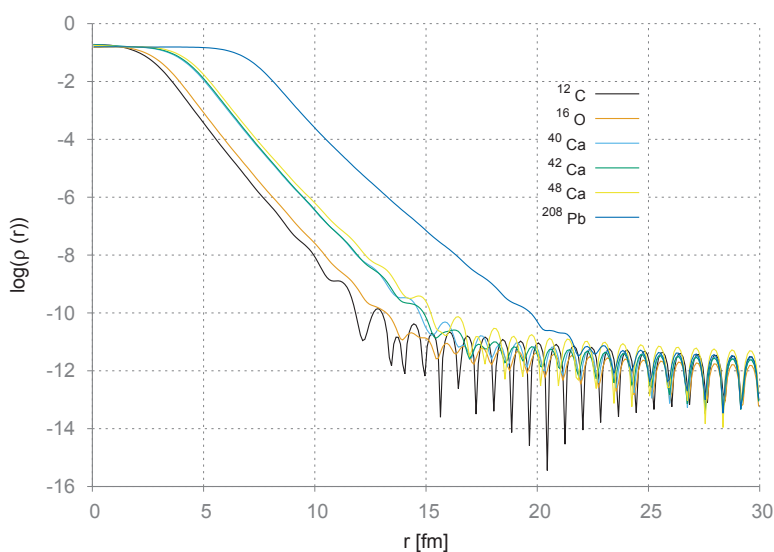


Figure 5.21 – Densité de particule totale ρ_0 obtenue avec SLy4 tracée en échelle semi-logarithmique en fonction de r . La coupure de la base Woods-Saxon a été fixée à 300 MeV.

Comparaison des résultats avec les programmes *lenteur* et MOCCA Nous avons comparé les résultats obtenus avec WHISKY2 à deux autres codes permettant le calcul avec des interactions de Skyrme :

- *lenteur* [129] peut calculer les interactions de Skyrme NLO à l'approximation HF et HFB en symétrie sphérique. Celui-ci utilise, comme WHISKY2, une méthode à deux bases. Les équations Hartree-Fock sont résolues par un algorithme de Numerov. On obtient alors une base de fonctions d'onde qui est ensuite utilisée pour passer dans une base où l'on pourra diagonaliser l'hamiltonien de champ moyen et résoudre les équations Hartree-Fock-Bogoliubov.
- MOCCa [130] est un code qui effectue des calculs Hartree-Fock dans une base en trois dimensions, et qui peut prendre en compte les brisures de symétrie. Il incorpore l'appariement et décrit les noyaux déformés. Il est possible de l'utiliser pour faire des calculs en utilisant des interactions de Skyrme NLO, N2LO et N3LO.

Comme pour les précédents tests, nous utiliserons l'interaction SLy4. La comparaison a porté sur l'énergie de liaison, mais aussi sur les énergies des différentes parties de la fonctionnelle, pour des noyaux sphériques :

^{12}C , ^{16}O , ^{40}Ca , ^{48}Ca , ^{208}Pb . Les résultats pour Skyrme NLO comparés avec ceux de *lenteur* peuvent être trouvés dans le tableau 5.6. Le pas et la taille de la boîte sont les mêmes dans les deux codes, respectivement 0.1 fm et 20 fm. Les énergies sont calculées en intégrant les termes de la densité d'énergie \mathcal{E} (5.9). Il est possible d'y voir que la plupart des énergies sont en accord à 1 keV près. Il en est de même pour la valeur du rayon total du noyau, calculé par une intégrale sur la densité de particules ρ_0 . MOCCa est également en accord avec ces valeurs avec une précision analogue, nous l'avons omis par soucis de lisibilité.

Dans un deuxième temps, nous avons également comparé les résultats pour les termes de la fonctionnelle de Skyrme N2LO avec MOCCa. Les valeurs numériques correspondent à la somme de la partie isoscalaire ($t=0$) et isovectorielle ($t=1$) pour chaque terme de (5.25). Nous ne présentons dans le tableau 5.7 que l'énergie totale et les termes de la fonctionnelle N2LO.

La comparaison a été faite avec une interaction test (non ajustée) présentée ci-dessous.

&skf

```
name = "Sly4N2LO5",
t0=-2488.913, x0=0.834, t1=486.818, x1=-0.344, t2=-546.395,
x2=-1.000, t3=13777.0, x3=1.354, t14=24.3409, x14=-0.344,
t24=-27.31975, x24=-1.000,
w = 123.00, sigma_n = 1.0, sigma_d = 6.0, j2terms = .false.,
hb2m = 20.73553, tt = 0.0, tu = 0.0, icoul = 1,jcm=1 /
```

Il s'agit de l'interaction SLy4 à laquelle on a ajouté des paramètres N2LO directs t_{14} et t_{24} égaux à 5% de leurs paramètres analogues N1LO t_1 et t_2 . Les paramètres d'échange de Skyrme N2LO sont pris égaux à ceux de leur analogue N1LO. On ne s'attend évidemment pas à ce que cette expression ait de bonnes propriétés et donne de bons résultats. Les paramètres N2LO ayant un ordre de grandeur de différence avec les paramètres N1LO, on s'attend malgré tout à ce que les calculs Hartree-Fock convergent toujours, N2LO apparaissant ici comme une simple perturbation. On renvoie à l'équation (5.9) pour voir à quoi correspondent les termes de

Table 5.6 – Comparaison des résultats obtenues par WHISKY2 et lenteur pour SLy4.

Noyau	Termes	Énergie WHISKY2 [MeV]	Énergie lenteur [MeV]	$E_{Whisky} - E_{lenteur}$ [MeV]
¹² C l'énergie.	Énergie totale	-90.587684	-90.587726	4.2e-05
	Énergie cinétique	180.357892	180.358014	-1.22e-04
	Énergie champ	-257.940706	-257.940837	1.31e-04
	Énergie spin-orbite	-21.063265	-21.063300	3.5e-05
	Énergie Coulomb direct	10.160996	10.160998	-2e-06
	Énergie Coulomb échange	-2.102601	-2.102602	1e-06
	Énergie Fermi n	-16.851250	-16.851254	4e-06
	Énergie Fermi p	-14.115530	-14.115534	4e-06
¹⁶ O	Énergie totale	-128.497955	-128.498002	4.7e-05
	Énergie cinétique	222.071133	222.071263	1.3e-04
	Énergie champ	-363.189588	-363.189767	1.7e-04
	Énergie spin-orbite	-0.960084	-0.960084	0
	Énergie Coulomb direct	16.395325	16.395328	-3e-06
	Énergie Coulomb échange	-2.814741	-2.814741	0
	Énergie Fermi n	-14.536391	-14.536401	1e-05
	Énergie Fermi p	-11.187055	-11.187065	1e-05
⁴⁰ Ca	Énergie totale	-344.2621653	-344.262242	7.67e-05
	Énergie cinétique	635.041779	635.041845	-6.6e-05
	Énergie champ	-1050.117096	-1050.117228	1.32e-04
	Énergie spin-orbite	-1.317341	-1.317348	7e-06
	Énergie Coulomb direct	79.620066	79.620062	4e-06
	Énergie Coulomb échange	-7.489574	-7.489573	-1e-06
	Énergie Fermi n	-15.308939	-15.308939	0
	Énergie Fermi p	-8.361436	-8.361439	3e-06
⁴⁸ Ca	Énergie totale	-417.911644	-417.911766	1.22e-04
	Énergie cinétique	825.899577	825.899573	4e-06
	Énergie champ	-1282.642252	-1282.642382	1.3e-04
	Énergie spin-orbite	-32.342052	-32.342044	-8e-06
	Énergie Coulomb direct	78.589712	78.589718	-6e-06
	Énergie Coulomb échange	-7.416629	-7.416630	1e-06
	Énergie Fermi n	-9.793200	-9.793203	3e-06
	Énergie Fermi p	-16.043603	-16.043603	0
²⁰⁸ Pb	Énergie totale	-1635.688355	-1635.694207	5.85e-02
	Énergie cinétique	3866.272674	3866.186065	8.66e-02
	Énergie champ	-6202.1318	-6202.049371	8.24e-02
	Énergie spin-orbite	-96.443157	-96.444945	1.788e-03
	Énergie Coulomb direct	827.882413	827.882533	-1.2e-04
	Énergie Coulomb échange	-31.268484	-31.268489	5e-06
	Énergie Fermi n	-8.065642	-8.066490	8.48e-04
	Énergie Fermi p	-8.814141	-8.813568	-5.73e-04
Noyau	Termes	r_p WHISKY [fm]	r_p lenteur [fm]	r_p WHISKY - r_p lenteur [fm]
¹² C	Rayon total	2.445721	2.445721	0
¹⁶ O	Rayon total	2.673858	2.673858	0
⁴⁰ Ca	Rayon total	3.396015	3.396015	0
⁴⁸ Ca	Rayon total	3.543211	3.543213	-2e-06
²⁰⁸ Pb	Rayon total	5.554874	5.554991	-1.17e-04

Table 5.7 – Comparaison des résultats obtenues par WHISKY2 et MOCCa pour une interaction test Skyrme N2LO.

Noyau	Termes	Énergie WHISKY2 [MeV]	Énergie MOCCa [MeV]
¹² C	Énergie totale	-86.04315	-86.04380
	Énergie N2LO	4.2058	4.20852
	$E[\Delta\rho\Delta\rho]$	1.3425	1.34333
	$E[\rho Q]$	1.5843	1.58536
	$E[\tau^2]$	0.6655	0.66601
	$E[\tau_{\mu\nu}\tau_{\mu\nu} - \tau_{\mu\nu}\nabla_{\mu}\nabla_{\nu}\rho]$	0.5463	0.54662
	$E[K_{\mu\nu\kappa}K_{\mu\nu\kappa}]$	0.0336	0.03360
	$E[J_{\mu\nu}V_{\mu\nu}]$	0.0336	0.03360
¹⁶ O	Énergie totale	-123.72740	-123.72809
	Énergie N2LO	4.5003	4.50020
	$E[\Delta\rho\Delta\rho]$	1.4680	1.46797
	$E[\rho Q]$	1.6766	1.67664
	$E[\tau^2]$	0.7911	0.79109
	$E[\tau_{\mu\nu}\tau_{\mu\nu} - \tau_{\mu\nu}\nabla_{\mu}\nabla_{\nu}\rho]$	0.5641	0.56405
	$E[K_{\mu\nu\kappa}K_{\mu\nu\kappa}]$	0.0003	0.00027
	$E[J_{\mu\nu}V_{\mu\nu}]$	0.0002	0.00016
⁴⁰ Ca	Énergie totale	-330.185999	-330.18839
	Énergie N2LO	13.2482	13.24798
	$E[\Delta\rho\Delta\rho]$	2.0388	2.03871
	$E[\rho Q]$	5.3804	5.38036
	$E[\tau^2]$	3.2756	3.27562
	$E[\tau_{\mu\nu}\tau_{\mu\nu} - \tau_{\mu\nu}\nabla_{\mu}\nabla_{\nu}\rho]$	2.5528	2.55274
	$E[K_{\mu\nu\kappa}K_{\mu\nu\kappa}]$	0.0004	0.00036
	$E[J_{\mu\nu}V_{\mu\nu}]$	0.0002	0.0002
⁴⁸ Ca	Énergie totale	-397.94796	-397.95040
	Énergie N2LO	18.5714	18.57054
	$E[\Delta\rho\Delta\rho]$	2.5556	2.55576
	$E[\rho Q]$	7.4944	7.49408
	$E[\tau^2]$	4.6423	4.64205
	$E[\tau_{\mu\nu}\tau_{\mu\nu} - \tau_{\mu\nu}\nabla_{\mu}\nabla_{\nu}\rho]$	3.5463	3.54609
	$E[K_{\mu\nu\kappa}K_{\mu\nu\kappa}]$	0.0561	0.05617
	$E[J_{\mu\nu}V_{\mu\nu}]$	0.2767	0.27640
²⁰⁸ Pb	Énergie totale	-1539.25332	-1539.2639
	Énergie N2LO	89.3335	89.36085
	$E[\Delta\rho\Delta\rho]$	4.3943	4.39538
	$E[\rho Q]$	37.4775	37.48899
	$E[\tau^2]$	27.2129	27.22153
	$E[\tau_{\mu\nu}\tau_{\mu\nu} - \tau_{\mu\nu}\nabla_{\mu}\nabla_{\nu}\rho]$	19.8557	19.86176
	$E[K_{\mu\nu\kappa}K_{\mu\nu\kappa}]$	0.0546	0.05461
	$E[J_{\mu\nu}V_{\mu\nu}]$	0.3385	0.33858

On voit que l'accord avec MOCCa sur les termes de Skyrme N2LO se fait en grande majorité à l'ordre du keV. Les densités dans MOCCa sont programmées à partir des formules générales de la section 5.2, tandis

que nous programmons les densités calculées en sphérique. Cet accord nous permet de valider le calcul de nos densités en symétrie sphérique. Nous n'avons pas incorporé le terme $\nabla_\mu J_{\mu\nu}$ car celui-ci est nul en symétrie sphérique, et donc fixé à 0 dans WHISKY2. Le rapport entre les énergies obtenues et la contribution à l'énergie de Skyrme N2LO est d'environ 5% pour chacun des noyaux. On retrouve bien la hiérarchie entre les paramètres dans les contributions à l'énergie.

Remarque générale sur l'influence de Skyrme N2LO sur la densité L'effet d'une paramétrisation N2LO sur les densités se traduit par un gonflement de la partie volumique. Il est possible de voir cet effet sur la figure 5.22. Nous détaillerons les contributions de N2LO dans le chapitre associé à l'ajustement.

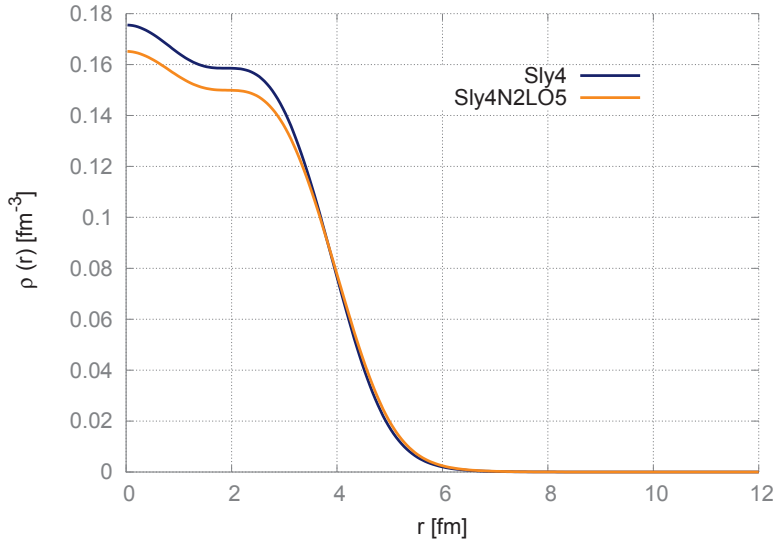


Figure 5.22 – Densité de particule totale ρ_0 obtenue avec Sly4 et l'interaction test Sly4N2LO5 en fonction de r pour un ^{208}Pb .

Nous avons donc testé les performances numériques de WHISKY2 aussi bien du point de vue de sa robustesse que de sa précision. On a pu voir que l'on disposait d'une programme capable de réaliser des calculs Hartree-Fock de manière extrêmement satisfaisante. Cependant, en l'état, celui-ci ne nous permet que de calculer précisément un nombre limité de noyaux, les noyaux doublement magiques. Pour pouvoir décrire, comme on le désirait, un *maximum* de noyau de la charte nucléaire, il était nécessaire d'incorporer l'appariement. Nous allons voir comment nous avons procédé dans la section suivante.

5.4.5 Implémentation de l'appariement dans WHISKY2

Pour implémenter l'appariement dans WHISKY2, on utilise une transformation de Hartree-Fock-Bogoliubov, dont les détails peuvent être trouvés dans [29, 131]. Les équations Hartree-Fock deviennent alors, en symétrie sphérique [132] :

$$[h_q(r) + \mu_F^q + E_{qp}^q] U^{lj,q}(r) - \Delta^q(r) V^{lj,q}(r) = 0, \quad (5.122)$$

$$[h_q(r) + \mu_F^q - E_{qp}^q] V^{lj,q}(r) + \Delta^q(r) U^{lj,q}(r) = 0. \quad (5.123)$$

où $V^{lj,q}(r)$, $U^{lj,q}(r)$ sont les amplitudes des composantes radiales des fonctions d'ondes de quasi-particules. μ_F^q est le potentiel chimique des protons ou des neutrons. L'hamiltonien $h_q(r)$ est toujours le hamiltonien à 1 corps vu précédemment. $\Delta^q(r)$ est le champ associé à l'appariement. Nous avons fait le choix d'implémenter dans un premier temps un terme d'appariement simple [133, 134] de la forme :

$$v^q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V_0^q \left[1 - \eta \left(\frac{\rho_0 \left(\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2} \right)}{\rho_{sat}} \right) \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.124)$$

où $\rho_{sat} = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ et V_0^q nous permet de contrôler l'intensité de l'appariement. Enfin, le paramètre ν nous permet d'utiliser un appariement de volume ($\eta = 0$), de surface ($\eta = 1$) ou mixte ($\eta = \frac{1}{2}$). Les termes de contact présent dans l'interaction de Skyrme entraînent une divergence [135] lors de la résolution de ces équations dans la base HFB. Il est donc nécessaire d'introduire une nouvelle coupure, que l'on fixe à $E_{cut} = 60 \text{ MeV}$ dans l'espace de quasi-particule [136]. Comme nous comptons nous limiter dans un premier temps à des calculs type champ moyen, il n'est pas nécessaire de développer entièrement notre interaction pour avoir la même interaction effective dans les canaux particule-trou et particule-particule [137]. Pour conserver le bon nombre de particules à la fin du calcul, nous utilisons la méthode présentée dans [138]. Nous avons testé les résultats obtenus par notre programme en les comparant à ceux obtenus avec le programme HFBRAD [139]. Nous donnons les résultats pour le ^{120}Sn dans le tableau 5.8 avec l'interaction SLy4.

Table 5.8 – Comparaison des résultats obtenues par WHISKY2 avec l'appariement et le code HFBRAD avec SLy4.

Noyau	Termes	Énergie WHISKY2 [MeV]	Énergie HFBRAD [MeV]
^{120}Sn	Énergie totale	-1018.840	-1018.840
	Énergie cinétique	2176.162	2176.145
	Énergie champ	-3479.784	-3479.773
	Énergie spin-orbite	-49.982	-49.979
	Énergie Coulomb direct	366.711	366.711
	Énergie Coulomb échange	-19.116	-19.116
	Énergie pairing n	-12.831	-12.829
	Énergie pairing p	0.0	-2.585e-010
	Énergie Fermi n	-7.988	-7.988
	Énergie Fermi p	-7.266	-8.269

On peut voir que nos résultats sont en accord avec le programme HFBRAD (avec une précision de la dizaine de keV). On représente la densité ρ_0 et la densité d'appariement $\tilde{\rho}_0$ sur la figure 5.23.

L'ajustement de Skyrme N2LO du chapitre suivant n'a pas été effectué en incorporant l'appariement. Celui-ci engendre en effet un phénomène critique dans l'ajustement : il faut d'une part pouvoir définir et gérer le paramètre de coupure indépendamment pour chaque noyau, et un mauvais traitement de celui-ci peut engendrer des sauts, des discontinuités ou des noyaux qui ne convergent plus. Intégrer les gaps moyens d'appariement comme observables est également compliqué car ceux-ci n'évoluent pas forcément de manière continue, et il est alors compliqué pour la méthode de minimisation de déterminer la direction dans laquelle faire évoluer l'ajustement. L'une des perspectives est bien entendu d'ajouter l'appariement dans la procédure, en incorporant notamment des noyaux sensibles à l'appariement tels que les noyaux ^{44}Ca et ^{132}Sn .

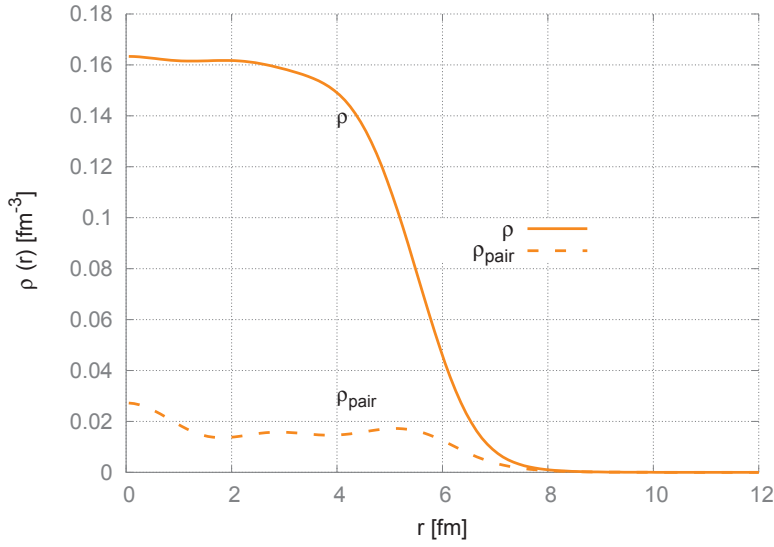


Figure 5.23 – Densité de particule totale ρ_0 (trait plein) et densité de pairing $\tilde{\rho}_0$ (traits interrompus) obtenues avec WHISKY2 en utilisant SLy4, représentés en fonction de r .

