



HAL
open science

Interactions effectives de portée nulle et régularisées pour les calculs à l'approximation du champ moyen et au-delà

Philippe Da Costa

► **To cite this version:**

Philippe Da Costa. Interactions effectives de portée nulle et régularisées pour les calculs à l'approximation du champ moyen et au-delà. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Claude Bernard - Lyon I, 2022. Français. NNT : 2022LYO10048 . tel-04080305

HAL Id: tel-04080305

<https://theses.hal.science/tel-04080305>

Submitted on 24 Apr 2023

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.



THESE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITE CLAUDE BERNARD LYON 1

Ecole Doctorale N° 52

PHAST : Physique et Astrophysique

Discipline : Physique Théorique

Soutenue publiquement le 21/10/2022, par :

Philippe DA COSTA

Interactions effectives de portée nulle et régularisées pour les calculs à l'approximation du champ moyen et au-delà

Devant le jury composé de :

LACROIX Denis, Directeur de recherche, CNRS Paris, IJCLab

Rapporteur

PERU-DESENFANTS Sophie, Directrice de recherche, CEA Bruyères le Chatel

Rapporteuse

DAVESNE Dany, Professeur Universités Claude Bernard Lyon 1, IP2I-Lyon

Président du jury

THIAMOVA Gabriela, Maître de conférences, Université Grenoble Alpes, LPSC

Examinatrice

BENDER Michael, Directeur de recherche, CNRS Lyon, IP2I-Lyon

Invité

BENNACEUR Karim, Maître de conférences, Université Claude Bernard Lyon 1,

Directeur de thèse

IP2I-Lyon

Résumé

Au cours des dernières décennies, la méthode de la fonctionnelle de la densité d'énergie (« *Energy Density Functionnal* » ou EDF) a su s'imposer comme un outil de choix pour l'étude de l'ensemble de la carte des noyaux hormis les plus légers. À l'aide d'une interaction effective, d'un choix relativement simple pour la fonction d'onde décrivant le système et de l'application d'un principe variationnel, cette méthode permet de rendre compte d'un ensemble de propriétés du noyau atomique. Parmi ces propriétés on peut citer l'énergie ou la forme de l'état fondamental, les barrières de fission ou les bandes rotationnelles obtenues à l'aide de calculs à l'approximation du champ moyen (single-reference) ou encore les différents modes d'excitations du noyau qu'ils soient individuels ou collectifs à l'aide de calcul allant au-delà de l'approximation du champ moyen (multi-reference). Dans ce manuscrit, nous utilisons ce cadre théorique pour étudier les noyaux. Plus précisément nous discutons des propriétés et du pouvoir prédictif d'interactions effectives qui sont utilisées pour décrire différents systèmes nucléaires. Nous présentons également une nouvelle interaction effective permettant de résoudre certains problèmes rencontrés dans les calculs au-delà de l'approximation du champ moyen.

Dans la première partie nous avons mis l'accent sur la description de phénomènes liés à ce que l'on peut considérer comme la « surface » du noyau en utilisant une interaction de portée nulle (interaction de Skyrme). Cette étude s'inscrit dans la suite de travaux, initiés par R. Jodon, qui ont permis la création d'un protocole d'ajustement simple requérant principalement une contrainte sur le coefficient d'énergie de surface pour décrire différentes propriétés liées à la déformation. Nous sommes partis de ces résultats et avons étendu le protocole en prenant en compte le terme à deux corps de la correction du mouvement du centre de masse lors de l'ajustement des paramètres de l'interaction puisqu'il a été démontré que ce terme a un impact direct sur les prédictions concernant les phénomènes liés à la déformation.

Dans la seconde partie, nous avons étudié des interactions de portée finie (de type « Gogny ») et leurs propriétés vis à vis d'instabilités de taille finie qui sont des

transitions de phase non-physiques. Notre intérêt s'est plus particulièrement porté sur l'interaction D2 proposée par F. Chappert. Nous avons étudié les performances de cette interaction et surtout les améliorations apportées par l'évolution du terme dépendant de la densité (ce terme étant de portée finie pour l'interaction D2 alors qu'il est de portée nulle pour les autres interactions de Gogny).

Toutes les interactions effectives discutées jusqu'à présent dans ce manuscrit contiennent un terme dépendant de la densité. Ce terme étant utilisé en raison de sa simplicité et parce qu'une interaction effective ne contenant que des termes à deux corps sans dépendance en densité ne permet pas de reproduire de manière satisfaisante les propriétés des noyaux et de la matière infinie à l'approximation du champ moyen. Il a cependant été démontré que ce terme dépendant de la densité conduisait à des problèmes formels et techniques pour les calculs au-delà de l'approximation du champ moyen.