5.5 Perspectives sur Skyrme N₃LO pour le calcul de noyaux

En parallèle de la mise au point de la méthode numérique, nous avons développé la fonctionnelle et le calcul des densités pour Skyrme N₃LO. Les résultats préliminaires obtenus sont présentés dans les sous-sections qui suivent.

5.5.1 Fonctionnelle de Skyrme N₃LO

La partie de la fonctionnelle associée à Skyrme N₃LO ne dépendant pas du spin peut-être écrite :

$$\mathcal{E}^{\text{N}_3\text{LO}} = C_0^{(6)\rho} h_0^{(6)} + C_1^{(6)\rho} h_1^{(6)} + C_0^{(6)\Delta\Delta\Delta\rho} \rho_0 \Delta\Delta\Delta\rho_0 + C_1^{(6)\Delta\Delta\Delta\rho} \rho_1 \Delta\Delta\Delta\rho_1$$

avec les expressions

$$\begin{aligned} h_t^{(6)} = & -6V_t^2 - (\Delta\mathbf{j}_t)^2 - \frac{3}{2}\mathcal{T}_t\Delta\rho_t + \frac{3}{2}\tau_t\Delta\Delta\rho_t + \rho_t \mathcal{S}_t\mathcal{T}_t + 3\tau_t\mathcal{T}_t - \frac{3}{2}\mathcal{T}_t\Delta\tau_t - 6\mathbf{j}_t \cdot \mathcal{S}\mathbb{V}_t \\ & - 2\mathbb{V}_{t,\eta,\mu\nu}^2 - 2\mathbb{V}_{t,\eta,\mu\nu}\mathbb{V}_{t,\eta,\nu\mu} + 6V_t \cdot \Delta\mathbf{j}_t \\ & + 6\mathcal{T}_{t,\mu\nu}(\tau_{t,\mu\nu} + \tau_{t,\nu\mu}) - \frac{3}{2}(t, \tau_{\mu\nu} + \tau_{t,\nu\mu})\Delta\tau_{t,\mu\nu} + (\mathbb{V}_{t,\eta,\mu\nu} + \mathbb{V}_{t,\eta,\nu\mu})\nabla_\mu\nabla_\nu\mathbf{j}_{t,\eta} + 3\rho_t\nabla_\mu\nabla_\nu\mathcal{T}_{t,\mu\nu} \\ & + \frac{3}{2}\Delta\rho_t\nabla_\mu\nabla_\nu\tau_{t,\mu\nu} - 3\tau_t\nabla_\mu\nabla_\nu\tau_{t,\mu\nu} \end{aligned} \quad (5.125)$$

Lorsque l'on impose la symétrie sphérique, on ne garde que les contributions paires par renversement du temps, et cette équation devient :

$$\begin{aligned}
h_t^{(6)} &= -\frac{3}{2}\mathcal{T}_t\Delta\rho_t + \frac{3}{2}\tau_t\Delta\Delta\rho_t + \rho_t\mathbb{S}_t\mathcal{T}_t + 3\tau_t\mathcal{T}_t - \frac{3}{2}\tau_t\Delta\tau_t \\
&+ 6\mathcal{T}_{t,\mu\nu}(\tau_{t,\mu\nu} + \tau_{t,\nu\mu}) - \frac{3}{2}(\tau_{t,\mu\nu} + \tau_{t,\nu\mu})\Delta\tau_{t,\mu\nu} + 3\rho_t\nabla_\mu\nabla_\nu\mathcal{T}_{t,\mu\nu} \\
&+ \frac{3}{2}\Delta\rho_t\nabla_\mu\nabla_\nu\tau_{t,\mu\nu} - 3\tau_t\nabla_\mu\nabla_\nu\tau_{t,\mu\nu} - 2\mathbb{V}_{t,\eta,\mu\nu}^2 - 2\mathbb{V}_{t,\eta,\mu\nu}\mathbb{V}_{t,\eta,\nu\mu}, \quad (5.126)
\end{aligned}$$

Ces termes ont déjà été en partie programmés dans WHISKY₂ (dans sa mue vers WHISKY₃) et ont été comparés avec le programme MOCCa en utilisant des fonctions d'ondes de SLy4 après convergence.

5.5.2 Densités de Skyrme N₃LO

Les densités qui interviennent dans la fonctionnelle sont ici présentées dans leur forme générale. On ne donne ici que la partie de la fonctionnelle ne dépendant pas du spin ¹⁰.

$$\begin{aligned}
\mathbb{V}_{q,\alpha,\mu\nu}(\mathbf{r}) &= \nabla_\mu\nabla'_\nu j_{q,\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\
&= \frac{1}{2i}(\nabla_\alpha - \nabla'_\alpha)\tau_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\
\mathcal{T}_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}) &= \nabla \cdot \nabla' \tau_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\
&= \nabla_\mu\nabla'_\nu\tau_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\
\mathbb{S}\mathbb{V}_{q,\mu}(\mathbf{r}) &= \nabla \cdot \nabla' \mathcal{V}_{q,\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\
&= \frac{1}{2i}(\nabla_\mu - \nabla'_\mu)\mathcal{T}_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\
\mathbb{S}\mathcal{T}_q(\mathbf{r}) &= (\nabla \cdot \nabla')^3 \rho_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}
\end{aligned}$$

Pour la partie dépendante du spin, on verra apparaître les densités suivante (dont les notations sont préliminaires) :

$$\begin{aligned}
\mathbb{V}'_{q,\gamma\beta\mu\nu}(\mathbf{r}) &= \nabla_\mu\nabla'_\nu J_{\gamma\beta}(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\
\mathbb{V}''_{q,\mu\nu\beta}(\mathbf{r}) &= \nabla \cdot \nabla' K_{\mu\nu\beta}(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\
\mathbb{S}\mathbb{V}'_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}) &= (\nabla \cdot \nabla')^2 J_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\
\mathbb{S}\mathcal{V}_{q,\mu}(\mathbf{r}) &= (\nabla \cdot \nabla')^3 s_{q,\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}
\end{aligned}$$

L'indice \mathbb{S} désigne des densités auquel on donnera le préfixe "SuperSuper", comme le SuperSupertau pour la densité $\mathbb{S}\mathcal{T}_q$.

10. L'obtention de la partie dépendant du spin est en cours.

Ces densités ont été calculées en symétrie sphérique. Les formules sont détaillées ci-dessous¹¹ :

$$\begin{aligned}
\mathbb{V}_{\alpha,\mu\nu} &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha} \frac{2j+1}{4\pi} \left[(-1)^{\nu} \delta_{\nu,-\rho} \frac{X_{\mu}}{r} - (-1)^{\mu} \delta_{\mu,-\rho} \frac{X_{\nu}}{r} \right] \left\{ \frac{U_{\alpha}'^2}{r} - l(l+1) \frac{U_{\alpha} U_{\alpha}'}{r^2} + l(l+1) \frac{U_{\alpha}^2}{2r^3} \right\} \\
\mathbb{T}_{\mu\nu} &= (-1)^{\mu} \delta_{\mu,-\nu} \sum_{\alpha} \frac{2j+1}{8\pi} \left\{ (2+l+l^2) \frac{U_{\alpha}'^2}{r^2} - 4l(l+1) \frac{U_{\alpha} U_{\alpha}'}{r^3} + l^2(l+1)^2 \frac{U_{\alpha}^2}{r^4} \right\} \\
&\quad + \frac{X_{\mu} X_{\nu}}{r^2} \sum_{\alpha} \frac{2j+1}{8\pi} \left\{ 2U_{\alpha}''^2 + (l-1)(l+2) \frac{U_{\alpha}'^2}{r^2} - l(l-1)(l+1)(l+2) \frac{U_{\alpha}^2}{r^4} \right\} \\
\mathbb{S}\mathbb{V}_{\mu} &= 0 \\
\mathbb{S}\mathbb{T} &= \sum_{\alpha} \frac{2j+1}{4\pi} \left\{ U_{\alpha}'''^2 + 3(2+l+l^2) \frac{U_{\alpha}''^2}{r^2} + 24l(l+1) \frac{U_{\alpha}'' U_{\alpha}'}{r^4} - 6l(2+3l+3l^2) \frac{U_{\alpha}'' U_{\alpha}'}{r^3} \right. \\
&\quad + 3 \left[2+9l(l+1)+l^2(l+1)^2 \right] \frac{U_{\alpha}'^2}{r^4} \\
&\quad \left. - 18l(l+1)(2+l+l^2) \frac{U_{\alpha} U_{\alpha}'}{r^5} + l(l+1) \left[6+13l(l+1)+l^2(l+1)^2 \right] \frac{U_{\alpha}^2}{r^6} \right\}
\end{aligned}$$

Comme la densité $\mathbb{S}\mathbb{T}$ est scalaire, celle-ci a pu être programmée dans WHISKY2 facilement. Le résultat est représenté sur la figure 5.24.

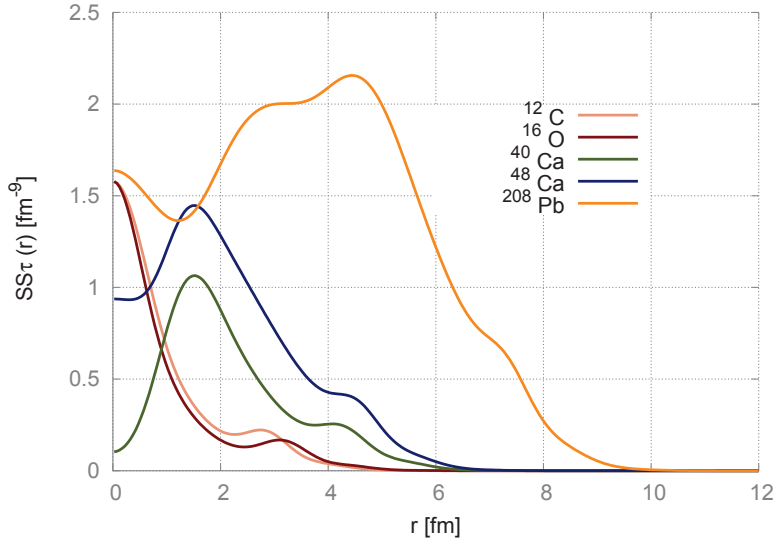


Figure 5.24 – $\mathbb{S}\mathbb{T}$ en fonction du rayon, calculé avec les fonctions d'ondes convergées de SLy4.

On peut remarquer que l'amplitude est importante devant la densité de particule. Il faut néanmoins garder à l'esprit que celles-ci sont multipliées par des constantes de couplages qui ont généralement deux ordres de grandeur d'amplitude d'écart, l'une étant associée à Skyrme NLO et la seconde à Skyrme N3LO.

11. Les densités N3LO sont ici écrites avec la fonction d'onde $U(r) = R(r)/r$.

6

Ajustement de Skyrme N2Lo

Dans les précédents chapitres, nous avons montré que le pseudo-potential de Skyrme étendu à l'ordre 3 en gradients (N3LO) permettait de reproduire certaines propriétés de la matière nucléaire infinie obtenues par des calculs *ab-initio*. Nous avons également passé en revue le développement de Skyrme N2LO pour obtenir les propriétés de noyaux sphériques à l'approximation Hartree-Fock. L'ensemble de ces éléments a été utilisé afin d'ajuster l'interaction Skyrme N2LO sur un protocole partiellement analogue à celui de SLy5. Nous présentons la méthode et les contraintes utilisées dans la première partie de ce chapitre. Nous donnerons dans la suite de celui-ci la paramétrisation préliminaire SN2LO1 dont nous discuterons les performances et les résultats. Cette étude est la base d'un article publié après la rédaction du manuscrit [140].

6.1 Méthode d'ajustement

Le pseudo-potential de Skyrme N2LO est composé de 14 paramètres :

$$\left\{ t_0, x_0, t_1, x_1, t_2, x_2, t_3, x_3, \alpha, W_0, t_1^{(4)}, t_2^{(4)}, x_1^{(4)}, x_2^{(4)} \right\} \quad (6.1)$$

Nous avons choisi de ne pas ajuster le paramètre α et de le fixer, comme pour les interactions du type SLy, à la valeur $\alpha = 1/6$. Le protocole d'ajustement, comme SLy5, fait intervenir une minimisation par une méthode des moindres carrés. Ce sont donc 13 paramètres qui doivent être ajustés. De plus, nous avons décidé de déterminer au moins 13 contraintes. Il est en effet préférable d'envisager l'ajustement de Skyrme N2LO comme un problème surcontraint, et ce pour plusieurs raisons :

- les interactions de type SLy sont elles-aussi surcontraintes. La logique dans laquelle s'inscrit cet ajustement impose naturellement que l'on fasse de même. De plus, pour être compétitif avec de telles forces, il est nécessaire d'exploiter au maximum les possibilités de notre interaction.
- un nombre insuffisant de contraintes aboutirait à une paramétrisation où plusieurs jeux de paramètres

conviendraient. Pour autant, dans les résultats a posteriori obtenus avec ces jeux de paramètres, certains pourraient être meilleurs que d'autres. Il est donc nécessaire de définir au mieux en amont les propriétés que l'on veut reproduire afin de s'assurer que l'interaction pourra bien les reproduire. Plus généralement, pour permettre à l'algorithme de minimisation de converger, il vaut mieux éviter la situation dans laquelle on retrouve deux minima locaux équivalents, qui entraînerait alors une oscillation de l'ajustement entre deux positions d'équilibres.

- il peut exister des corrélations entre les contraintes que l'on choisit. Nous avons par exemple dans le chapitre 1 montré le cas de la corrélation entre K_∞ et m^*/m . Cette corrélation implique que l'amélioration de l'une des deux quantités entraîne la dégradation de l'autre. Il est néanmoins possible qu'il y ait également des corrélations positives, où une observable entraîne automatiquement une bonne reproduction d'une autre. Ainsi, les deux contraintes ne représentent pas deux contraintes indépendantes. Il vaut donc mieux définir un nombre d'observables plus grand que le nombre de paramètres.

La forme que prend la minimisation des moindres carrés est la minimisation d'une fonction appelée χ^2 . Pour la construire, on définit les M contraintes que l'on souhaite que notre interaction reproduise, avec $M \geq 13$. Ces contraintes sont généralement caractérisées par des valeurs numériques, que l'on peut noter $\mathcal{O}_{i,exp}$. Ces valeurs sont également calculables avec notre modèle, celles-ci sont notées $\mathcal{O}_{i,th}$. Enfin, il est possible, sur chacune des contraintes, de définir un écart à la valeur attendue qui serait acceptable. On note cet écart $\Delta\mathcal{O}_i$. La fonction χ^2 qu'il s'agit de minimiser est de la forme :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{M>13} \left(\frac{\mathcal{O}_{i,th}(p) - \mathcal{O}_{i,exp}}{\Delta\mathcal{O}_i} \right)^2. \quad (6.2)$$

Il n'y a pas de règles bien définies pour définir les contraintes pour l'ajustement, et le choix est souvent subjectif et est conditionné par des réalités pratiques (temps de calcul, précision numérique,...). Il en est de même pour l'écart $\Delta\mathcal{O}_i$. On peut toutefois identifier trois types d'incertitudes. Lorsque l'on souhaite reproduire une valeur expérimentale, comme l'énergie de liaison d'un noyau, celle-ci est généralement associée à une valeur expérimentale liée à la mesure. De la même manière, notre valeur $\mathcal{O}_{i,th}$ est elle aussi entachée d'une incertitude, numérique cette fois, qui rend compte de la précision des procédures de dérivation ou encore d'intégration. Comme pour les valeurs expérimentales, il est toutefois possible de garder ces incertitudes sous contrôle et d'en connaître l'ordre de grandeur. Enfin, l'interaction que l'on utilise possède des insuffisances, dans la mesure où elle est une approximation de la réalité et qu'il peut exister des corrélations entre les paramètres. Cette source d'incertitude n'est pas connue, mais on peut néanmoins estimer son ordre de grandeur. L'estimation de ces trois types d'incertitudes doit donc servir de borne inférieure pour définir les écarts $\Delta\mathcal{O}_i$ si l'on veut un ajustement le plus perfectionné possible.

Nous allons maintenant énumérer les contraintes d'ajustement $\mathcal{O}_{i,exp}$ ainsi que les écarts $\Delta\mathcal{O}_i$ choisis.

6.2 Contraintes d'ajustement

Dans les contraintes qui suivent, sauf si le contraire est précisé, l'incertitude doit être envisagée comme symétrique, c'est-à-dire que l'on cherche à obtenir une valeur telle que $\mathcal{O}_{i,exp} - \Delta\mathcal{O}_i \leq \mathcal{O}_{i,th} \leq \mathcal{O}_{i,exp} + \Delta\mathcal{O}_i$.

6.2.1 Matière infinie symétrique et asymétrique

Pseudo-observables On renvoie aux sections (3.2) et (3.3) pour les discussion et les expressions analytiques des équations d'état et des pseudo-observables de la matière infinie. Les valeurs utilisées dans l'ajustement sont données dans le tableau 6.1. Les quatre premières valeurs interviennent dans la matière symétrique et ε_T intervient dans la matière asymétrique. Comme certaines de ces contraintes, en particulier la saturation, sont nécessaires pour obtenir un ajustement de qualité, nous avons imposé une contrainte forte sur leur reproduction. Quand la valeur obtenue par l'ajustement était en dehors de la fenêtre définie par l'écart accepté, on multipliait par 1000 la contribution au χ^2 . Dans la mesure où l'on n'interprète pas la valeur de ce dernier, mais qu'on se contente uniquement de chercher un minimum, cette astuce n'a pas d'incidence.

La valeur de ε_T exigée est élevée car nous avons en partie repris les contraintes fixées pour l'interaction SLyMR1 [141]. Il s'agit néanmoins également de la valeur obtenue avec SLy5. Comme nous voulions dans un premier temps reproduire les contraintes de Skyrme NLO, nous avons conservé cette valeur. Les futurs ajustements incorporeront une valeur davantage en accord avec les modèles du type goutte liquide qui donnent une valeur voisine de 30 MeV [15]. Nous avons choisi de ne pas considérer la pente de ε_T par rapport à l'asymétrie car cette grandeur est moins bien connue. Elle pourra néanmoins être incorporée dans de futurs ajustements. On incorpore généralement cette valeur afin de s'assurer que le passage de la matière symétrique à la matière de neutrons se fait dans la bonne direction, et donc que la matière de neutrons ne s'effondre pas. Nous avons ainsi fait le choix de contraindre directement le comportement de la matière de neutrons.

Table 6.1 – Pseudo-observables de la matière infinie choisies comme contraintes et écarts autorisés associés

"Pseudo-observables"	Valeur "attendue"	Écart tolérée
ρ_{sat} [fm ⁻³]	0.1600	0.001
E/A [MeV]	-16.0000	0.2
m^*/m	0.7000	0.02
K_∞ [MeV]	230.00	10.00
ε_T [MeV]	32.00	2.00

Matière de neutrons Nous avons contraint l'équation d'état de la matière de neutrons en fournissant trois points calculés microscopiquement par Wiringa *et al.* [142]. Ce choix avait déjà été effectué lors de l'ajustement des fonctionnelles de type SLy. Les valeurs choisies sont définies dans le tableau 6.2

Table 6.2 – Points choisis pour contraindre l'équation d'état de la matière de neutrons. L'écart correspond à environ 10 % de la valeur de l'équation d'état, comme définie dans [77].

ρ_{sat} [fm ⁻³]	0.10	0.30	0.35
E/N [MeV]	11.88	35.94	44.14
Écart tolérée [MeV]	2.0	7.0	9.0

Les pseudo-observables de la matière infinie ne correspondent certes pas à de réelles observables, mais l'on sait que certaines d'entre elles sont empiriquement reliées à des propriétés de volume des noyaux, comme la saturation par exemple. Elles présentent surtout l'avantage d'être exprimables analytiquement en fonction des paramètres et nécessitent ainsi peu de temps de calcul en comparaison du calculs de propriétés des noyaux par exemple.

6.2.2 Contraintes assurant la stabilité de l'interaction

L'une des propriétés que nous voulions avoir sous contrainte lors de l'ajustement de Skyrme N2LO a été sa stabilité. On s'est en effet rendu compte que des paramétrisations de l'interaction de Skyrme présentaient des instabilités : soit directement dans la matière infinie et les noyaux, comme pour les interactions LNS ou SKP, soit dans des calculs de noyaux déformés, comme c'est le cas pour SLy5. Le symptôme de ces instabilités est la non-convergence des calculs, voir même une divergence de l'énergie totale du système, en raison notamment d'une densité isovectorielle ρ_1 dont la contribution devient trop importante au fil des itérations [75]. Nous avons choisi pour détecter de telles instabilités la théorie de la réponse linéaire [14, 38, 143, 144]. Les fonctions réponses, calculées pour la matière infinie non polarisée à température nulle ont été déterminées et possèdent un comportement qui nous permet efficacement de savoir si une fonctionnelle sera ou non instable.

On note généralement $\chi^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \omega)$ ces fonctions réponses. Celles-ci dépendent de l'énergie et du moment transféré, respectivement notés ω et \mathbf{q} , entre une particule située au dessus du niveau de Fermi et un trou en-dessous de celui-ci. Ce transfert se fait par l'interaction résiduelle V_{ph} que l'on peut calculer par :

$$V_{ph}(q, k_1, k_2) = \frac{\delta^2 \mathcal{E}[\rho]}{\delta \rho(k_1 + q, k_1) \delta \rho(k_2, k_2 + q)}. \quad (6.3)$$

La fonction réponse s'obtient en résolvant l'équation de Bethe-Salpeter [38] en employant des fonctions de Green. Il est possible d'obtenir une fonction réponse pour chaque canal $\alpha = (S, M, I)$, où S, M et I correspondent au nombre quantique de spin, à la projection du spin et à l'isospin. Un tel formalisme a été développé dans le cadre de Skyrme N2LO, et les détails analytiques peuvent être trouvés [71].

Dans notre cas, on se place dans le cas particulier où $\omega = 0$. Le canal (S=0, M=0, I=0) est un cas particulier. Une instabilité apparaît aux basses densités, à savoir pour $\rho \leq 0,16 \text{ fm}^{-3}$ et prend généralement la forme d'une "bulle". Cette instabilité est connue et est reliée à la transition de phase liquide-gaz. On l'appelle instabilité spinodale, et est nécessaire à la présence d'états liés. On peut l'apercevoir sur les figures 6.1 et 6.2.

Pour les autres canaux, les instabilités sont non physiques, tout particulièrement lorsqu'elle interviennent pour une densité inférieure à la densité de saturation. Ces instabilités sont calculées dans la matière infinie, mais possèdent une traduction directe dans les noyaux [48]. Dans cette dernière référence, un critère est d'ailleurs défini suite à une étude en utilisant différents programmes de calculs de noyaux. Pour éviter que des instabilités apparaissent, il faut repousser les pôles des fonctions réponses $\chi^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \omega)$ au delà de $1, 2\rho_{sat}$, ce qui équivaut à $0,192 \text{ fm}^{-3}$. Nous nous sommes néanmoins fixés comme critère de repousser les fonctions réponses au delà de $1, 4\rho_{sat}$, c'est-à-dire $0,224 \text{ fm}^{-3}$ afin d'être plus conservatif. C'est notamment ce qui a été fait avec la paramétrisation SLy5. On peut voir sur la figure 6.1 que la paramétrisation SLy5 est instable dans la matière infinie symétrique. L'intégration de la réponse linéaire au processus d'ajustement d'une fonctionnelle de Skyrme s'est fait à cette occasion, et les détails peuvent être trouvés [39]. On voit sur la figure 6.2 que les densités critiques des canaux (S=1, M=0, I=0) et (S=1, M=1, I=0) ont été remontées au delà de la limite $1, 4\rho_{sat}$. Pour notre ajustement, nous essayerons également de ne pas avoir de fonctions réponses monotones décroissantes qui pourraient passer la limite à un moment transféré q plus élevé. Dans l'idéal, on cherche donc à avoir des fonctions dont le comportement asymptotique est croissant.

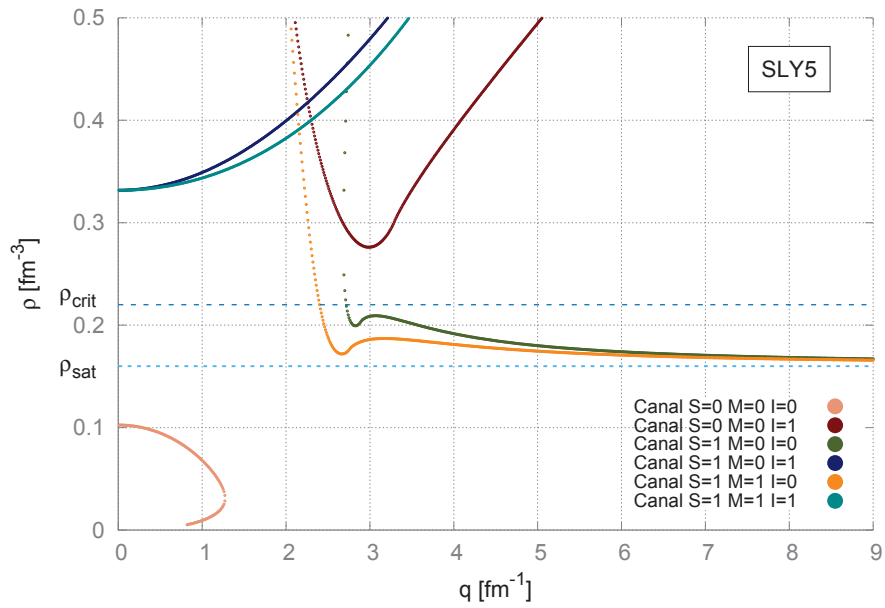


Figure 6.1 – Réponse linéaire dans la matière infinie symétrique, pour l'interaction SLy5.

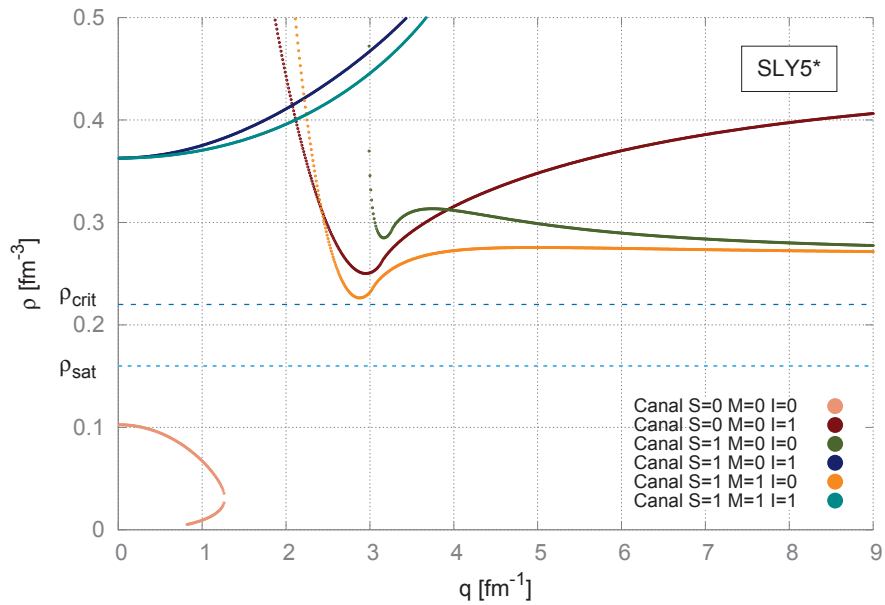


Figure 6.2 – Réponse linéaire dans la matière infinie symétrique, pour l'interaction SLy5*.

Remarque concernant la contrainte de la réponse linéaire Nous avons fixé comme contrainte la distance d_{min} de chacun des canaux à la courbe $\rho_{crit} = 1,4\rho_{sat}$. Il faut néanmoins davantage pénaliser le χ^2 quand une courbe est en dessous de ρ_{crit} , et que la contribution soit négligeable en comparaison quand la

courbe est au-dessus. Nous avons donc utilisé une contribution asymétrique au χ^2 de la forme :

$$e^{-2\beta(d_{min}-d_{totre})}, \quad (6.4)$$

où β est empiriquement fixée à 10 [145].

6.2.3 Contraintes associées aux calculs de noyaux

Énergie de liaison On choisit de contraindre les énergies de liaison de noyaux doublement magiques car l'approximation de champ-moyen avec symétrie sphérique permet une meilleure description de ceux-ci. Les noyaux concernés sont : ^{40}Ca , ^{48}Ca , ^{56}Ni , ^{100}Sn , ^{132}Sn , ^{208}Pb . Les valeurs expérimentales sont obtenues dans [146], en soustrayant les énergies de liaison des électrons. Les incertitudes sur les énergies de liaison sont les mêmes que dans [141], à savoir 1 MeV pour les noyaux doublement magiques où le nombre de protons est différent de celui des neutrons et 1,5 MeV quand le nombre de protons et de neutrons est égal. Ces valeurs sont grandes en comparaison de celles exigées pour SLy5, comme nous le verrons dans la section de résultats. Ceci est dû au fait que nous souhaitons obtenir une première paramétrisation et donc valider notre méthode. Nous diminuerons donc l'incertitude dans les futurs ajustements.

Rayons de protons Comme pour [141], nous avons également choisi de contraindre les rayons de protons des noyaux ^{40}Ca , ^{48}Ca , ^{132}Sn , ^{208}Pb . Nous nous sommes également rendu compte que le rayon de proton du ^{56}Ni était reproductible par notre interaction. Nous avons choisi de l'ajouter afin d'avoir une contrainte sur les rayons de proton de la chaîne d'isotopes du Nickel. La valeur de ce rayon de proton n'est pas néanmoins obtenue directement expérimentalement, mais par extrapolation sur les noyaux voisins. Les incertitudes ont été choisies comme 0.02 fm quand $N \neq Z$ et 0.03 fm quand $N = Z$.

Table 6.3 – Contraintes sur les énergie de liaisons et les rayons de proton de noyaux doublement magiques et incertitudes associées

Noyau	E_{tot} attendue [MeV]	Incertitude associée [MeV]
^{40}Ca	-342.02300	1.5
^{48}Ca	-415.98300	1.0
^{56}Ni	-483.95300	1.5
^{100}Sn	-825.13000	1.5
^{132}Sn	-1102.67300	1.0
^{208}Pb	-1635.86100	1.0
Noyau	r_p attendu [fm]	Incertitude associée [fm]
^{40}Ca	3.38282	0.03
^{48}Ca	3.39070	0.02
^{56}Ni	3.66189	0.03
^{132}Sn	4.64745	0.02
^{208}Pb	5.45007	0.02
Paramètre spin-orbite	Valeur attendue	Incertitude associée
W_0 [MeV fm ⁵]	120	2

Paramètre spin-orbite W_0 Dans le fit préliminaire, nous avons également fait le choix de ne pas contraindre les niveaux d'énergies en imposant l'écart entre deux niveaux d'énergies pour le spin-orbite, afin

de laisser davantage de liberté pour trouver une paramétrisation stable. Nous avons néanmoins mis une contrainte plus faible en fixant comme contrainte la valeur du paramètre de spin-orbite. La valeur attendue est :

$$W_0 = 120 \pm 2 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^5. \quad (6.5)$$

Nous allons maintenant voir la stratégie qui a menée à l'obtention d'une paramétrisation de Skyrme N₂LO.

6.3 Stratégie d'ajustement

Nous explorons lors de l'ajustement un espace à 13 paramètres. Il a donc été nécessaire de trouver une méthode permettant d'explorer cet espace efficacement. Nous avons utilisé pour ce faire la méthode de Nelder-Mead [116], dont une explication détaillée peut-être trouvée dans la référence [145].

De l'inconvénient d'un traitement perturbatif a priori Dans un premier temps, nous avons essayé de garder une interaction de Skyrme fixe et de n'ajuster que les paramètres de Skyrme N₂LO afin d'obtenir un point de départ pour de futurs ajustements. L'exploration d'un espace à 4 paramètres étant plus rapide que celle d'un espace à 13 paramètres, nous comptons ainsi faciliter la convergence de la méthode d'ajustement de Nelder-Mead qui peut s'avérer longue. Il est possible d'utiliser une méthode complémentaire, basée sur l'approximation du χ^2 comme une fonction quadratique, une fois la zone du minimum trouvée pour converger plus vite. Celle-ci n'a pas été utilisée pour l'ajustement présenté dans ce chapitre. Elle le sera sans doute néanmoins lorsque l'on ajoutera l'appariement qui allongera le temps pris par une itération et le nombre d'itérations nécessaires à la convergence.

Nous avons donc exploré l'espace à 4 paramètres avec le code de réponse linéaire pour déterminer une zone stable, mais la stabilité était impossible sans réarranger les termes t_1 et t_2 de Skyrme NLO. L'ajout de termes Skyrme N₂LO à une interaction Skyrme NLO entraînait un effondrement à haut moment q transféré dans les canaux S=1. Nous avons donc abandonné cette idée.

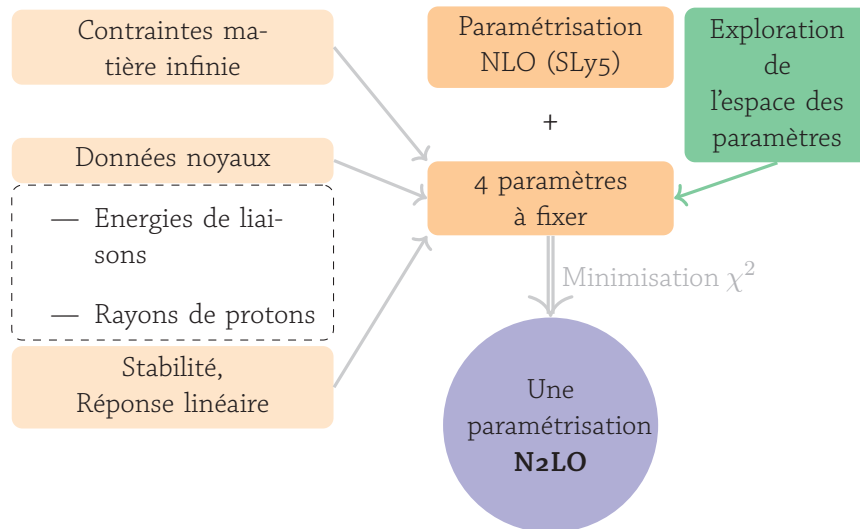


Figure 6.3 – Approche perturbative .

De l'inconvénient d'utiliser une paramétrisation issue des contraintes de la matière infinie

Nos ajustement obtenus en ajustant les canaux nucléaires présentés dans le chapitre 3 se sont avérées instables lorsque l'on a tracé leur comportement vis-à-vis de la réponse linéaire, comme il est possible de le voir sur la figure 6.4. On peut notamment voir que le canal (S=0,T=0) n'est pas en forme de "bulle". En conséquence, les noyaux ne sont pas liés avec cette interaction, et les calculs effectués avec WHISKY2 ne convergent pas.

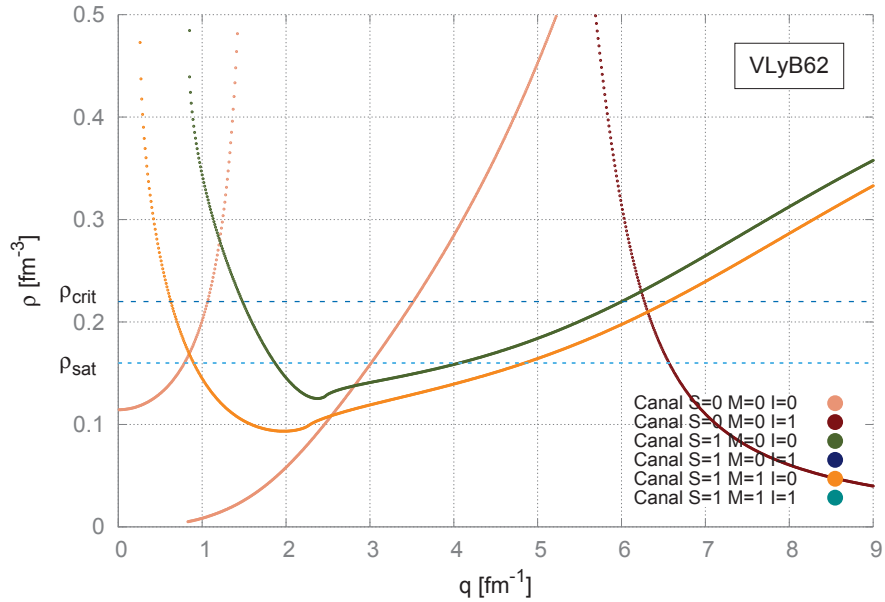


Figure 6.4 – Réponse linéaire dans la matière infinie symétrique, pour l'interaction VLYB62.

Il est difficile pour une paramétrisation de ce type d'être repérée par le programme de réponse linéaire, qui identifiera quand même des pôles. Nous avons donc utilisé comme point de départ une interaction avec des courbes pour la réponse linéaire continues et plus particulièrement de l'interaction SLy5* en ajoutant des paramètres N2LO non compatibles avec o. Nous avons varié les points de départ de ces paramètres N2LO pour s'assurer que l'ajustement ne convergeait pas vers un minimum local. Bien entendu, une fois que nous aurons un ajustement plus définitif, nous pourrions nous en assurer par d'autres méthodes, comme relancer l'ajustement en partant de la paramétrisation trouvée pour s'assurer que le code numérique retrouve la même paramétrisation. Le résultat d'un tel ajustement est présenté dans la section suivante.

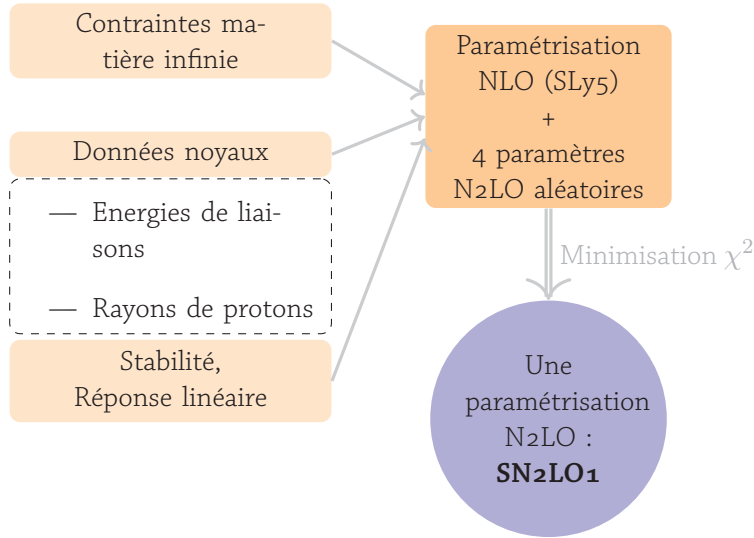


Figure 6.5 – Approche choisie

6.4 Résultats

La paramétrisation SN2LO1 est une paramétrisation stable de Skyrme N2LO dont les paramètres sont les suivants :

Table 6.4 – Paramètres de l’extension de Skyrme N2LO SN2LO1

t_0 [MeV.fm ⁵]	t_1 [MeV.fm ⁵]	t_2 [MeV.fm ⁵]	$t_1^{(4)}$ [MeV.fm ⁷]	$t_2^{(4)}$ [MeV.fm ⁷]
-2486.90786	497.51821	-451.60715	-11.95063	-15.04405
x_0	x_1	x_2	$x_1^{(4)}$	$x_2^{(4)}$
0.57160369	-0.05521333	-0.99803779	0.10279808	-0.93024200
t_3 [MeV.fm ^{3+α}]	x_3	W_0 [MeV.fm ⁵]	α	
13707.18320	0.88704830	117.904418	1/6	

On peut remarquer que les paramètres de Skyrme N2LO ne sont pas compatibles avec 0. Cette paramétrisation est un ajustement préliminaire qui continue à être amélioré. Les résultats dans les sous-sections suivantes valident notre processus d’ajustement. Cet ajustement préliminaire va donc maintenant pouvoir être étoffé en ajoutant de nouvelles contraintes, comme celle du spin-orbite, ou en réajustant les écarts tolérés, notamment dans le cas des énergies de liaison.

6.4.1 Propriétés de la matière infinie

On présente tout d'abord dans cette section des pseudo-observables de la matière infinie, aussi bien celles directement contraintes par l'ajustement que les prédictions faites sur celles qui n'étaient pas contraintes.

Pseudo-observables de la matière infinie Les pseudo-observables résultantes de notre ajustement sont tabulées avec celles d'autres interactions de structure nucléaire dans le tableau 6.5. On peut y avoir que les valeurs sont toutes dans la fenêtre que l'on avait définie, et sont comparables à une interaction Skyrme NLO comme SLy5.

Table 6.5 – Pseudo-observables de la matière infinie obtenues avec la paramétrisation SN2LO1 comparées avec les interactions SLy5. Les incertitudes sur les valeurs contraintes peuvent-être trouvées 6.1.

"Pseudo-observables" après ajustement		SN2LO1	SLy5	Valeur "contraintes"
ρ_{sat}	[fm ⁻³]	0.1620	0.1603	0.1600
E/A	[MeV]	-15.9476	-15.9833	-16.0000
m^*/m		0.7091	0.6969	0.7000
K_∞	[MeV]	221.8689	229.92158	230.0000
ε_T	[MeV]	31.9585	32.02640	32.0000

Il est possible de noter que l'on obtient une bonne valeur pour la masse effective qui est égale à 0.71, et ce sans particulièrement détériorer K_∞ . Ce constat peut être une conséquence de la plus grande liberté offerte par Skyrme N2LO sur la corrélation entre masse effective et incompressibilité que nous avons vue dans le chapitre 2. La figure 6.6 semble confirmer cette affirmation. On voit que notre interaction SN2LO1 possède plus de libertés pour reproduire ces deux observables simultanément.