Dans la dernière partie de ce manuscrit, dans le but d'avoir une interaction utilisable à l'approximation du champ moyen et au-delà, nous avons développé une interaction contenant des termes à deux corps régularisés et contenant un terme à trois corps « semi-régularisé » permettant de s'affranchir du terme dépendant de la densité. Cette interaction est la première permettant d'obtenir des résultats raisonnables à l'approximation du champ moyen et ne contenant pas de dépendance en densité ce qui ouvre la porte aux calculs au-delà du champ moyen. Ce manuscrit contient une description détaillée de la structure de cette interaction et du protocole qui a été utilisé pour ajuster ses paramètres.

Remerciements

La première personne que je tiens à remercier est bien évidemment mon directeur de thèse Karim Bennaceur. On m'a dit plus d'une fois que le sujet d'une thèse était important, mais que le directeur l'était tout autant si ce n'est plus. Pendant ces trois années j'ai pu me rendre compte que j'avais définitivement choisi un bon directeur. Que ce soit ta bienveillance, ta disponibilité (même pendant les confinements), ou encore ta pédagogie, tu as su rendre ces dernières années agréables malgré la difficulté que peut être l'exercice d'une thèse. Et surtout, je suis obligé de mettre en avant ton incroyable patience, car il faut l'avouer je ne suis pas forcément le plus facile (surtout quand il s'agit de gestion administrative!). Encore une fois, merci à toi pour ta confiance et d'avoir pris le temps de m'enseigner au cours des dernières années.

Je ne pourrais écrire ces remerciements sans un mot et un grand merci aux autres membres de mon équipe d'encadrement. À Michael Bender qui a toujours été présent et dont la porte fut toujours ouverte pour prendre le temps (beaucoup de temps!) de répondre à mes milliards de questions même quand certaines revenaient (trop) souvent. Et enfin un grand merci à Jacques Meyer qui a fait preuve d'un accueil chaleureux pendant mon temps passé au sein de l'IP2I et qui a aussi été présent pour répondre à la moindre de mes interrogations avec un sourire qui ne saurait être égalé.

Je tiens à remercier Sophie Peru-Desenfants et Denis Lacroix d'avoir accepté la tâche difficile de rapporteur pour ce manuscrit. Je voudrais également remercier l'ensemble des membres du jury, qui m'ont fait l'honneur d'avoir accepté l'invitation et d'avoir pris le temps de juger ce travail. Un mot spécial pour Sophie qui m'a aussi permis de m'entraîner et accueilli au sein de son laboratoire avant la soutenance avec beaucoup de bienveillance (et avec qui on a pu découvrir, qu'avec une carte vitale on est capable de beaucoup de choses!).

Cette thèse n'aurait pu être ce qu'elle a été sans la compagnie de mes co-bureaux Jeff, Greg et Paul, ainsi que tous les doctorants me précédant d'une année qui ont su nous intégrer et donner une atmosphère de travail agréable. Merci à Lucrezia, JB, Denis et Léo pour tous ces moments formidables que j'ai passés avec vous et ces innombrables défis qui n'ont sans surprises jamais aboutis (un jour peut-être qu'on commencera tous à s'entraîner pour la SaintéLyon).

Enfin un énorme merci à ma famille. À ma mère qui a toujours été derrière moi et qui ne m'a jamais empêché d'aller là où je voulais malgré des années scolaires catastrophiques. C'est bien parce que tu m'as offert cette liberté de poursuivre mes envies sans jugement que j'en suis là aujourd'hui. Merci à mon frère Louis-Clément et à mes soeurs Laurence et Héloïse. Je le dis que trop peu souvent, mais il me faudrait plusieurs paragraphes pour exprimer toute l'admiration et l'inspiration que vous me suscitez, ainsi que la joie que me procure le fait de vous avoir comme fratrie.

J'ai aussi une pensée pour tous mes amis qui m'ont accompagné et soutenu quand déjà en licence je ne pensais pas un jour arriver à faire une thèse. Sans vous je ne pourrais pas écrire ce paragraphe aujourd'hui !

Et enfin même si ces mots seront bien trop sobres un grand merci à toi Marine qui a le courage de me supporter (et même de partir en vacances avec moi en pleine rédaction !). Cela fait déjà un an que tu me rends heureux et je compte bien partager à tes côtés encore beaucoup de bons et beaux moments.

Table des matières

Table des matières	viii
Introduction	1
I Modélisation du noyau	3
1 Théorie du champ moyen	5
1.1 Hamiltonien nucléaire	5
1.2 Approximation Hartree-Fock	6
1.3 Approximation de Hartree-Fock-Bogolyubov	8
1.4 Calculs avec contraintes	9
1.4.1 Calculs Hartree-Fock contraints (CHF ou CHFB)	10
1.5 Calculs au-delà du champ moyen	11
1.5.1 Principe général de la GCM	12
II Propriétés de surface	13
2 Protocole d'ajustement	15
2.1 Fonctionnelle standard de Skyrme utilisée	15
2.2 Ajustement à l'aide d'une fonction de pénalité	17
2.2.1 Description du χ^2	17
2.2.2 Coefficient d'énergie de surface	20
2.2.3 Correction du mouvement du centre de masse	21
2.2.4 Autres contraintes du protocole	23
2.3 Conclusion sur le protocole d'ajustement	31

3	Résultats obtenus et analyse de données	33
3.1	Résultats de l'ajustement	34
3.1.1	Vérification des conditions de détermination du coefficient d'énergie de surface	34
3.1.2	Fonction de pénalité et matière nucléaire infinie	34
3.1.3	Énergies de particules individuelles de noyaux doublement magiques	37
3.2	Résultats des nouvelles paramétrisations pour les noyaux	38
3.2.1	Barrières de fission du ^{240}Pu et du ^{180}Hg	38
3.2.2	Déformation octupolaire β_{30} dans le ^{226}Ra	41
3.2.3	Énergies de liaisons	41
3.2.4	États à déformation normale et superdéformés	44
3.2.5	Étude concernant l'appariement	47
3.2.6	Oscillations des rayons de charges	50
4	Conclusion	53
III	Interaction de Gogny D2	55
5	Interactions & fonctionnelles de Gogny	57
5.1	Interaction standard de Gogny	57
5.2	Évolution de la dépendance en densité. Vers une portée finie	59
5.3	Résultats	61
5.3.1	Étude des densités avec les interactions de Gogny	61
5.3.2	Gouttelettes de neutrons	70
5.3.3	Conclusion concernant l'interaction D2	74
IV	Interaction à 3 corps semi-régularisée	77
6	Nécessité d'une interaction à 3 corps	79
6.1	Insuffisance d'une interaction à deux corps	79
6.1.1	Problème de la masse effective	79
6.1.2	La solution de la dépendance en densité	80
6.2	Interaction permettant d'aller au-delà du champ moyen	81
6.2.1	Contraintes pour des calcul MR	81
6.2.2	Interactions permettant d'aller au-delà du champ moyen	82
7	Développement du pseudo-potentiel	85
7.1	Structure recherchée pour le pseudo-potentiel	85
7.2	Développement de l'interaction semi-régularisée	87
7.2.1	Construction du pseudo-potentiel	87

7.2.2	Densité d'énergie	87
7.3	Caractéristiques de la matière nucléaire infinie	89
7.3.1	Point de saturation	89
7.3.2	Paramètres de Landau	90
8	Protocole d'ajustement de la fonctionnelle	91
8.1	Forme complète de l'interaction	91
8.2	Ajustement des paramètres	93
8.2.1	Matière nucléaire infinie	94
8.2.2	Noyaux	94
8.2.3	Contraintes pour contrôler les instabilités	96
9	Résultats	99
9.1	Propriétés dans la matière nucléaire	99
9.2	Spectres de particules individuelles	101
9.3	Densités dans les noyaux	106
9.3.1	Gouttelettes de neutrons	107
9.4	Calculs pour des noyaux sphériques	110
9.4.1	Énergies de liaison et dérive isotopique	110
9.4.2	Rayons de charge	113
9.5	Conclusion	115
	Conclusion générale	119
	Annexes	123
A	Constantes de couplage de l'interaction RegMR3	123
B	Densités et transformations	125
B.1	Densités et propriétés de base	125
B.1.1	Densité normale	125
B.1.2	Densité anormale	127
C	Calculs dans la matière nucléaire infinie	131
C.1	fonction d'onde et densité	131
C.2	Interaction de Skyrme	132
C.3	Interaction de Gogny D2	133
C.4	Fonction auxiliaires utilisées	134

D	Calcul dans un système à symétrie sphérique	137
D.1	Noyaux sphériques	137
D.1.1	Développement multipolaire de l'interaction	137
D.1.2	Développement multipolaire des densités dans un noyau sphérique	138
D.1.3	Champ moyen	142
E	Valeurs des paramètres des interactions	145
E.1	Skyrme SLy7s(X)	145
E.2	Interaction semi-régularisée RegMR3	146
	Bibliographie	154