Nous avons également tracé les nouvelles corrélations apparaissant avec notre interaction SN2LO1 sur la figure 6.7. On y voit clairement que nous pouvons espérer améliorer à la fois la masse effective et l'incompressibilité avec notre interaction Skyrme N2LO.

Figure 6.6 – Corrélation entre masse-effective et incompressibilité pour différentes valeurs du paramètre α représentées par les courbes de couleur dans le cas de Skyrme NLO. Le résultat de notre paramétrisation correspond au point bleu.

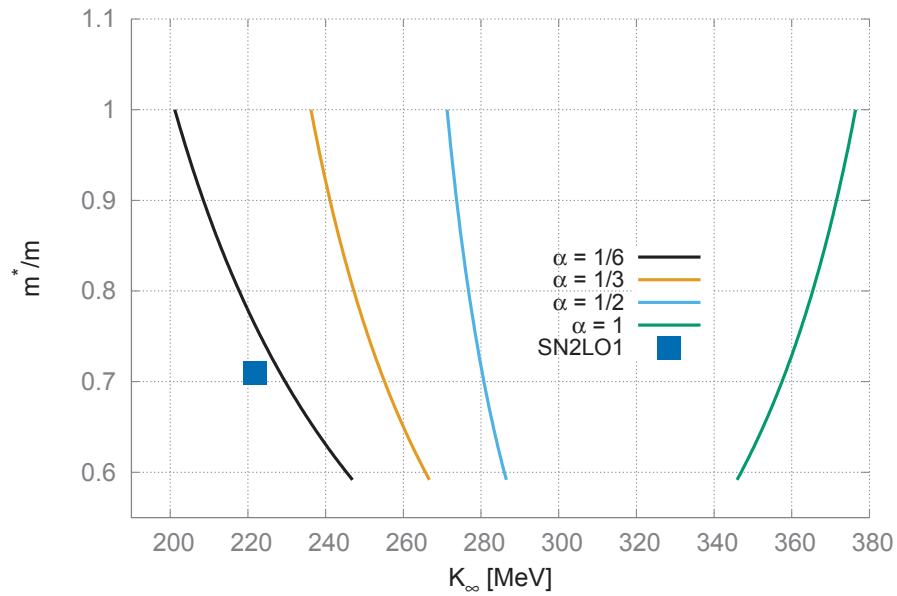
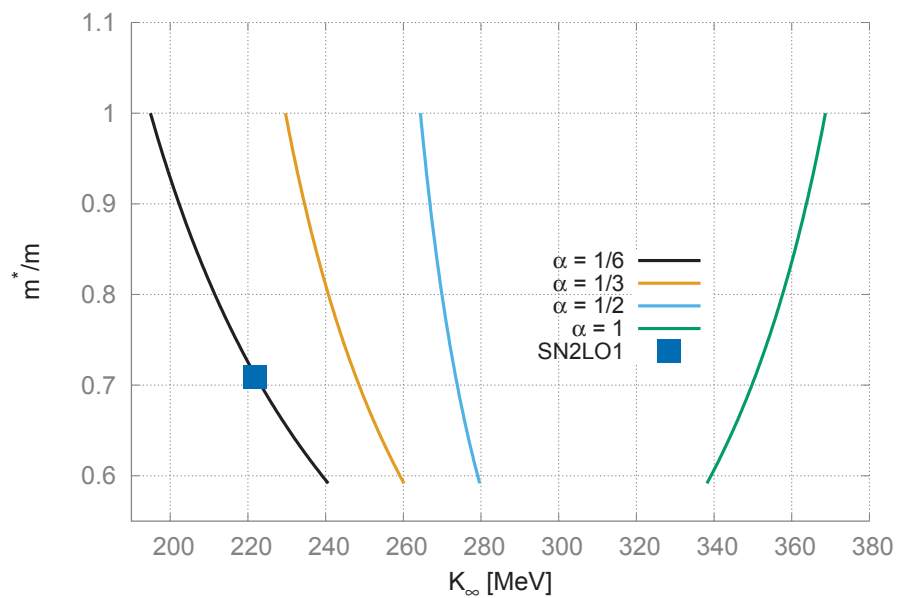


Figure 6.7 – Corrélation entre masse-effective et incompressibilité pour différentes valeurs du paramètre α représentées par les courbes de couleur dans le cas de Skyrme N2LO (voir équation (3.29)). Le résultat de notre paramétrisation correspond au point bleu.



Il sera également possible de mieux comprendre ce lien en étudiant la matrice de corrélation de notre interaction Skyrme N2LO. L'un des axes de recherche pour nos futurs ajustements est donc d'obtenir une valeur

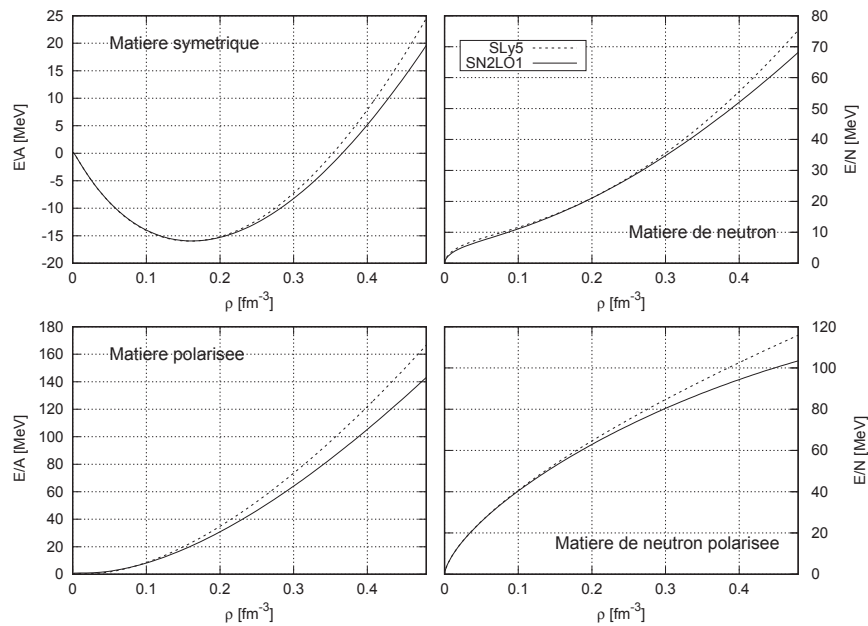
de K_∞ plus proche des contraintes expérimentales issues des collisions d'ions lourds autour de $K_\infty = 210$ MeV.

Equations d'état dans la matière infinie Les équations d'état de la matière infinie sont représentées sur la figure 6.8. On rappelle que quatres points sont contraints :

- la valeur ρ_0 de saturation et l'énergie correspondante dans la matière symétrique. Il s'agit d'une contrainte forte exigée en priorité dans le processus d'ajustement.
- trois points de la matière de neutrons, afin d'empêcher l'effondrement de celle-ci à haute densité.

Il est possible de voir sur la figure que nos résultats sont compatibles avec SLy5 jusqu'à la densité de saturation, puis que le comportement varie à haute densité. La raison est simplement que ce comportement asymptotique n'est pas contraint. Il est important de noter que nous n'avons pas d'effondrement de la matière de neutrons, ni de la matière polarisée ¹.

Figure 6.8 – Équations d'état dans la matière infinie symétrique, matière de neutrons, matière polarisée en spin et matière de neutrons polarisée en spin. Les résultats de l'interaction SN2LO1 sont représentés en traits pleins, ceux de SLy5 en traits interrompus.



Canaux (S,T) dans la matière infinie Nous avons également observé le comportement des canaux (S,T) qui lui n'est pas contraint. Nous avons vu dans les chapitres précédents qu'il existait une inconsistance entre matière nucléaire infinie et noyaux. De plus, ce n'est pas parce que l'équation d'état globale de la matière symétrique est reproduite que les canaux (S,T) le sont. C'est bien ce que l'on constate sur la figure 6.9. De manière générale, nous avons un moins bon comportement que l'interaction SLy5, hormis dans le canal (S=1,T=1). Si l'on souhaite une meilleure reproduction de cette pseudo-observable, il est nécessaire de l'incorporer dans de futurs ajustements. Il en est de même pour les ondes partielles.

1. Un effondrement de la matière polarisée aurait été le symptôme d'une transition ferromagnétique.

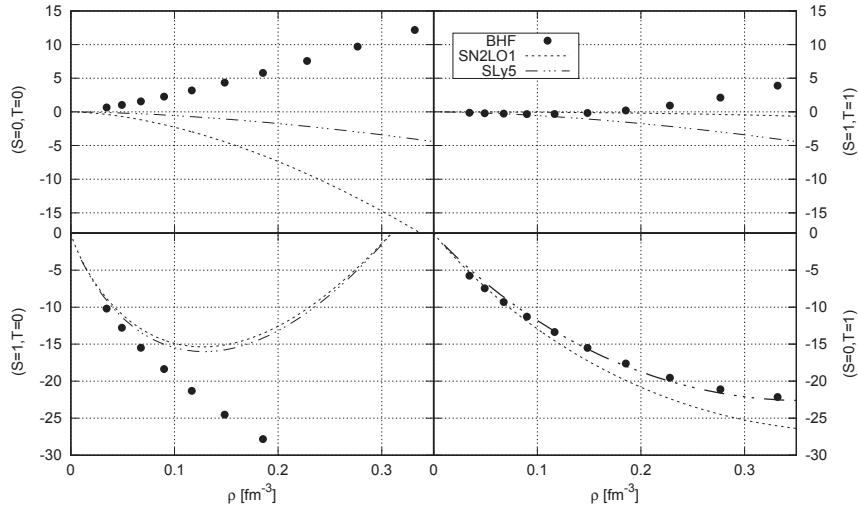


Figure 6.9 – Canaux (S,T) dans la matière infinie symétrique. L'échelle des ordonnées est en MeV Les résultats de l'interaction SN2LO1 sont représentés en traits pleins, ceux de SLy5 en traits interrompus.

6.4.2 Stabilité de l'interaction

Dans cette section, nous allons voir que notre interaction SN2LO1 ne présente pas d'instabilités de taille finie à l'aide de la réponse linéaire. Nous verrons que le comportement asymptotique des courbes de tous les canaux est particulièrement encourageant pour de futurs ajustements.

Réponse linéaire dans la matière symétrique Les densités critiques de la réponse linéaire dans la matière symétrique pour notre interactions sont représentées sur la figure 6.10. On peut y voir que tous les canaux, hormis le canal de la spinodale ($S=0, M=0, I=0$) dont la forme ellipsoïdale assure la possibilité d'avoir des noyaux liés, ont leur densité critique au-dessus du critère empirique $\rho_{crit} = 1,4\rho_{sat}$. On note aussi que le comportement asymptotique des différentes courbes n'est pas monotone décroissant, mais au contraire croissant. On peut alors espérer que la courbe ne s'effondre pas pour de hautes valeurs du moment transféré q .

Réponse linéaire dans la matière de neutrons Les densités critiques sont représentées en fonction du moment transféré q pour la matière de neutrons sur la figure 6.11. Ce comportement n'a pas été contraint, mais on remarque que les courbes sont bien au-dessus de la densité $\rho = 0,08 \text{ fm}^{-3}$ dans la matière de neutrons. Ces courbes ont également un bon comportement asymptotique. En ajoutant cette contrainte dans l'ajustement, il est sans doute possible de remonter les courbes au-delà de $\rho_{crit} = 1,4\rho_{sat}$. On peut noter également que le canal ($S=1, M=0$) se situe déjà au delà de $\rho_{crit} = 1,2\rho_{sat}$, qui est le critère défini dans l'article [48].

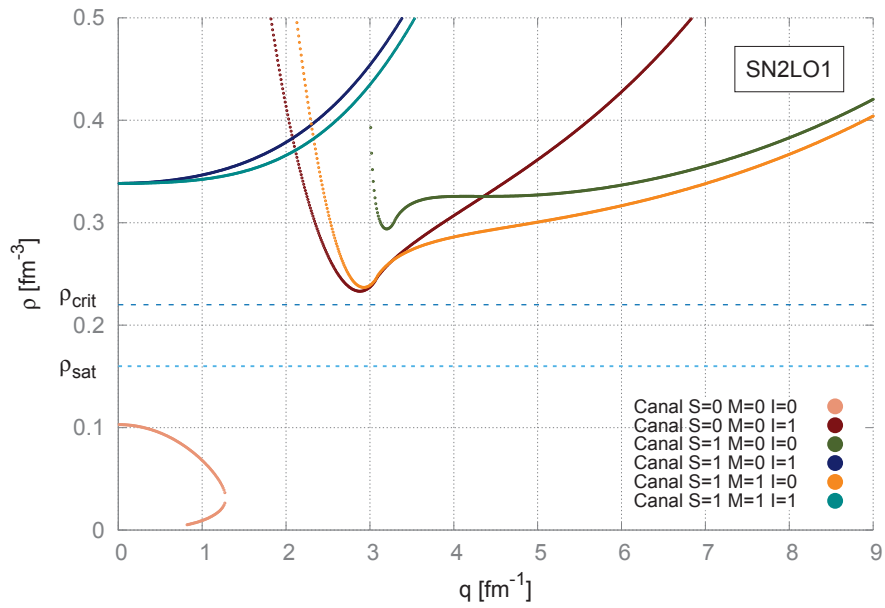


Figure 6.10 – Réponse linéaire dans la matière infinie symétrique, pour l'interaction SN2LO1 où la densité ρ est tracée en fonction du moment transféré q .

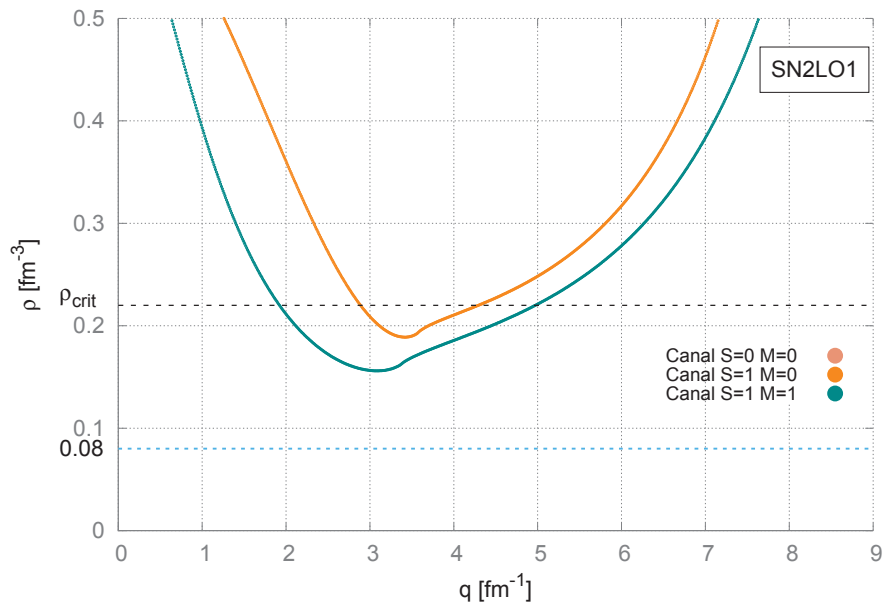


Figure 6.11 – Réponse linéaire dans la matière infinie de neutrons, pour l'interaction SN2LO1.

6.4.3 Propriétés des noyaux

Nous allons maintenant examiner les propriétés des noyaux obtenus avec notre interaction. Nous nous intéresserons principalement à l'énergie de liaison et au rayon de charge. Les états de particules individuels ne sont pas traités dans le cadre de cet ajustement préliminaire.

Résultats sur les noyaux ajustés Les performances concernant les propriétés des noyaux sont résumées dans le tableau 6.6. L'ensemble des calculs du tableau a été effectué avec le même programme et les mêmes paramètres d'entrée. On peut y voir que les résultats concernant les énergies de liaison sont moins bons que SLy5. La raison est une surestimation des erreurs pour notre interaction en s'appuyant sur le protocole d'ajustement de SLyMR1 [141]. Nous sommes confiants qu'un ajustement avec des erreurs sur les noyaux divisées par deux est envisageable pour atteindre des performances comparables à SLy5. Les rayons de charges sont en général mieux reproduits avec notre interaction qu'avec SLy5.

Table 6.6 – Pseudo-observables de la matière infinie obtenues avec la paramétrisation SN2LO1 comparées avec l'interaction SLy5.

Noyau après ajustement	E_{tot} avec SN2LO1 [MeV]	E_{tot} avec SLy5 [MeV]	E_{tot} expérience [MeV]
^{40}Ca	-345.36828	-344.05099	-342.02300
^{48}Ca	-416.94469	-415.90143	-415.98300
^{56}Ni	-482.12111	-482.65365	-483.95300
^{100}Sn	-826.06845	-827.80765	-825.13000
^{132}Sn	-1104.44457	-1103.86452	-1102.67300
^{208}Pb	-1634.36724	-1635.97989	-1635.86100
Noyau après ajustement	r_p avec SN2LO1 [fm]	r_p avec SLy5 [fm]	r_p expérience [fm]
^{40}Ca	3.40594	3.41583	3.38282
^{48}Ca	3.44018	3.45076	3.39070
^{56}Ni	3.68978	3.69798	3.66189
^{132}Sn	4.64828	4.66245	4.64745
^{208}Pb	5.43504	5.44953	5.45007

Les figures 6.12 et 6.13 illustrent les différences de notre interaction et de SLy5 par rapport aux valeurs expérimentales. La figure 6.12 nous permet d'établir une feuille de route quant à la précision nécessaire sur les noyaux pour avoir des performances au moins égales à SLy5. On voit qu'il nous faut, dans les futurs ajustements, particulièrement contraindre plus le ^{208}Pb et le ^{48}Ca . On peut d'ailleurs faire le même constat sur le rayon de protons du ^{208}Pb d'après la figure 6.13.

Chaînes d'isotopes Nous avons tracé les chaînes d'isotopes du Ca, Sn, Ni et Pb pour les interactions SN2LO1 et SLy4 avec WHISKY2. Nous avons fait le choix de tracer également les noyaux impairs, bien qu'il soit nécessaire d'y introduire le *blocking* pour une bonne description. Le but de ces graphiques est de montrer que le comportement est pour l'heure analogue à SLy4. Avec une plus grande précision sur les noyaux ajustés, on peut donc espérer mieux reproduire ces chaînes d'isotopes. Bien entendu, il est évident, tout particulièrement dans les noyaux lourds, qu'il est indispensable de prendre également en compte l'appariement pour décrire correctement l'ensemble des noyaux.

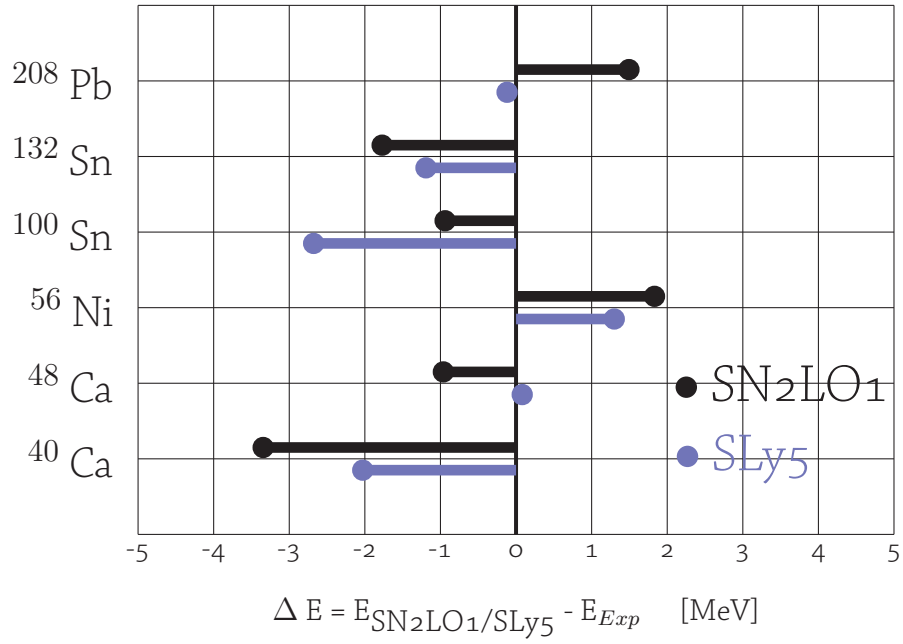


Figure 6.12 – Différence des énergies de liaison obtenues avec SN2LO1 et des valeurs expérimentales issues de [146].