Introduction

Le noyau atomique fut découvert par Rutherford en 1911 [1]. Depuis, il a été compris que le noyau est un système lié composé de protons et de neutrons en interaction mutuelle. Le noyau est donc un système quantique à N corps en interaction et par conséquent extrêmement complexe à modéliser. Le nombre de constituants est généralement trop grand pour qu'une résolution exacte du problème à N corps soit possible et trop petit pour un traitement statistique. La première tentative ayant pour but une description du noyau fut macroscopique avec le modèle de la goutte liquide [2]. Ce dernier permet une excellente reproduction des masses mais est vite limité pour une étude plus approfondie comme des prédictions sur des modes d'excitations par exemple. Un traitement microscopique avec des interactions effectives est donc nécessaire si l'on veut pouvoir étudier plus en avant les caractéristiques du noyau.

Dans ce manuscrit nous allons nous focaliser sur la méthode connue sous le nom de fonctionnelle de la densité d'énergie (EDF). Cette méthode de par son coût numérique relativement faible en comparaison à d'autres approches microscopiques, a su faire ses preuves au cours des années et a réussi à s'imposer comme un outil extrêmement puissant pour étudier l'ensemble de la carte des noyaux.

On peut distinguer deux classes de calculs EDF : (i) les calculs à l'approximation du champ moyen qui sont appelés dans la littérature *single-reference* (SR) et (ii) les approches allant au-delà du champ moyen par mélange de configurations appelées *multi-reference* (MR). Un calcul SR consiste en l'utilisation d'une fonction d'onde « produit » relativement simple accompagnée de l'application d'un principe variationnel. Ceci permet d'obtenir une approximation de l'état fondamental du noyau ainsi qu'un ensemble de propriétés statiques comme les énergies de liaison ou les rayons de charges pour ne citer que celles-ci. Pour autant, un calcul SR est souvent trop simplifié et va briser des symétries qui ne peuvent être restaurées qu'en passant à un calcul MR. Une approche MR va permettre d'aller au-delà des simplifications qui ont été faites au niveau SR. Un mélange de configurations est opéré, ce qui per-

met un enrichissement de la fonction d'onde et la prise en compte de corrélations supplémentaires.

Nous n'allons pas nous intéresser ici directement à l'aspect formel des calculs mais plutôt aux interactions effectives utilisée pour leurs mises en œuvre. Celles dont nous allons discuter sont les interactions non-relativistes de Skyrme [3], de Gogny [4] et les interactions dites « régularisées » [5–8] qui sont également des interactions de portée finie. Les premières sont des interactions de contact et les deuxièmes de portée finie. Il faut noter que leurs structures actuelles rendent impossibles les calculs MR sans difficultés ou ambiguïtés [9–13] notamment en raison de l'utilisation de termes dépendants de la densité, c'est la principale raison pour laquelle nous nous tournerons vers les interactions régularisées qui semblent permettre de pouvoir contourner ces problèmes.

Durant sa thèse, R. Jodon, a développé un moyen de contraindre les paramètres de l'interaction de Skyrme de sorte à pouvoir reproduire les barrières de fission des noyaux ainsi que leurs propriétés de déformation. Pour cela il s'est concentré sur le coefficient d'énergie de surface a_{surf} . Ceci a permis la construction de la paramétrisation SLy5s1 qui fut un succès [14, 15], mais qui a le défaut de donner des prédictions pour les énergies de liaison qui ne sont pas satisfaisantes.

La première partie de cette thèse s'inscrit dans la continuité de ses travaux. Nous allons utiliser les résultats obtenus au cours de sa thèse pour réajuster une paramétrisation permettant de pallier aux défauts de SLy5s1. En plus de cela, nous avons étudié l'impact de la correction à deux corps du mouvement du centre de masse qui va jouer un rôle sur les propriétés de surface.

Dans la seconde et troisième partie nous allons nous intéresser aux interactions de portée finie. Le but est d'arriver à une interaction sans dépendance en densité permettant ainsi un calcul au-delà du champ moyen débarrassé de tout caractère intrinsèquement pathologique.

Pour cela, nous allons commencer dans la seconde partie à étudier l'interaction de Gogny D2 qui a vu son terme dépendant de la densité évoluer d'une portée nulle vers une portée finie. Ceci donne à la fonctionnelle une structure qui est similaire à celle obtenue avec l'interaction à trois corps qui sera développée à la fin de ce manuscrit. Nous voulons donc en étudier les différents aspects dans un premier temps, puis sa stabilité avant de passer à l'interaction à trois corps.