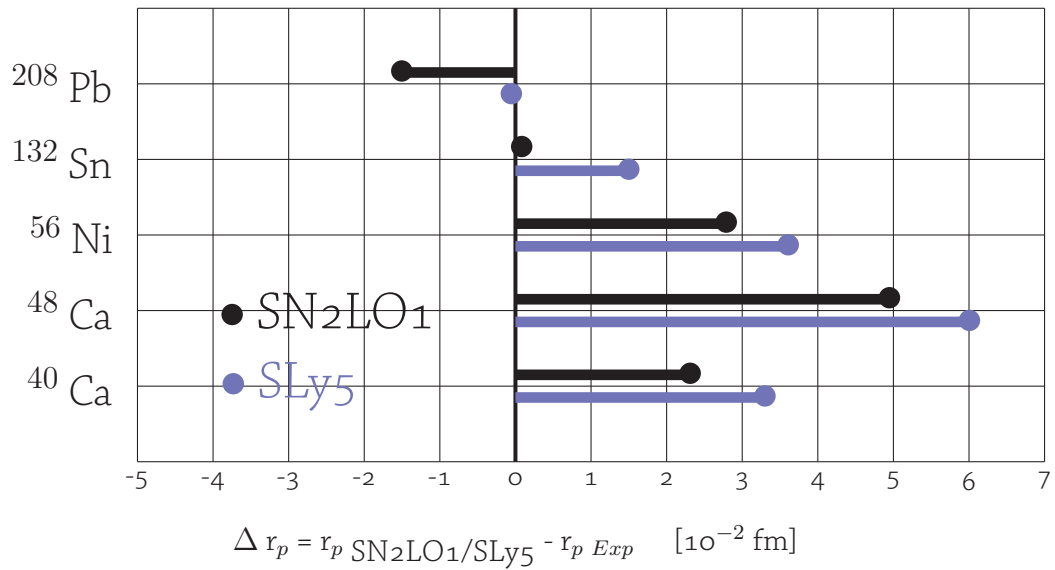


Figure 6.13 – Différence des rayons de protons obtenus avec SN2LO1 et des valeurs expérimentales issues de [147].

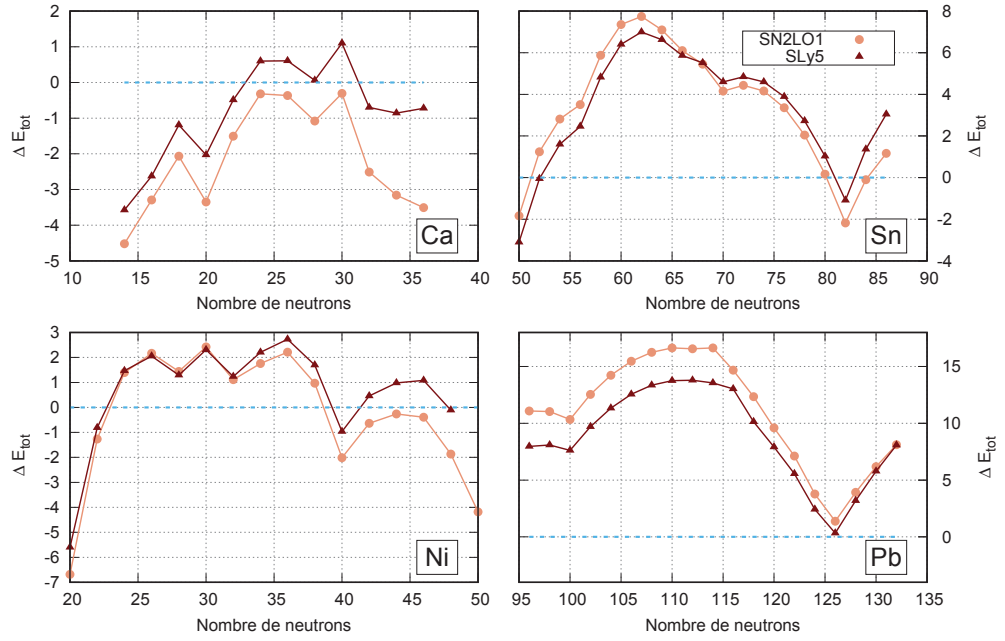


Figure 6.14 – Différences des énergies de liaison obtenues avec SN2LO1 et SLy5 et les valeurs expérimentales de [146] sur les chaînes d'isotopes des noyaux magiques.

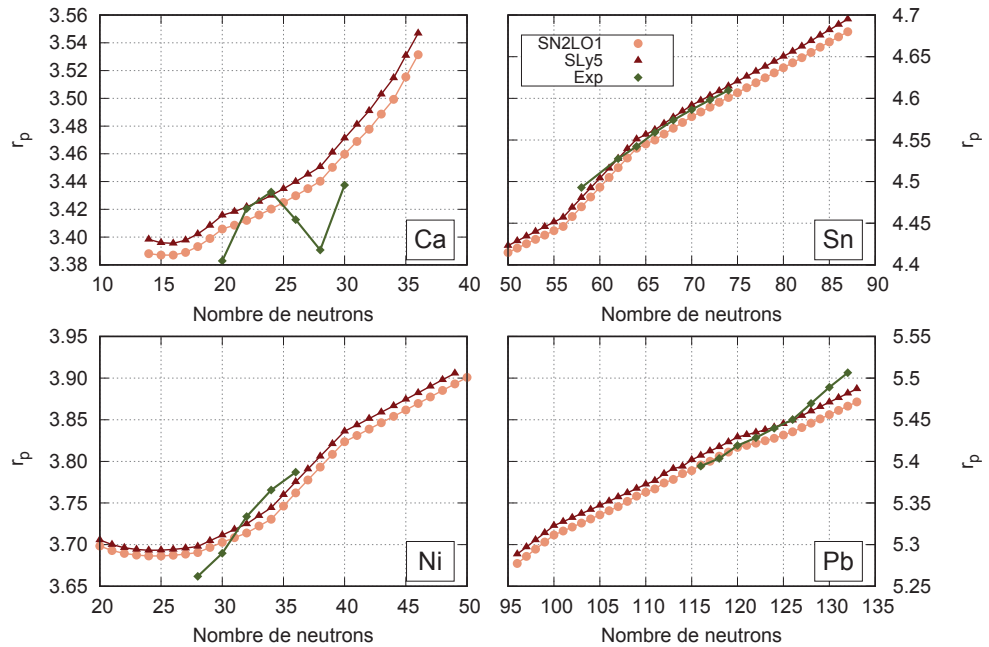


Figure 6.15 – Rayons de protons calculés avec SN2LO1 et SLy5 sur les chaînes d'isotopes des noyaux magiques. En vert, les rayons de protons obtenus par l'expérience.

On a également tracé le comportement des rayons de proton sur les chaînes d'isotopes considérées précédemment sur la figure 6.15. Les données expérimentales proviennent de la base de donnée de UNEDF. On peut y voir que l'on reproduit à nouveau un comportement analogue à celui de SLy4. On ne retrouve pas le changement brutal de pente dans la chaîne du Pb, mais il est possible d'essayer de le contraindre dans de futurs ajustements.

Profils de densité Nous avons tracé les profils de densité pour le Pb. Il peut en effet apparaître des oscillations au niveau de la densité de proton ou de neutron, qui peuvent entraîner des instabilités numériques. On voit que ce n'est pas le cas ici. Il n'est donc pas nécessaire de tenter de le contraindre. On peut encore une fois noter la manière dont Skyrme N2LO ne modifie pas les propriétés de surface, mais plutôt les propriétés de coeur. Ces modifications restent pour autant petites par rapport à SLy5 sur la densité. Les interactions de Skyrme N2LO comportent de nouveaux termes spin-orbites où la dégénérescence est levée entre partie radiale et partie centrifuge. On s'attend donc davantage à pouvoir influencer au niveau des énergies de particules individuelles, ou sur le rapport entre incompressibilité et masse effective. Ces améliorations ne pourraient de toute façon pas être visible sur la densité.

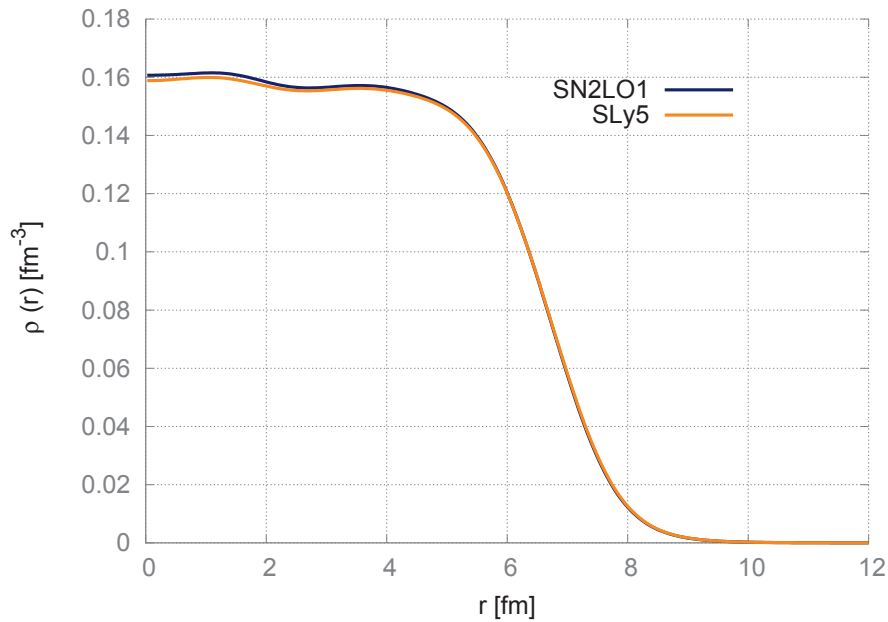


Figure 6.16 – Densité de particule du ^{208}Pb pour SN2LO1 et SLy5 en fonction de r .

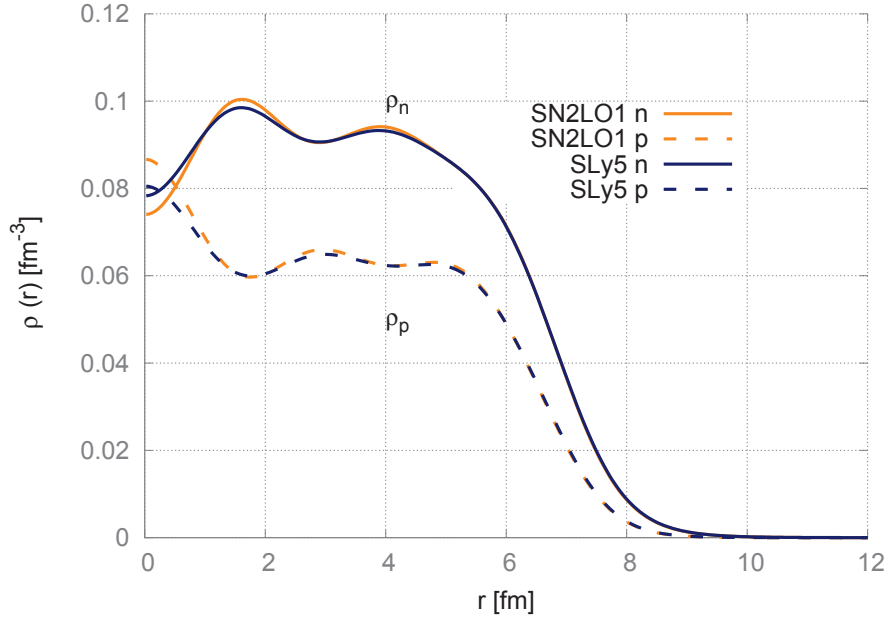


Figure 6.17 – Densité de protons et de neutrons du ^{208}Pb pour SN2LO1 et SLy5 en fonction de r .

6.4.4 Perspectives générales pour un futur ajustement et note d'intention

Nous avons déjà égrainé les quantités que l'on aimerait affiner ou ajouter dans les prochains ajustements. Celles-ci sont pour rappel :

- les énergies de liaison
- une valeur de K_∞ plus proche de 210 MeV sans détériorer la masse effective ²
- incorporer une différence de niveau spin-orbite
- incorporer la réponse linéaire de la matière de neutron

Nous souhaitons également exploiter les nouveaux termes du type spin-orbite apparaissant dans les coefficients de l'équation de champ-moyen de Skyrme N2LO. Ces termes se manifestent en effet jusqu'aux coefficients interagissant dans la dérivée seconde, et possèdent à la fois des termes radiaux et des termes centrifuges. On lève ainsi une dégénérescence en pouvant avoir deux contributions séparées. Ces contributions pourraient être mises à contribution pour résoudre le problème du décalage apparaissant dans les spectres de particules individuelles de la valeur moyenne de la séparation de couches avec un même ℓ (aussi appelée centroïde, voir [28]) ou la fermeture de couches dans les noyaux super-déformés (celle du ^{252}Fe) par exemple. Il n'est pas forcément possible d'inclure de telles contraintes dans l'ajustement, mais notre idée est de réaliser une série d'ajustements afin de voir s'il existe une zone de paramètres permettant de mieux reproduire ces propriétés.

Nous envisageons également très prochainement de commencer un ajustement en utilisant Skyrme N3LO avec des contraintes associées aux propriétés de noyaux. Cet ajustement est motivé par notre étude dans la matière infinie, qui nous a notamment montré que les termes de Skyrme N3LO permettait un réarrangement plus important des termes de Skyrme NLO, en particulier le changement de signe de ceux-ci. Il serait alors possible d'explorer de nouvelles zones de paramètres où les rôles traditionnellement attribués au t1 ou au t2

2. Nous comptons également examiner la corrélation entre K_∞ et la densité ρ .

pourrait être radicalement modifiés. A moyen terme, nous prévoyons également d’incorporer l’appariement, et donc les gaps spectraux pour le contraindre, ainsi que les termes tenseurs de Skyrme NLO et N2LO. Il faut noter que ces introductions sont relativement simples sur le principe : il n’y a aucune nouvelle densité à calculer et, comme nous en avons discuté au chapitre 1, seuls certains coefficients de l’équation différentielle recevront une contribution supplémentaire. Le processus d’ajustement de ces quantités pourra cependant s’avérer plus délicat, en raison des discontinuités éventuelles dans le χ^2 pour l’appariement et des contraintes à trouver pour contraindre les termes tenseurs.

L’un des outils dont nous disposons, mais que nous n’avons pas encore mentionné, est la matrice de covariance. Celle-ci nous permettra, dans une version plus avancée de l’ajustement, de définir des barres d’incertitudes pour chacun des paramètres. Ces barres d’incertitudes nous permettront notamment d’identifier les paramètres qui ne sont pas suffisamment contraints. Le but est ensuite d’introduire des contraintes à même de diminuer la barre d’incertitude du paramètre en question. Des études de ce type ont déjà été menées pour Skyrme NLO [148, 149] ou pour SLyMR1 [141]. En plus de cette utilité pratique, il est bien évidemment important de pouvoir fournir les barres d’incertitudes sur une paramétrisation. Le second outil que nous avons développé pour Skyrme N2LO est la matrice de corrélation. Nous souhaitons, pour la version définitive, pouvoir fournir cette matrice de corrélation pour Skyrme N2LO. Si l’on s’attend à ce que les paramètres $t_1^{(4)}$ et $t_2^{(4)}$ soient corrélés de la même manière que t_1 et t_2 , nous avons également constaté qu’une paramétrisation en n’ajustait que les paramètres Skyrme N2LO à partir d’une interaction Skyrme NLO fixée n’était pas stable, ou que les paramètres N2LO seraient compatibles avec 0. En conséquence, il serait intéressant d’étudier les corrélations entre t_1 et $t_1^{(4)}$ par exemple. Plus de détails sur ces outils peuvent être trouvés dans le travail effectué sur SLyMR1 [141].

Nous avons montré dans ce chapitre comment nous avons obtenu une paramétrisation préliminaire stable SN2LO1 avec des résultats satisfaisants. Nous avons constaté que l’ajustement actuel pouvait encore être amélioré mais il semble désormais évident qu’avec 4 paramètres supplémentaires, nous pouvons viser une reproduction plus précise des observables déjà reproduites par Skyrme NLO et la description de nouvelles observables et propriétés par l’ajout de nouvelles contraintes dans la procédure d’ajustement.

7

Conclusions et Perspectives

Nous avons présenté dans ce manuscrit la construction et le développement d'une interaction de Skyrme de nouvelle génération, enrichie de termes en gradients jusqu'à l'ordre 4. L'objectif principal de la thèse, à savoir l'ajustement de cette interaction sur des contraintes issues de la matière infinie et des noyaux, a été présenté dans la dernière partie. Les études préliminaires effectuées dans la matière infinie ont montré que les nouveaux termes offraient une nouvelle flexibilité, que ce soit avec Skyrme N₂LO ou Skyrme N₃LO, pour reproduire des pseudo-observables que Skyrme NLO n'était pas en mesure de reproduire, comme les canaux nucléaires ou les ondes partielles. Cette étude nous a également permis de déterminer une contrainte sur le signe d'un des termes tenseurs de Skyrme NLO dans la matière infinie. L'application de Skyrme N₃LO à la description des étoiles à neutrons nous a également permis d'explorer le comportement de notre interaction dans la matière asymétrique et polarisée. Le choix d'une telle interaction a été renforcé par l'étude effectuée sur les potentiels à portée finie et sur le lien qui existe entre portée finie et portée nulle. On a ainsi pu voir que Skyrme N₃LO permettait de reproduire, dans la matière infinie, la même physique que les potentiels de portées finies plus riches en ondes partielles.

Nous avons ensuite calculé la fonctionnelle de Skyrme N₂LO afin d'en déduire l'équation de champ-moyen associée. Cette équation du quatrième ordre comporte de nouvelles contributions qui s'avèrent prometteuses pour décrire plus finement la spectroscopie à l'aide de 4 nouveaux termes de spin-orbite. La construction d'un nouveau code numérique fondée sur la méthode de Hooverman a été nécessaire. Cela nous permettra de pouvoir facilement ajouter les termes de Skyrme N₃LO. Nous avons testé la précision et les performances de ce code pour nous assurer de la viabilité de son utilisation dans un protocole d'ajustement.

Les résultats sont particulièrement encourageants dans le sens où nous avons déjà obtenu une paramétrisation de Skyrme N₂LO stable (grâce à la réponse linéaire). Cette paramétrisation offre d'ores et déjà des résultats satisfaisants comparables à SLy4, avec de plus des paramètres et des contributions à l'énergie non négligeables devant Skyrme NLO.

Pour aboutir à un meilleur ajustement, il est maintenant nécessaire d'incorporer une étude des corrélations

entre les paramètres. La corrélation entre les termes en gradients NLO et Skyrme N₂LO, que l'on a pu deviner par l'exploration des paramètres dans la réponse linéaire pour trouver une paramétrisation stable ou par les changements de signes lors de nos ajustements des calculs microscopiques Brückner-Hartree-Fock, pourrait ainsi être estimée et mieux contrôlée. De manière générale, il semble évident que les nouveaux paramètres modifient la matrice de corrélation de Skyrme NLO, et donc facilitent la reproduction d'observables jusqu'alors inaccessibles pour Skyrme NLO, à l'image des valeurs de K_∞ et m^*/m . En parallèle, nous souhaitons également fournir des barres d'incertitudes sur les paramètres de Skyrme N₂LO, pour mieux identifier la physique décrite par les nouveaux termes dans les noyaux. Une telle étude pourrait nous donner un argument supplémentaire, a posteriori, pour l'utilisation de Skyrme N₂LO et le développement jusqu'à Skyrme N₃LO. En particulier, les nouvelles contributions de spin-orbite de Skyrme N₂LO pourraient bénéficier d'une telle étude. En offrant un découplage entre une composante radiale et une composante centrifuge, de tels termes sont jusqu'alors inédits pour les interactions de Skyrme. Ils pourraient significativement améliorer la description des états de particules individuelles et donc les propriétés spectroscopiques de notre interaction (centroïde par exemple). Si cette réalité est avérée, elle pourrait permettre à terme une meilleure description de noyaux lourds, où l'on constate un important réarrangement des couches. Enfin, les liens établis entre Skyrme N₂LO et les potentiels de portées finies mériteraient d'être davantage explorés, en particulier dans les noyaux. Nous avons proposé l'ajout d'une troisième gaussienne à l'interaction de Gogny. Un ajustement dans le cadre de la matière infinie, en reproduisant les canaux et les ondes partielles (pour de bonnes propriétés de diffusions) a déjà été effectué. Nous aimerions maintenant tenter dans un premier temps d'effectuer un ajustement en prenant en compte les noyaux afin d'étudier la flexibilité de cette nouvelle interaction. Nous essaierons ensuite d'ajuster cette nouvelle interaction étendue de Gogny avec le même protocole d'ajustement que Skyrme N₂LO, en y incorporant une détection des instabilités *via* la réponse linéaire pour un terme de portée finie. L'étude que nous avons effectuée établissant les relations de passage entre les paramètres de l'interaction de Skyrme N₃LO et de Gogny dans la matière infinie pourrait permettre d'explorer davantage un tel lien lorsqu'il sera possible de calculer des noyaux et d'ajuster Skyrme N₃LO.

Bibliographie

- [1] H. Yukawa *Proc. Phys. Math. Soc. Japan.*, vol. 17, p. 48, 1935.
- [2] R. V. Reid, “Local phenomenological nucleon-nucleon potentials,” *Annals of Physics*, vol. 50, no. 3, pp. 411 – 448, 1968.
- [3] B. S. Pudliner, V. R. Pandharipande, J. Carlson, S. C. Pieper, and R. B. Wiringa, “Quantum monte carlo calculations of nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 56, pp. 1720–1750, Oct 1997.
- [4] R. Roth and P. Navrátil, “Ab initio,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 092501, Aug 2007.
- [5] S. Binder, J. Langhammer, A. Calci, and R. Roth, “Ab Initio Path to Heavy Nuclei,” *Phys. Lett.*, vol. B736, pp. 119–123, 2014.
- [6] K. Burke, “Perspective on density functional theory,” *The Journal of chemical physics*, vol. 136, no. December 2011, p. 150901, 2012.
- [7] T. H. R. Skyrme *Nucl. Phys.*, vol. 9, p. 615, 1959.
- [8] D. Vautherin and D. M. Brink, “Hartree-Fock Calculations with Skyrme’s Interaction. i. Spherical Nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 5, pp. 626–647, Mar 1972.
- [9] M. Kortelainen, J. McDonnell, W. Nazarewicz, E. Olsen, P.-G. Reinhard, J. Sarich, N. Schunck, S. M. Wild, D. Davesne, J. Erler, and A. Pastore, “Nuclear energy density optimization : Shell structure,” *Phys. Rev. C*, vol. 89, p. 054314, May 2014.
- [10] F. Raimondi, B. G. Carlsson, J. Dobaczewski, and J. Toivanen, “Continuity equation and local gauge invariance for the N₃LO nuclear energy density functionals,” *Phys. Rev. C*, vol. 84, p. 064303, dec 2011.
- [11] F. Raimondi, B. G. Carlsson, J. Dobaczewski, and J. Toivanen, “Effective pseudopotential for energy density functionals with higher-order derivatives,” *Phys. Rev. C*, vol. 83, p. 054311, may 2011.
- [12] D. Gogny, in *Nuclear self-consistent fields*. eds. G. Ripka and M. Porneuf, North Holland, 1975.
- [13] H. Nakada *Phys. Rev. C*, vol. 78, p. 054301, Nov 2008.
- [14] A. Pastore, D. Davesne, and J. Navarro, “Linear response of homogeneous nuclear matter with energy density functionals,” *Physics Reports*, vol. 563, pp. 1 – 67, 2015.
- [15] G. Royer, M. Guilbaud, and A. Onillon, “Macro-microscopic mass formulae and nuclear mass predictions,” *Nuclear Physics A*, vol. 847, no. 1, pp. 24–41, 2010.

- [16] N. Ishii, S. Aoki, and T. Hatsuda, “Nuclear force from lattice qcd,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 022001, Jul 2007.
- [17] E. Epelbaum, H.-W. Hammer, and U.-G. Meißner, “Modern theory of nuclear forces,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 81, pp. 1773–1825, Dec 2009.
- [18] R. Machleidt and I. Slaus, “The nucleon-nucleon interaction,” *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, vol. 27, no. 5, p. R69, 2001.
- [19] J. J. de Swart, R. A. M. M. Klomp, M. C. M. Rentmeester, and T. A. Rijken, “The Nijmegen potentials,” *Few Body Syst. Suppl.*, vol. 8, pp. 438–447, 1995.
- [20] T. Hamada and I. Johnston, “A potential model representation of two-nucleon data below 315 mev,” *Nuclear Physics*, vol. 34, no. 2, pp. 382 – 403, 1962.
- [21] R. Vinh Mau, *The Paris potentials for nucleons and antinucleons*, pp. 1–24. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1985.
- [22] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks, and R. Schiavilla, “Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking,” *Phys. Rev. C*, vol. 51, pp. 38–51, Jan 1995.
- [23] S. Veerasamy and W. N. Polyzou, “Momentum-space argonne v18 interaction,” *Phys. Rev. C*, vol. 84, p. 034003, Sep 2011.
- [24] J. W. Negele, “Structure of finite nuclei in the local-density approximation,” *Phys. Rev. C*, vol. 1, pp. 1260–1321, Apr 1970.
- [25] P. Navrátil, J. P. Vary, and B. R. Barrett, “Properties of ^{12}C in the ab initio nuclear shell model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 84, pp. 5728–5731, Jun 2000.
- [26] R. Machleidt and D. Entem, “Chiral effective field theory and nuclear forces,” *Physics Reports*, vol. 503, no. 1, pp. 1 – 75, 2011.
- [27] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1980.
- [28] T. Lesinski, M. Bender, K. Bennaceur, T. Duguet, and J. Meyer, “Tensor part of the Skyrme energy density functional : Spherical nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 76, p. 014312, Jul 2007.
- [29] M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard *Rev. Mod. Phys.*, vol. 75, p. 121, Jan 2003.
- [30] D. Vautherin and D. M. Brink *Phys. Rev. C*, vol. 5, p. 626, Mar 1972.
- [31] D. Lacroix, T. Duguet, and M. Bender *Phys. Rev. C*, vol. 79, p. 044318, Apr 2009.
- [32] M. Bender, T. Duguet, and D. Lacroix *Phys. Rev. C*, vol. 79, p. 044319, Apr 2009.
- [33] T. Duguet, M. Bender, K. Bennaceur, D. Lacroix, and T. Lesinski *Phys. Rev. C*, vol. 79, p. 044320, Apr 2009.
- [34] J. Sadoudi, *Constraints on the nuclear energy density functional and new possible analytical forms*. PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2011.

- [35] M. Bender, K. Bennaceur, T. Duguet, H. P.H., T. Lesinski, and J. Meyer, “Tensor part of the Skyrme energy density functional,” *Phys. Rev. C*, vol. 80, p. 064302, 2009.
- [36] T. Lesinski, K. Bennaceur, T. Duguet, and J. Meyer *Phys. Rev. C*, vol. 74, p. 044315, Oct 2006.
- [37] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer *Nucl. Phys. A*, vol. 627, p. 710, 1997.
- [38] D. Davesne, M. Martini, K. Bennaceur, and J. Meyer, “Nuclear response for the skyrme effective interaction with zero-range tensor terms,” *Phys. Rev. C*, vol. 80, p. 024314, Aug 2009.
- [39] A. Pastore, D. Davesne, K. Bennaceur, J. Meyer, and V. Hellemans *Phys. Scripta*, vol. T154, p. 014014, 2013.
- [40] H. Sagawa and G. Colò, “Tensor interaction in mean-field and density functional theory approaches to nuclear structure,” *Prog. Part. Nucl. Phys.*, vol. 76, pp. 76–115, 2014.
- [41] M. Brenna, G. Colò, and X. Roca-Maza, “Regularization of zero-range effective interactions in finite nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 90, p. 044316, Oct 2014.
- [42] W. Satuła and J. Dobaczewski, “Simple regularization scheme for multireference density functional theories,” *Phys. Rev. C*, vol. 90, p. 054303, Nov 2014.
- [43] J. Dechargé and D. Gogny *Phys. Rev. C*, vol. 21, p. 1568, 1980.
- [44] M. Anguiano, G. Co’, V. De Donno, and A. M. Lallena *Phys. Rev. C*, vol. 83, p. 064306, Jun 2011.
- [45] M. Anguiano, M. Grasso, G. Co’, V. De Donno, and A. M. Lallena *Phys. Rev. C*, vol. 86, p. 054302, Nov 2012.
- [46] M. Grasso and M. Anguiano *Phys. Rev. C*, vol. 88, p. 054328, Nov 2013.
- [47] R. N. Bernard and M. Anguiano *Nucl. Phys. A*, vol. 953, p. 32, 2016.
- [48] V. Hellemans, A. Pastore, T. Duguet, K. Bennaceur, D. Davesne, J. Meyer, M. Bender, and P.-H. Heenen *Phys. Rev. C*, vol. 88, p. 064323, Dec 2013.
- [49] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 242501, Jun 2009.
- [50] F. Chappert, M. Girod, and S. Hilaire *Phys. Lett. B*, vol. 668, p. 420, 2008.
- [51] F. Chappert, N. Pillet, M. Girod, and J.-F. Berger *Phys. Rev. C*, vol. 91, p. 034312, 2015.
- [52] G. Bertsch, J. Borysowicz, H. McManus, and W. Love *Nucl. Phys. A*, vol. 284, p. 399, 1977.
- [53] H. Nakada *Phys. Rev. C*, vol. 68, p. 014316, Jul 2003.
- [54] H. Nakada *Phys. Rev. C*, vol. 87, p. 014336, 2013.
- [55] N. Anantaraman, H. Toki, and G. Bertsch *Nucl. Phys. A*, vol. 398, p. 269, 1983.
- [56] H. Nakada *Phys. Rev. C*, vol. 92, p. 044307, 2015.
- [57] M. Baldo, I. Bombaci, and G. Burgio *Astron. Astrophys.*, vol. 328, p. 274, 1997.

- [58] F. Raimondi, B. G. Carlsson, J. Dobaczewski, and J. Toivanen *Phys. Rev. C*, vol. 84, p. 064303, Dec 2011.
- [59] J. Dobaczewski and J. Dudek, “Time-odd components in the mean field of rotating superdeformed nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 52, pp. 1827–1839, Oct 1995.
- [60] R. Hofstadter *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, vol. 7, p. 231, 1957.
- [61] C. S. Wang, K. C. Chung, and A. J. Santiago, “Systematics of nuclear central densities,” *Phys. Rev. C*, vol. 60, p. 034310, Aug 1999.
- [62] J. Meyer, *Interactions effectives, Théories de champ moyen, Masses et Rayons nucléaires*. EDP Sciences, 2003.
- [63] J.-F. Berger, *Notes de cours : Structure nucléaires théoriques*. Ecole Joliot-Curie, Janvier 2008.
- [64] D. Davesne, J. Navarro, P. Becker, R. Jodon, J. Meyer, and A. Pastore *Phys. Rev. C*, vol. 91, p. 064303, Jun 2015.
- [65] J. Negele and D. Vautherin, “Density-matrix expansion for an effective nuclear hamiltonian,” *Phys. Rev. C*, vol. 5, p. 1472, 1972.
- [66] R. Nayak, V. S. Uma Maheswari, and L. Satpathy, “Saturation properties and incompressibility of nuclear matter : A consistent determination from nuclear masses,” *Phys. Rev. C*, vol. 52, pp. 711–717, Aug 1995.
- [67] D. Davesne, A. Pastore, and J. Navarro *Astron. Astrophys.*, vol. 585, p. A83, 2015.
- [68] B. Behera, T. R. Routray, and R. K. Satpathy, “Causal violation of the speed of sound and the equation of state of nuclear matter,” *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, vol. 23, no. 4, p. 445, 1997.
- [69] J. Blaizot, “Nuclear compressibilities,” *Physics Reports*, vol. 64, no. 4, pp. 171 – 248, 1980.
- [70] B. Cochet, K. Bennaceur, J. Meyer, P. Bonche, and T. Duguet, “Skyrme forces with extended density dependence,” *Int. J. Mod. Phys.*, vol. E13, pp. 187–190, 2004.
- [71] P. Becker, D. Davesne, J. Meyer, A. Pastore, and J. Navarro *J. Phys. G : Nucl. Part. Phys.*, vol. 42, p. 034001, 2014.
- [72] P.-G. Reinhard, “Skyrme forces and giant resonances in exotic nuclei,” *Nuclear Physics A*, vol. 649, no. 1, pp. 305 – 314, 1999. Giant Resonances.
- [73] N. Alam, B. K. Agrawal, J. N. De, S. K. Samaddar, and G. Colò, “Equation of state of nuclear matter from empirical constraints,” *Phys. Rev. C*, vol. 90, p. 054317, Nov 2014.
- [74] D. Davesne, A. Pastore, and J. Navarro *J. Phys. G : Nucl. Part. Phys.*, vol. 41, p. 065104, 2014.
- [75] T. Lesinski, *Microscopic and Beyond-Mean-Field Constraints for a New Generation of Nuclear Energy Density Functionals*. PhD thesis, Université Claude Bernard Lyon 1, 2008.
- [76] S. Goriely, M. Samyn, M. Bender, and J. M. Pearson *Phys. Rev. C*, vol. 68, p. 054325, Nov 2003.

- [77] K. Washiyama, K. Bennaceur, B. Avez, M. Bender, P.-H. Heenen, and V. Hellemans *Phys. Rev. C*, vol. 86, p. 054309, Nov 2012.
- [78] P. Klüpfel, P.-G. Reinhard, T. J. Bürvenich, and J. A. Maruhn *Phys. Rev. C*, vol. 79, p. 034310, Mar 2009.
- [79] K. Hebeler *private communication*, 2014.
- [80] S. Bogner, A. Schwenk, R. Furnstahl, and A. Nogga *Nucl. Phys. A*, vol. 763, p. 59, 2005.
- [81] V. Rotival, *Fonctionnelles d’Energie non-empiriques pour la structure nucléaire*. PhD thesis, Université Paris-Diderot - Paris VII, 2008.
- [82] M. Kortelainen, R. J. Furnstahl, W. Nazarewicz, and M. V. Stoitsov, “Natural units for nuclear energy density functional theory,” *Phys. Rev. C*, vol. 82, p. 011304, Jul 2010.
- [83] D. Davesne, J. Meyer, A. Pastore, and J. Navarro, “Partial wave decomposition of the N₃LO equation of state,” *Phys. Scripta*, vol. 90, p. 114002, 2015.
- [84] M. Baldo *private communication*, 2014.
- [85] L. G. Cao, U. Lombardo, C. W. Shen, and N. V. Giai, “From brueckner approach to skyrme-type energy density functional,” *Phys. Rev. C*, vol. 73, p. 014313, Jan 2006.
- [86] N. Chamel and P. Haensel *Liv. Rev. Rel.*, vol. 11, no. 10, 2008.
- [87] T. Maruyama, T. Tatsumi, T. Endo, and S. Chiba, “Pasta structures in compact stars,” *Recent Res. Devel. Phys.*, vol. 7, pp. 1–57, 2006.
- [88] M. Baldo, L. M. Robledo, P. Schuck, and X. Viñas, “New kohn-sham density functional based on microscopic nuclear and neutron matter equations of state,” *Phys. Rev. C*, vol. 87, p. 064305, Jun 2013.
- [89] M. Baldo, G. Burgio, M. Centelles, B. Sharma, and X. Viñas, “From the crust to the core of neutron stars on a microscopic basis,” *Physics of Atomic Nuclei*, vol. 77, no. 9, pp. 1157–1165, 2014.
- [90] B. Sharma, M. Centelles, X. Vinas, M. Baldo, and G. Burgio, “Unified equation of state for neutron stars on a microscopic basis,” 2015.
- [91] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 152503, Apr 2009.
- [92] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson *Phys. Rev. C*, vol. 88, p. 024308, Aug 2013.
- [93] G. Burgio and H.-J. Schulze, “The maximum and minimum mass of protonneutron stars in the brueckner theory,” *Astronomy & Astrophysics*, vol. 518, p. A17, 2010.
- [94] N. Chamel, A. Fantina, J. Pearson, and S. Goriely, “Masses of neutron stars and nuclei,” *Physical Review C*, vol. 84, no. 6, p. 062802, 2011.
- [95] C. Fuchs, “Kaon production in heavy ion reactions at intermediate energies,” *Progress in Particle and Nuclear Physics*, vol. 56, no. 1, pp. 1 – 103, 2006.
- [96] P. Danielewicz, R. Lacey, and W. G. Lynch *Science*, vol. 298, p. 1592, 2002.

- [97] P. Danielewicz and J. Lee, “Symmetry energy ii : Isobaric analog states,” *Nuclear Physics A*, vol. 922, pp. 1 – 70, 2014.
- [98] I. Bombaci and U. Lombardo, “Asymmetric nuclear matter equation of state,” *Phys. Rev. C*, vol. 44, pp. 1892–1900, Nov 1991.
- [99] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson, “Further explorations of skyrme-hartree-fock-bogoliubov mass formulas. xii. stiffness and stability of neutron-star matter,” *Phys. Rev. C*, vol. 82, p. 035804, 2010.
- [100] D. Yakovlev, A. Kaminker, Gnedin, Y. Oleg, and P. Haensel, “Neutrino emission from neutron stars,” *Physics Reports*, vol. 354, no. 1, pp. 1–155, 2001.
- [101] B. Bally, B. Avez, M. Bender, and P.-H. Heenen *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 162501, Oct 2014.
- [102] P. Haensel, “Urca processes in dense matter and neutron star cooling,” *Space Science Reviews*, vol. 74, no. 3-4, pp. 427–436, 1995.
- [103] P. Demorest, T. Pennucci, S. Ransom, M. Roberts, and J. Hessels *Nature*, vol. 467, p. 1081, 2010.
- [104] J. Antoniadis, P. C. Freire, N. Wex, T. M. Tauris, R. S. Lynch, M. H. van Kerkwijk, M. Kramer, C. Bassa, V. S. Dhillon, T. Driebe, *et al.*, “A massive pulsar in a compact relativistic binary,” *Science*, vol. 340, no. 6131, p. 1233232, 2013.
- [105] M. Fortin, J. Zdunik, P. Haensel, and M. Bejger, “Neutron stars with hyperon cores : stellar radii and eos near nuclear density,” *arXiv preprint arXiv :1408.3052*, 2014.
- [106] T. Klähn, D. Blaschke, S. Typel, E. N. E. van Dalen, A. Faessler, C. Fuchs, T. Gaitanos, H. Grigorian, A. Ho, E. E. Kolomeitsev, M. C. Miller, G. Röpke, J. Trümper, D. N. Voskresensky, F. Weber, and H. H. Wolter, “Constraints on the high-density nuclear equation of state from the phenomenology of compact stars and heavy-ion collisions,” *Phys. Rev. C*, vol. 74, p. 035802, Sep 2006.
- [107] R. Sellahewa and A. Rios *Phys. Rev. C*, vol. 90, p. 054327, 2014.
- [108] M. Baldo, A. Polls, A. Rios, H.-J. Schulze, and I. Vidaña *Phys. Rev. C*, vol. 86, p. 064001, Dec 2012.
- [109] Gandolfi, S., Carlson, J., Reddy, S., Steiner, A. W., and Wiringa, R. B., “The equation of state of neutron matter, symmetry energy and neutron star structure,” *Eur. Phys. J. A*, vol. 50, no. 2, p. 10, 2014.
- [110] J. Carlson, S. Gandolfi, F. Pederiva, S. C. Pieper, R. Schiavilla, K. E. Schmidt, and R. B. Wiringa, “Quantum monte carlo methods for nuclear physics,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 87, pp. 1067–1118, Sep 2015.
- [111] F. Chappert, *Nouvelles paramétrisations de l’interaction nucléaire effective de Gogny*. PhD thesis, Université de Paris-Sud XI, 2007.
- [112] B. G. Carlsson, J. Dobaczewski, and M. Kortelainen *Phys. Rev. C*, vol. 78, p. 044326, Oct 2008.
- [113] F. Raimondi, B. G. Carlsson, and J. Dobaczewski, “Effective pseudopotential for energy density functionals with higher-order derivatives,” *Phys. Rev. C*, vol. 83, no. 5, p. 54311, 2011.
- [114] D. Davesne, P. Becker, A. Pastore, and J. Navarro *Phys. Rev. C*, vol. 93, p. 064001, 2016.

- [115] A. Pastore, D. Davesne, and J. Navarro *J. Phys. G : Nucl. Part. Phys.*, vol. 41, p. 055103, 2014.
- [116] J. A. Nelder and R. Mead, “A simplex method for function minimization,” *The Computer Journal*, vol. 7, no. 4, p. 308, 1965.
- [117] M. Kortelainen, J. McDonnell, W. Nazarewicz, E. Olsen, P.-G. Reinhard, J. Sarich, N. Schunck, S. M. Wild, D. Davesne, J. Erler, and A. Pastore *Phys. Rev. C*, vol. 89, p. 054314, May 2014.
- [118] B. G. Carlsson and J. Dobaczewski *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 122501, Sep 2010.
- [119] J. Dobaczewski, B. Carlsson, and M. Kortelainen *J. Phys. G : Nucl. Part. Phys.*, vol. 37, p. 075106, 2010.
- [120] D. Davesne, A. Pastore, and J. Navarro *J. Phys. G : Nucl. Part. Phys.*, vol. 40, p. 095104, 2013.
- [121] J.-P. Blaizot and G. Ripka, *Quantum theory of finite systems*. MIT press Cambridge, 1986.
- [122] Y. Engel, D. Brink, K. Goeke, S. Krieger, and D. Vautherin *Nucl. Phys. A*, vol. 249, p. 215, 1975.
- [123] J. Bell and T. Skyrme *Phil. Mag.*, vol. 1, p. 1055, 1956.
- [124] G. Bertsch *Z. Phys. A*, vol. 289, p. 103, 1978.
- [125] P. Ring and P. Schuck, *The nuclear many-body problem*. Springer, 1980.
- [126] L. F. Cohen-Tannoudji . Claude, Diu . Bernard, “Mécanique quantique,” in *Mécanique quantique*, p. 889, Hermann, 1997.
- [127] R. Hooverman, “A technique for numerical solution of the schroedinger equation with non-local potentials,” *Nuclear Physics A*, vol. 189, no. 1, pp. 155–160, 1972.
- [128] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*. Courier Corporation, 1964.
- [129] K. Bennaceur, “Unpublished,”
- [130] W. Ryssens, *Symmetry breaking in nuclear mean-field models*. PhD thesis, Université libre de Bruxelles, 2016.
- [131] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, T. R. Werner, J. F. Berger, C. R. Chinn, and J. Dechargé, “Mean-field description of ground-state properties of drip-line nuclei : Pairing and continuum effects,” *Phys. Rev. C*, vol. 53, pp. 2809–2840, Jun 1996.
- [132] I. Hamamoto and B. R. Mottelson, “Pair correlation in neutron drip line nuclei,” *Physical Review C*, vol. 68, no. 3, p. 034312, 2003.
- [133] G. Bertsch and H. Esbensen, “Pair correlations near the neutron drip line,” *Annals of Physics*, vol. 209, no. 2, pp. 327–363, 1991.
- [134] J. Dobaczewski, H. Flocard, and J. Treiner, “Hartree-fock-bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line,” *Nuclear Physics A*, vol. 422, no. 1, pp. 103 – 139, 1984.
- [135] A. Bulgac and Y. Yu, “Renormalization of the hartree-fock-bogoliubov equations in the case of a zero range pairing interaction,” *Physical review letters*, vol. 88, no. 4, p. 042504, 2002.

- [136] P. Borycki, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and M. Stoitsov, “Pairing renormalization and regularization within the local density approximation,” *Physical Review C*, vol. 73, no. 4, p. 044319, 2006.
- [137] M. Anguiano, J. Egidio, and L. Robledo, “Particle number projection with effective forces,” *Nuclear Physics A*, vol. 696, no. 3-4, pp. 467–493, 2001.
- [138] Staszczak, A., Stoitsov, M., Baran, A., and Nazarewicz, W., “Augmented lagrangian method for constrained nuclear density functional theory,” *Eur. Phys. J. A*, vol. 46, no. 1, pp. 85–90, 2010.
- [139] K. Bennaceur and J. Dobaczewski, “Coordinate-space solution of the skyrme–hartree–fock–bogolyubov equations within spherical symmetry. the program hfbrad (v1. 00),” *Computer physics communications*, vol. 168, no. 2, pp. 96–122, 2005.
- [140] P. Becker, D. Davesne, J. Meyer, J. Navarro, and A. Pastore, “Solution of hartree-fock-bogoliubov equations and fitting procedure using the n2lo skyrme pseudopotential in spherical symmetry,” *Phys. Rev. C*, vol. 96, p. 044330, Oct 2017.
- [141] R. Jodon, *Fonctionnelles effectives et pseudo-potentiels pour la structure nucléaire*. PhD thesis, Université de Lyon, 2014.
- [142] R. B. Wiringa, V. Fiks, and A. Fabrocini, “Equation of state for dense nucleon matter,” *Phys. Rev. C*, vol. 38, pp. 1010–1037, Aug 1988.
- [143] A. Pastore, D. Davesne, Y. Lallouet, M. Martini, K. Bennaceur, and J. Meyer, “Nuclear response for the skyrme effective interaction with zero-range tensor terms. ii. sum rules and instabilities,” *Phys. Rev. C*, vol. 85, p. 054317, May 2012.
- [144] A. Pastore, M. Martini, V. Buridon, D. Davesne, K. Bennaceur, and J. Meyer, “Nuclear response for the skyrme effective interaction with zero-range tensor terms. iii. neutron matter and neutrino propagation,” *Phys. Rev. C*, vol. 86, p. 044308, Oct 2012.
- [145] K. Bennaceur, *Fonctionnelles effectives et pseudo-potentiels pour la structure nucléaire, HDR*. 2015.
- [146] M. Wang, G. Audi, A. Wapstra, F. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer, “The ame2012 atomic mass evaluation,” *Chinese Physics C*, vol. 36, no. 12, p. 1603, 2012.
- [147] I. Angeli and K. P. Marinova, “Table of experimental nuclear ground state charge radii : An update,” *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, vol. 99, no. 1, pp. 69–95, 2013.
- [148] X. Roca-Maza, N. Paar, and G. Colò, “Covariance analysis for energy density functionals and instabilities,” *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, vol. 42, no. 3, p. 34033, 2015.
- [149] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and P-G. Reinhard, “Error estimates of theoretical models : a guide,” *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, vol. 41, no. 7, p. 074001, 2014.

A

Ondes partielles dans le potentiel de Skyrme

A.1 Contributions des ondes partielles dans le potentiel de Skyrme

La manière dont apparaît la contribution en moment orbital à l'intérieur du pseudo-potentiel est ici explicitée. Quand on a un terme du type $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')$, il est aussi égal à :

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' = |k||k'| \cos \omega_{kk'}, \quad (\text{A.1})$$

où $|k|$ est le module de \mathbf{k} et $\omega_{kk'}$ est l'angle entre les vecteur \mathbf{k} et \mathbf{k}' .

Or, on sait que le polynôme de Legendre $P_1(\cos \omega_{kk'}) = \cos \omega_{kk'}$.

De plus, on sait que l'on peut développer ces polynômes de Legendre sur une base d'harmoniques sphériques :

$$P_l(\cos \omega_{12}) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_m Y_{\ell m}^*(\Omega_1) Y_{\ell m}(\Omega_2) \quad (\text{A.2})$$

On voit donc bien que le cosinus correspond à des contributions en $\ell = 1$:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' = |k||k'| \times \frac{4\pi}{3} \sum_m Y_{1m}^*(\Omega_1) Y_{1m}(\Omega_2). \quad (\text{A.3})$$

De la même manière,

$$P_2(\cos \omega_{kk'}) = \frac{1}{4} (3 \cos 2\omega_{kk'} + 1), \quad (\text{A.4})$$

un terme comme $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')^2$ de l'équation 2.26 fait apparaître un $\cos^2 \omega_{kk'}$ qui, par des transformations trigonométriques, fera apparaître un $P_2(\cos \omega_{kk'})$ et donc une contribution de moment orbital $\ell = 2$.

Ainsi, on peut clairement faire apparaître l'onde D :

$$\begin{aligned} \cos^2(\omega_{kk'}) &= \frac{2}{3}P_2(\cos \omega_{kk'}) + \frac{1}{3} \\ &= \frac{8\pi}{15} \sum_m Y_{2m}^*(\Omega_1)Y_{2m}(\Omega_2) + \frac{1}{3}. \end{aligned} \tag{A.5}$$

B

Compléments sur la matière infinie

B.1 Equation d'état de la matière infinie asymétrique

L'équation d'état de la matière asymétrique s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{E}{N}|_{Asym} &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} a^2 F_{5/3} n^{2/3} + \frac{1}{8} [3 - (2x_0^{(0)} + 1)Y^2] t_0^{(0)} n \\ &+ \frac{1}{48} [3 - (2x_3 + 1)Y^2] t_3 n^{\alpha+1} \\ &+ \frac{3}{80} a^2 [C_0^{(2)} F_{5/3} + C_1^{(2)} Y G_{5/3}] n^{5/3} \\ &+ \frac{3}{1120} a^4 [C_0^{(4)} (5F_{7/3} + 7F_{5/3}^2) + C_1^{(4)} (5Y G_{7/3} + 7G_{5/3}^2)] n^{7/3} \\ &+ \frac{1}{240} a^6 [C_0^{(6)} (5F_3 + 27F_{7/3} F_{5/3}) + C_1^{(6)} (5Y G_3 + 27G_{7/3} G_{5/3})] n^3 . \quad (B.1) \end{aligned}$$

avec les coefficients

$$F_x = \frac{1}{2} [(1+Y)^x + (1-Y)^x] , \quad (B.2)$$

$$G_x = \frac{1}{2} [(1+Y)^x - (1-Y)^x] . \quad (B.3)$$

B.2 Compléments sur l'utilisation de Skyrme N₃LO pour les étoiles à neutrons

La masse effective en fonction du paramètre d'asymétrie s'écrit :

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{2m_n^*} - \frac{\hbar^2}{2m_n} &= \frac{1}{16} \left(C_0^{(2)} + C_1^{(2)} Y \right) \rho + \frac{1}{16} a^2 \left[\left(C_0^{(4)} + C_1^{(4)} Y \right) (F_{2/3} + G_{2/3}) + C_0^{(4)} F_{5/3} + C_1^{(4)} G_{5/3} \right] \rho^{5/3}, \\
&+ \frac{1}{16} a^4 \left[3(C_0^{(6)} + C_1^{(6)} Y)(F_{4/3} + G_{4/3}) \right. \\
&+ \left. \frac{42}{5} (C_0^{(6)} F_{5/3} + C_1^{(6)} G_{5/3})(F_{2/3} + G_{2/3}) + 3(C_0^{(6)} F_{7/3} + C_1^{(6)} G_{7/3}) \right] \rho^{7/3}. \tag{B.4}
\end{aligned}$$

Les équations de Tolman-Oppenheimer-Volkov (TOV) s'écrivent :

$$\begin{aligned}
\frac{dP(r)}{dr} &= -\frac{Gm(r)\varepsilon(r)}{r^2} \left[\left(1 + \frac{P(r)\varepsilon(r)}{c^2} \right) \left(1 + \frac{4\pi r^3 P(r)}{\varepsilon(r)c^2} \right) \right] \left[1 - \frac{2Gm(r)}{rc^2} \right]^{-1}, \\
\frac{dm(r)}{dr} &= 4\pi r^2 \varepsilon(r). \tag{B.5}
\end{aligned}$$



Formulaire pour les interactions de Gogny et de M₃Y

C.1 Pseudo-observables de la matière infinie des potentiels à portée finie de Gogny et M₃Y

On énumère dans cette section les équations d'états pour la matière infinie :

C.1.1 Equations d'état des potentiels de Gogny et M₃Y

Interaction de Gogny Les équations d'état s'écrivent de la matière infinie symétrique et de neutrons pour l'interaction de Gogny s'écrivent :

$$\begin{aligned}\mathcal{V}^{SNM} &= \sum_{i=1}^2 \frac{4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i}{12\sqrt{\pi}} (k_F \mu_i^C)^3 \\ &\quad - \sum_{i=1}^2 \frac{W_i + 2B_i - 2H_i - 4M_i}{2\sqrt{\pi}} G(k_F \mu_i^C) + \frac{3}{8} t^{(DD)} \rho^{\alpha+1} \\ \mathcal{V}^{PNM} &= \sum_{i=1}^2 \frac{2W_i + B_i - 2H_i - M_i}{12\sqrt{\pi}} (k_{Fn} \mu_i^C)^3, \\ &\quad - \sum_{i=1}^2 \frac{W_i + 2B_i - H_i - 2M_i}{2\sqrt{\pi}} G(k_{Fn} \mu_i^C) + \frac{1}{4} t^{(DD)} (1 - x^{(DD)}) \rho_n^{\alpha+1},\end{aligned}$$

avec la fonction G(a) :

$$G(a) = \frac{1}{a^3} \left[e^{-a^2} [a^2 - 2] + 2 - 3a^2 + \sqrt{\pi} a^3 \text{Erf}(a) \right].$$

La fonction $\text{Erf}(x)$ est la fonction erreur [128].

Interaction M₃Y Les équations d'état s'écrivent de la matière infinie symétrique et de neutrons pour l'interaction M₃Y s'écrivent :

$$\begin{aligned}\mathcal{V}^{SNM} &= \sum_{i=1}^3 \frac{3t_i^{(SE)} + t_i^{(SO)} + 3t_i^{(TE)} + 9t_i^{(TO)}}{12\pi} \left(\frac{k_F}{\mu_i^C}\right)^3 \\ &\quad - \sum_{i=1}^3 \frac{-3t_i^{(SE)} + t_i^{(SO)} - 3t_i^{(TE)} + 9t_i^{(TO)}}{4\pi} Y\left(\frac{k_F}{\mu_i^C}\right) + \frac{3}{8}t^{(dd)}\rho^{\alpha+1}, \\ \mathcal{V}^{PNM} &= \sum_{i=1}^3 \frac{t_i^{(SE)} + 3t_i^{(TO)}}{6\pi} \left(\frac{k_F}{\mu_i^C}\right)^3 - \sum_{i=1}^3 \frac{-t_i^{(SE)} + 3t_i^{(TO)}}{2\pi} Y\left(\frac{k_F}{\mu_i^C}\right) + \frac{1}{4}t^{(DD)} [1 - x^{(DD)}] \rho^{\alpha+1},\end{aligned}$$

avec

$$Y(a) = \frac{1}{32a^3} \left[4a^2 (6a^2 - 1) - 32a^3 \arctan(2a) + (1 + 12a^2) \ln(1 + 4a^2) \right].$$

C.1.2 Contributions des canaux (S, T) aux équations d'états de Gogny et M₃Y

Les décompositions en canaux (S,T) des deux potentiels à portée finie abordée dans le manuscrit sont :

Interaction de Gogny

$$\begin{aligned}\mathcal{V}^{(0,0)} &= \sum_{i=1}^2 (W_i - B_i + H_i - M_i) G^{(0,0)}(k_F \mu_i^C), \\ \mathcal{V}^{(0,1)} &= 3 \sum_{i=1}^2 (W_i - B_i - H_i + M_i) G^{(0,1)}(k_F \mu_i^C) + \frac{3}{16}t^{(DD)}(1 - x^{(DD)})\rho^{\alpha+1}, \\ \mathcal{V}^{(1,0)} &= 3 \sum_{i=1}^2 (W_i + B_i + H_i + M_i) G^{(1,0)}(k_F \mu_i^C) + \frac{3}{16}t^{(DD)}(1 + x^{(DD)})\rho^{\alpha+1}, \\ \mathcal{V}^{(1,1)} &= 9 \sum_{i=1}^2 (W_i + B_i - H_i - M_i) G^{(1,1)}(k_F \mu_i^C),\end{aligned}$$

avec

$$G^{(S,T)}(a) = \frac{1}{48\sqrt{\pi}} \left[a^3 - 6(-1)^{S+T} G(a) \right].$$

La fonction $G(a)$ a été définie dans C.1.1.

Interaction M₃Y

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}^{(0,0)} &= \sum_n t_n^{(SO)} Y^{(0,0)} \left(\frac{k_F}{\mu_n^C} \right), \\
\mathcal{V}^{(0,1)} &= 3 \sum_n t_n^{(SE)} Y^{(0,1)} \left(\frac{k_F}{\mu_n^C} \right) + \frac{3}{16} t^{(DD)} (1 - x^{(DD)}) \rho^{\alpha+1}, \\
\mathcal{V}^{(1,0)} &= 3 \sum_n t_n^{(TE)} Y^{(1,0)} \left(\frac{k_F}{\mu_n^C} \right) + \frac{3}{16} t^{(DD)} (1 + x^{(DD)}) \rho^{\alpha+1}, \\
\mathcal{V}^{(1,1)} &= 9 \sum_n t_n^{(TO)} Y^{(1,1)} \left(\frac{k_F}{\mu_n^C} \right),
\end{aligned}$$

où

$$Y^{(S,T)}(a) = \frac{1}{12\pi} \left[a^3 - 3(-1)^{S+T} Y(a) \right].$$

La fonction $Y(a)$ a été définie dans C.1.1.

C.2 Contributions des ondes partielles pour $L < 3$ aux équations d'états de Gogny et M₃Y

Interaction de Gogny

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}^{(1S_0)} &= 3 \sum_{n=1}^2 \left[W^{(n)} - B^{(n)} - H^{(n)} + M^{(n)} \right] G_0^{(C)}(k_F \mu_n^C), \\
\mathcal{V}^{(1P_1)} &= 3 \sum_{n=1}^2 \left[W^{(n)} - B^{(n)} + H^{(n)} - M^{(n)} \right] G_1^{(C)}(k_F \mu_n^C), \\
\mathcal{V}^{(1D_2)} &= 15 \sum_{n=1}^2 \left[W^{(n)} - B^{(n)} - H^{(n)} + M^{(n)} \right] G_2^{(C)}(k_F \mu_n^C), \\
\mathcal{V}^{(1F_3)} &= 7 \sum_{n=1}^2 \left[W^{(n)} - B^{(n)} + H^{(n)} - M^{(n)} \right] G_3^{(C)}(k_F \mu_n^C),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}({}^3S_1) &= 3 \sum_{n=1}^2 \left[W^{(n)} + B^{(n)} + H^{(n)} + M^{(n)} \right] G_0^{(C)}(k_F \mu_n^C) + \frac{3}{8} t^{(DD)} \rho^{\alpha+1}, \\
\mathcal{V}({}^3P_{J=0,1,2}) &= 3(2J+1) \sum_{n=1}^2 \left[W^{(n)} + B^{(n)} - H^{(n)} - M^{(n)} \right] G_1^{(C)}(k_F \mu_n^C) \\
&\quad + \frac{W_0}{80} \rho k_F^2 \{2\delta_{J,0} + 3\delta_{J,1} - 5\delta_{J,2}\} \\
&\quad + (V_{T1} + V_{T2})(\mu^T)^2 G_1^{(T)}(k_F \mu^T) \{2\delta_{J,0} - 3\delta_{J,1} + \delta_{J,2}\}, \\
\mathcal{V}({}^3D_{J=1,2,3}) &= (2J+1) \sum_{n=1}^2 \left[W^{(n)} + B^{(n)} + H^{(n)} + M^{(n)} \right] G_2^{(C)}(k_F \mu_n^C) \\
&\quad + (V_{T1} - V_{T2})(\mu^T)^2 G_2^{(T)}(k_F \mu^T) \{3\delta_{J,1} - 5\delta_{J,2} + 2\delta_{J,3}\}, \\
\mathcal{V}({}^3F_{J=2,3,4}) &= 3(2J+1) \sum_{n=1}^2 \left[W^{(n)} + B^{(n)} - H^{(n)} - M^{(n)} \right] G_3^{(C)}(k_F \mu_n^C) \\
&\quad + (V_{T1} + V_{T2})(\mu^T)^2 G_3^{(T)}(k_F \mu^T) \{3\delta_{J,1} - 5\delta_{J,2} + 2\delta_{J,3}\}.
\end{aligned}$$

Les $\delta_{J,x}$ avec $x = 1, 2, 3 \dots$ sont les deltas de Kronecker. Les fonctions $G_{j=0,1,\dots}^{(C,T)}$ sont définies comme :

$$\begin{aligned}
G_0^{(C)}(a) &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}a^3} \left\{ -2 + 6a^2 + 3a^4 + 2(1 - 2a^2)e^{-a^2} - 4a^3\sqrt{\pi}\text{Erf}(a) \right\}, \\
G_1^{(C)}(a) &= \frac{3}{8\sqrt{\pi}a^3} \left\{ 2 + 2a^2 + a^4 - 2(1 + 2a^2)e^{-a^2} - 4a^3\sqrt{\pi}\text{Erf}(a) + 4a^2S(a) \right\}, \\
G_2^{(C)}(a) &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}a^3} \left\{ 26 - 30a^2 + 3a^4 - (26 + 20a^2)e^{-a^2} - 20a^3\sqrt{\pi}\text{Erf}(a) \right. \\
&\quad \left. + (24 + 36a^2)S(a) \right\}, \\
G_3^{(C)}(a) &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}a^5} \left\{ 72 - 14a^2 - 114a^4 + 3a^6 - (72 + 58a^2 + 28a^4)e^{-a^2} \right. \\
&\quad \left. - 28a^5\sqrt{\pi}\text{Erf}(a) + a^2(120 + 72a^2)S(a) \right\}, \\
G_1^{(T)}(a) &= \frac{9}{40\sqrt{\pi}a^3} \left\{ 6 - 6a^2 - a^4 - 6e^{-a^2} + 4a^2S(a) \right\}, \\
G_2^{(T)}(a) &= \frac{3}{40\sqrt{\pi}a^3} \left\{ 10 - 34a^2 - a^4 - 10e^{-a^2} + 12(2 + a^2)S(a) \right\}, \\
G_3^{(T)}(a) &= \frac{9}{40\sqrt{\pi}a^5} \left\{ 120 - 94a^2 - 86a^4 - a^6 - (120 + 26a^2)e^{-a^2} + 24a^2(5 + a^2)S(a) \right\},
\end{aligned}$$

with

$$S(a) = \gamma - \text{Ei}(-a^2) + \ln(a^2),$$

γ est la contante d'Euler et Ei l'intégrale exponentielle [128].

Interaction M₃Y

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}({}^1S_0) &= \sum_n 3t_n^{(SE)} Y_0^{(C)}(k_F/\mu_n^C) + \frac{3}{16} t^{(DD)} (1 - x^{(DD)}) \rho^{\alpha+1}, \\
\mathcal{V}({}^1P_1) &= \sum_n 3t_n^{(SO)} Y_1^{(C)}(k_F/\mu_n^C), \\
\mathcal{V}({}^1D_2) &= \sum_n 15t_n^{(SE)} Y_2^{(C)}(k_F/\mu_n^C), \\
\mathcal{V}({}^1F_3) &= \sum_n 7t_n^{(SE)} Y_3^{(C)}(k_F/\mu_n^C), \\
\\
\mathcal{V}({}^3S_1) &= \sum_n 3t_n^{(TE)} Y_0^{(C)}(k_F/\mu_n^C) + \frac{3}{16} t^{(DD)} (1 + x^{(DD)}) \rho^{\alpha+1}, \\
\mathcal{V}({}^3P_{J=0,1,2}) &= \sum_n 3(2J+1)t_n^{(TO)} Y_1^{(C)}(k_F/\mu_n^C) \\
&\quad + \sum_n t_n^{(LSO)} Y_1^{(C)}(k_F/\mu_n^{SO}) \{2\delta_{J,0} + 3\delta_{J,1} - 5\delta_{J,2}\} \\
&\quad + \sum_n \frac{9}{80\pi} \frac{t_n^{TNO}}{(\mu_n^T)^2} Y_1^{(T)}(k_F/\mu_n^T) \{2\delta_{J,0} - 3\delta_{J,1} + \delta_{J,2}\}, \\
\mathcal{V}({}^3D_{J=1,2,3}) &= \sum_n (2J+1)t_n^{(TE)} Y_2^{(C)}(k_F/\mu_n^C) \\
&\quad + \frac{1}{3} \sum_n t_n^{(LSE)} Y_2^{(C)}(k_F/\mu_n^{SO}) \{9\delta_{J,1} + 5\delta_{J,2} - 14\delta_{J,3}\} \\
&\quad + \sum_n \frac{3}{80\pi} \frac{t_n^{(TNE)}}{(\mu_n^T)^2} Y_2^{(T)}(k_F/\mu_n^T) \{3\delta_{J,1} - 5\delta_{J,2} + 2\delta_{J,3}\}, \\
\mathcal{V}({}^3F_{J=2,3,4}) &= \sum_n 3(2J+1)t_n^{(TO)} Y_3^{(C)}(k_F/\mu_n^C) \\
&\quad + \sum_n t_n^{(LSO)} Y_3^{(C)}(k_F/\mu_n^{SO}) \{20\delta_{J,2} + 7\delta_{J,3} - 27\delta_{J,4}\} \\
&\quad + \sum_n \frac{9}{160\pi} \frac{t_n^{(TNO)}}{(\mu_n^T)^2} Y_3^{(T)}(k_F/\mu_n^T) \{4\delta_{J,2} - 7\delta_{J,3} + 3\delta_{J,4}\}.
\end{aligned}$$

$\delta_{J,x}$ avec $x = 1, 2, 3 \dots$ est le delta de Kronecker. Les fonctions $Y_{j=0,1,\dots}^{(C,T)}$ sont définies comme :

$$Y_0^{(C)}(a) = \frac{1}{128\pi a^3} \left\{ 4a^2 - 168a^4 + 128a^3 \arctan(2a) + (-1 - 24a^2 + 48a^4) \ln(1 + 4a^2) \right\},$$

$$Y_1^{(C)}(a) = \frac{3}{128\pi a^3} \left\{ -4a^2 - 88a^4 + 128a^3 \arctan(2a) \right. \\ \left. + (1 - 24a^2 + 16a^4) \ln(1 + 4a^2) + 16a^2 \text{Li}_2(-4a^2) \right\},$$

$$Y_2^{(C)}(a) = \frac{1}{128\pi a^3} \left\{ -172a^2 - 312a^4 + 640a^3 \arctan(2a) \right. \\ \left. + (31 - 24a^2 + 48a^4) \ln(1 + 4a^2) + 12(-1 + 12a^2) \text{Li}_2(-4a^2) \right\},$$

$$Y_3^{(C)}(a) = \frac{1}{128\pi a^5} \left\{ 12a^2 - 596a^4 - 344a^6 + 896a^5 \arctan(2a) \right. \\ \left. + (-3 + 83a^2 + 168a^4 + 48a^6) \ln(1 + 4a^2) + 12a^2(-5 + 24a^2) \text{Li}_2(-4a^2) \right\},$$

$$Y_1^{(T)}(a) = \frac{1}{a^3} \left\{ 4a^2(3 - 2a^2) - 3(1 + 4a^2) \ln(1 + 4a^2) - 8a^2 \text{Li}_2(-4a^2) \right\},$$

$$Y_2^{(T)}(a) = \frac{1}{a^3} \left\{ 4a^2(29 - 2a^2) - 17(1 + 4a^2) \ln(1 + 4a^2) + 12(1 - 2a^2) \text{Li}_2(-4a^2) \right\},$$

$$Y_3^{(T)}(a) = \frac{1}{a^5} \left\{ -4a^2(15 - 176a^2 + 4a^4) + (15 - 26a^2 - 344a^4) \ln(1 + 4a^2) + 24a^2(5 - 4a^2) \text{Li}_2(-4a^2) \right\}.$$

$\text{Li}_2(z)$ est la fonction polylogarithmique définie dans l'équation (27.7.1) de la référence [128].

C.3 Relations de passage entre les paramètres de Skyrme N₃LO et les paramètres de l'interaction de Gogny et de M₃Y

Dans les formules qui suivent, on suppose une sommation sur les portées (et les paramètres associés) :

C.3.1 Skyrme-Gogny

Les relations d'équivalences entre les paramètres de l'interaction de Skyrme et l'interaction de Gogny sont :

$$\begin{aligned}
t_0 &= \frac{2\pi^{3/2}}{3}(W + M)\mu^3, & t_0x_0 &= \frac{2\pi^{3/2}}{3}(B + H)\mu^3 \\
t_1 &= -\frac{\pi^{3/2}}{3}(W + M)\mu^5, & t_1x_1 &= -\frac{\pi^{3/2}}{3}(B + H)\mu^5 \\
t_1^{(4)} &= \frac{\pi^{3/2}}{24}(W + M)\mu^7, & t_1^{(4)}x_1^{(4)} &= \frac{\pi^{3/2}}{24}(B + H)\mu^7 \\
t_1^{(6)} &= -\frac{\pi^{3/2}}{288}(W + M)\mu^9, & t_1^{(6)}x_1^{(6)} &= -\frac{\pi^{3/2}}{288}(B + H)\mu^9 \\
t_2 &= \frac{\pi^{3/2}}{18}(5W - 4B + 4H - 5M)\mu^5, & t_2x_2 &= \frac{\pi^{3/2}}{18}(-4W + 5B - 5H + 4M)\mu^5 \\
t_2^{(4)} &= -\frac{\pi^{3/2}}{36}(5W - 4B + 4H - 5M)\mu^7, & t_2^{(4)}x_2^{(4)} &= -\frac{\pi^{3/2}}{36}(-4W + 5B - 5H + 4M)\mu^7 \\
t_2^{(6)} &= \frac{\pi^{3/2}}{864}(5W - 4B + 4H - 5M)\mu^9, & t_2^{(6)}x_2^{(6)} &= \frac{\pi^{3/2}}{864}(-4W + 5B - 5H + 4M)\mu^9
\end{aligned}$$

C.3.2 Skyrme-M₃Y

Les relations d'équivalences entre les paramètres de l'interaction de Skyrme et l'interaction M₃Y sont :

$$\begin{aligned}
t_0 &= \frac{\pi}{\mu^3} \left(t^{(SE)} + t^{(TE)} \right), & t_0x_0 &= \frac{\pi}{\mu^3} \left(-t^{(SE)} + t^{(TE)} \right) \\
t_1 &= -\frac{2\pi}{\mu^5} \left(t^{(SE)} + t^{(TE)} \right), & t_1x_1 &= -\frac{2\pi}{\mu^3} \left(-t^{(SE)} + t^{(TE)} \right) \\
t_2 &= \frac{2\pi}{\mu^5} \left(t^{(SO)} + t^{(TO)} \right), & t_2x_2 &= \frac{2\pi}{\mu^5} \left(-t^{(SO)} + t^{(TO)} \right) \\
t_1^{(4)} &= \frac{4\pi}{\mu^7} \left(t^{(SE)} + t^{(TE)} \right), & t_1^{(4)}x_1^{(4)} &= \frac{4\pi}{\mu^7} \left(-t^{(SE)} + t^{(TE)} \right) \\
t_2^{(4)} &= -\frac{4\pi}{\mu^7} \left(t^{(SO)} + t^{(TO)} \right), & t_2^{(4)}x_2^{(4)} &= -\frac{4\pi}{\mu^7} \left(-t^{(SO)} + t^{(TO)} \right) \\
t_1^{(6)} &= -\frac{2\pi}{\mu^9} \left(t^{(SE)} + t^{(TE)} \right), & t_1^{(6)}x_1^{(6)} &= -\frac{2\pi}{\mu^9} \left(-t^{(SE)} + t^{(TE)} \right) \\
t_2^{(6)} &= \frac{2\pi}{\mu^9} \left(t^{(SO)} + t^{(TO)} \right), & t_2^{(6)}x_2^{(6)} &= \frac{2\pi}{\mu^9} \left(-t^{(SO)} + t^{(TO)} \right)
\end{aligned}$$

C.4 Compléments sur l'invariance de jauge du spin-orbite de portée finie

Potentiel de portée finie général On veut montrer qu'un terme spin-orbite de portée finie ne respecte pas l'invariance de jauge.

Soit un spin-orbite à deux corps général où μ est la portée de l'interaction :

$$\begin{aligned}
V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{1}{\Omega} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{\mu\sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{\mu^2}} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}_{12}) \cdot \mathbf{S}_{12} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{\Omega} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{\mu\sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{\mu^2}} (\mathbf{r} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{\Omega} \int d^3\mathbf{r} \frac{1}{\mu\sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{\mu^2}} (\mathbf{r} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} \sum_{L,M} 4\pi(i)^L Y_{LM}^*(\widehat{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}) Y_{LM}(\hat{\mathbf{r}}) j_L(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|r) \\
&= \frac{1}{\Omega} \int d^3\mathbf{r} \frac{1}{\mu\sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{\mu^2}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1M'}(\hat{\mathbf{r}}) (\mathbf{e} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} \sum_{L,M} 4\pi(i)^L Y_{LM}^*(\widehat{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}) Y_{LM}(\hat{\mathbf{r}}) j_L(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|r) \\
&= \frac{4i\pi}{\Omega} \int dr r^2 \frac{1}{\mu\sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{\mu^2}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r (\mathbf{e} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} Y_{1M'}^*(\widehat{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}) j_1(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|r) \\
&= \frac{4i\pi}{\Omega} \frac{1}{\mu\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(\int dr r^2 e^{-\frac{r^2}{\mu^2}} r j_1(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|r) \right) Y_{1M'}^*(\widehat{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}) (\mathbf{e} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} \\
&= \frac{4i\pi}{\Omega} \frac{1}{\mu\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{\sqrt{\pi}}{8} e^{-\frac{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}{4\mu^2}} \mu^5 |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| Y_{1M'}^*(\widehat{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}) (\mathbf{e} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} \\
&= \frac{4i\pi}{\Omega} \frac{\mu^4}{8} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} e^{-\frac{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}{4\mu^2}} ((\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} \\
&\equiv iW_0 e^{-\frac{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}{4\mu^2}} (\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} \\
&\simeq iW_0 (\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} \left[1 - \frac{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}{4\mu^2} + \dots \right] \\
&\simeq iW_0 (\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12} \left[1 - \frac{1}{4\mu^2} (\mathbf{k}'^2 + \mathbf{k}^2 - 2\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) + \dots \right]
\end{aligned}$$

Il est montré dans l'article [10] que les termes du type $\mathbf{k}^2(\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12}$ ainsi que $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')(\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12}$ ne sont pas invariants de jauge, contrairement au terme de portée nulle simplement en $(\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}_{12}$ de Skyrme standard.

Un terme de spin-orbite de portée finie n'est donc pas invariant de jauge.

D

Compléments sur l'interaction de Skyrme dans les noyaux

D.1 Constantes de couplages pour Skyrme N₃LO

Les constantes de couplages pour la fonctionnelle de Skyrme étendue NLO sont :

$$\begin{aligned} C_0^\rho &= \frac{3}{8}t_0 + \frac{3}{48}t_3 \rho_0^\alpha(\mathbf{r}) \\ C_1^\rho &= -\frac{1}{4}t_0\left(\frac{1}{2} + x_0\right) - \frac{1}{24}t_3\left(\frac{1}{2} + x_3\right) \rho_0^\alpha(\mathbf{r}) \\ C_0^s &= -\frac{1}{4}t_0\left(\frac{1}{2} - x_0\right) - \frac{1}{24}t_3\left(\frac{1}{2} - x_3\right) \rho_0^\alpha(\mathbf{r}) \\ C_1^s &= -\frac{1}{8}t_0 - \frac{1}{48}t_3 \rho_0^\alpha(\mathbf{r}) \\ C_0^\tau &= \frac{3}{16}t_1 + \frac{1}{4}t_2\left(\frac{5}{4} + x_2\right) \\ C_1^\tau &= -\frac{1}{8}t_1\left(\frac{1}{2} + x_1\right) + \frac{1}{8}t_2\left(\frac{1}{2} + x_2\right) \\ C_0^T &= -\frac{1}{8}t_1\left(\frac{1}{2} - x_1\right) + \frac{1}{8}t_2\left(\frac{1}{2} + x_2\right) \\ C_1^T &= -\frac{1}{16}t_1 + \frac{1}{16}t_2 \\ C_0^{\Delta\rho} &= -\frac{9}{64}t_1 + \frac{1}{16}t_2\left(\frac{5}{4} + x_2\right) \\ C_1^{\Delta\rho} &= \frac{3}{32}t_1\left(\frac{1}{2} + x_1\right) + \frac{1}{32}t_2\left(\frac{1}{2} + x_2\right) \\ C_0^{\Delta s} &= \frac{3}{32}t_1\left(\frac{1}{2} + x_1\right) + \frac{1}{32}t_2\left(\frac{1}{2} + x_2\right) \\ C_1^{\Delta s} &= -\frac{3}{64}t_1 - \frac{1}{64}t_2 \\ C_0^J &= \frac{1}{8}t_1\left(\frac{1}{2} - x_1\right) - \frac{1}{8}t_2\left(\frac{1}{2} + x_2\right) \\ C_1^J &= \frac{3}{32}t_1\left(\frac{1}{2} - x_1\right) + \frac{1}{32}t_2\left(\frac{1}{2} + x_2\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_0^{\nabla J} &= -\frac{3}{4}W_0 \\ C_1^{\nabla J} &= -\frac{1}{4}W_0 \end{aligned}$$

Les constantes de couplages pour la fonctionnelle de Skyrme étendue N2LO sont :

$$\begin{aligned} C_0^{(4)\Delta\rho} &= \frac{1}{128} \left[9t_1^{(4)} - t_2^{(4)} (5 + 4x_2^{(4)}) \right] \\ C_1^{(4)\Delta\rho} &= -\frac{1}{128} \left[3t_1^{(4)} (1 + 2x_1^{(4)}) + t_2^{(4)} (1 + 2x_2^{(4)}) \right] \\ C_0^{(4)M\rho} &= \frac{1}{32} \left[3t_1^{(4)} + t_2^{(4)} (5 + 4x_2^{(4)}) \right] \\ C_1^{(4)M\rho} &= -\frac{1}{32} \left[t_1^{(4)} (1 + 2x_1^{(4)}) - t_2^{(4)} (1 + 2x_2^{(4)}) \right] \\ C_0^{(4)Ms} &= -\frac{1}{32} \left[t_1^{(4)} (1 - 2x_1^{(4)}) - t_2^{(4)} (1 + 2x_2^{(4)}) \right] \\ C_1^{(4)Ms} &= -\frac{1}{32} \left[t_1^{(4)} - t_2^{(4)} \right] \end{aligned}$$

Les constantes de couplages pour la fonctionnelle de Skyrme étendue N3LO sont :

$$\begin{aligned} C_0^{(6)\rho} &= \frac{1}{16} \left[3t_1^{(6)} + t_2^{(6)} (5 + 4x_2^{(6)}) \right] \\ C_1^{(6)\rho} &= \frac{1}{16} \left[t_2^{(6)} (1 + 2x_2^{(6)}) - t_1^{(6)} (1 + 2x_1^{(6)}) \right] \\ C_0^{(6)\Delta\Delta\Delta\rho} &= \frac{1}{256} \left[-27t_1^{(6)} + t_2^{(6)} (5 + 4x_2^{(6)}) \right] \\ C_1^{(6)\Delta\Delta\Delta\rho} &= \frac{1}{256} \left[t_2^{(6)} (1 + 2x_2^{(6)}) + 9t_1^{(6)} (1 + 2x_1^{(6)}) \right] \end{aligned}$$

D.2 Exemple de calcul en symétrie sphérique : calcul de $\rho(\mathbf{r})$

Afin de montrer un exemple de calcul réalisé afin de déterminer les densités, nous avons choisi de présenter le plus simple, celui de la densité de matière, qui fait déjà appel à quelques techniques de calculs. Dans toute cette section, on notera $i = q, j, \ell, n, m$ et $\alpha = q, j, \ell, n$.

On cherche à calculer la densité isoscalaire ¹ :

$$\rho_0(r) = \sum_{i,\sigma,\tau} |\psi_i(r, \sigma, \tau)|^2 \quad (\text{D.1})$$

en sachant que la somme est effectuée sur tous les états de particules individuels occupés et que l'on a :

$$\psi_i(r, \sigma, q) = \frac{R_\alpha}{r} y_{\ell jm}(\hat{r}, \sigma) \chi_q(\tau) \quad (\text{D.2})$$

1. On rappelle que $\rho_0 = \rho_n + \rho_p$ avec respectivement ρ_n et ρ_p les densités de neutrons et de protons

et

$$y_{\ell jm}(\hat{r}, \sigma) = \sum_{m_\ell, m_s} \langle \ell \frac{1}{2} m_\ell m_s | jm \rangle Y_{\ell m_\ell}(\hat{r}) \chi_{m_s}(\sigma). \quad (\text{D.3})$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \rho_0(\mathbf{r}) &= \sum_{i, \sigma} \psi_i^*(r, \sigma, \tau) \psi_i(r, \sigma, \tau) \\ &= \sum_i \frac{R_\alpha^2}{r^2} \sum_\sigma \chi_{m_{s'}}^*(\sigma) \chi_{m_s}(\sigma) \sum_\tau \chi_q^*(\tau) \chi_{q'}(\tau) \sum_{m_\ell m_s m_{\ell'} m_{s'}} \langle \ell \frac{1}{2} m_{\ell'} m_{s'} | jm \rangle \langle \ell \frac{1}{2} m_\ell m_s | jm \rangle \\ &\quad \times Y_{\ell m_{\ell'}}^*(\hat{r}) Y_{\ell m_\ell}(\hat{r}) \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

En exploitant le fait que :

$$\sum_\sigma \chi_{m_{s'}}^*(\sigma) \chi_{m_s}(\sigma) = \delta_{m_s m_{s'}} \quad \sum_\tau \chi_q^*(\tau) \chi_{q'}(\tau) = \delta_{qq'} \quad (\text{D.5})$$

et en transformant les Clebsch-Gordan en coefficients 3j de Wigner, on obtient finalement :

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \frac{R_\alpha^2}{r^2} (-1)^{2m+1} (2j+1) \sum_{m_\ell m_s m_{\ell'} m} \begin{pmatrix} \ell & \frac{1}{2} & j \\ m_{\ell'} & m_s & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & \frac{1}{2} & j \\ m_\ell & m_s & m \end{pmatrix} Y_{\ell m_{\ell'}}^*(\hat{r}) Y_{\ell m_\ell}(\hat{r}) \quad (\text{D.6})$$

On remarque que la phase est égale à 1, m étant un entier. On utilise maintenant la relation

$$\sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \frac{1}{2j_3+1} \delta_{j_3 j_3'} \delta_{m_3 m_3'} \quad (\text{D.7})$$

pour aboutir à :

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \frac{R_\alpha^2}{r^2} \frac{2j+1}{2\ell+1} \sum_{m_\ell} Y_{\ell m_{\ell'}}^*(\hat{r}) Y_{\ell m_\ell}(\hat{r}) \quad (\text{D.8})$$

Finalement, en exploitant le fait que l'angle solide des deux harmoniques sphériques est le même, on en déduit que l'angle entre eux est nul et donc on a :

$$\sum_{m_\ell} Y_{\ell m_\ell}^*(\hat{r}) Y_{\ell m_\ell}(\hat{r}) = \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\cos 0) = \frac{2\ell+1}{4\pi}. \quad (\text{D.9})$$

On aboutit ainsi à la forme finale de la densité en symétrie sphérique :

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \rho_0(r) = \sum_{\alpha} \frac{(2j+1)}{4\pi} \frac{R_{\alpha}^2}{r^2} \quad (\text{D.10})$$

Si l'on souhaite obtenir la densité de protons (neutrons), il suffit de ne sommer que sur les orbitales occupées par les protons (neutrons) en enlevant la somme sur q . Les fonctions radiales ne sont alors pas les mêmes, car celles-ci sont étiquetées également par q .

Les calculs des autres densités de ce manuscrit sont analogues. Pour des détails concernant ces calculs, non publiés, il est possible de contacter l'auteur de ce manuscrit (voir page 2)