Dans la dernière partie, nous exposerons donc la forme du nouveau pseudo-potential à trois corps qui a été développé avec pour but une future utilisation dans des calculs MR, les résultats obtenus et les perspectives d'améliorations.

Première partie
Modélisation du noyau

Théorie du champ moyen

1.1 Hamiltonien nucléaire

Le hamiltonien du système qui contient A nucléons s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^A \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + \sum_{i<j}^A \hat{v}_{ij} + \sum_{i<j<k}^A \hat{v}_{ijk} + \dots, \quad (1.1)$$

où le premier terme correspond à l'énergie cinétique, le second à l'interaction à deux corps, puis à trois corps et ainsi de suite.

L'équation de Schrödinger stationnaire à résoudre est alors :

$$\hat{H}|\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)\rangle = E|\psi(x_1, x_2, \dots, x_A)\rangle. \quad (1.2)$$

Ici, les x_i représentent les coordonnées généralisées $x = (\mathbf{r}, \sigma, q)$ avec \mathbf{r} la position, σ la projection du spin et q la projection de l'isospin ($q = \frac{1}{2}$ pour les neutrons et $q = -\frac{1}{2}$ pour les protons). Mis à part les systèmes légers, ou les noyaux au voisinage de fermetures de couches, il est en général impossible de résoudre l'équation à A corps (1.2) de manière exacte. Une approche possible pour résoudre cette équation est l'approximation du champ moyen. Au lieu de chercher à résoudre l'équation (1.1) avec un Hamiltonien « réaliste » et une solution appartenant à l'espace de Hilbert des fonctions d'onde à A nucléons, nous allons considérer une interaction effective et faire l'approximation de particules indépendantes soumises à potentiel moyen créé par l'ensemble des nucléons. Cette hypothèse peut se justifier par le fait que le libre parcours moyen des nucléons dans le noyau est du même ordre de grandeur que la taille du système [16]. Cette approximation va permettre de passer de l'équation (1.2) à A corps à un ensemble de A équations (couplées) à un corps.

Maintenant que nous avons discuté l'idée générale de l'approximation du champ moyen, voyons quelques techniques utilisées en pratique.

1.2 Approximation Hartree-Fock

Nous allons rappeler les principales étapes de la dérivation des équations de Hartree-Fock (HF) [17]. Les notations utilisées sont, pour la plupart, celles des articles [18, 19] et [20] dans lesquels on pourra trouver des discussions plus complètes.

On considère, pour simplifier, une interaction effective à deux corps dont les constantes de couplage ne dépendent pas de la densité. Cette interaction s'écrit dans le formalisme de la seconde quantification :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k. \quad (1.3)$$

Les indices i, j, k et l représentent les indices des états d'une base (discrète ou continue) de l'espace des fonctions d'onde à un corps. L'opérateur hamiltonien effectif est alors

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k, \quad (1.4)$$

où le premier terme est l'énergie cinétique et $V_{ijkl} = \langle ij|V|kl \rangle$.

La méthode de Hartree-Fock consiste à utiliser un état décrivant A fermions indépendants comme fonction d'essai. Cette fonction peut s'écrire comme un déterminant de Slater c'est à dire, en seconde quantification,

$$|\Psi_{\text{HF}}\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |-\rangle, \quad (1.5)$$

où $|-\rangle$ représente le vide et les opérateurs a_i^\dagger les opérateurs de création de nucléons dans les états à une particule $|\varphi_i\rangle$. On introduit la densité à un corps

$$\rho_{ij} = \langle \Psi_{\text{HF}} | a_j^\dagger a_i | \Psi_{\text{HF}} \rangle, \quad (1.6)$$

et la valeur moyenne de l'énergie peut alors s'écrire

$$E[\rho] = \langle \Psi_{\text{HF}} | \hat{H} | \Psi_{\text{HF}} \rangle = \sum_{i,j=1}^A t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A V_{ijkl} (\rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{li} \rho_{kj}). \quad (1.7)$$

La minimisation de l'énergie E , avec la condition que les fonctions individuelles $|\varphi_i\rangle$ doivent rester orthonormées, conduit aux équations de Hartree-Fock qui peuvent s'écrire :

$$[h, \rho] = 0, \quad (1.8)$$

où on a introduit le champ moyen à un corps

$$h_{ij} = \frac{\partial E[\rho]}{\partial \rho_{ji}}. \quad (1.9)$$

L'équation (1.8) signifie qu'il existe une base de fonctions $\{|\varphi_i\rangle\}_{i \in \mathbb{N}^*}$ dans laquelle les opérateurs h et ρ sont simultanément diagonaux. Cette condition s'écrit en représentation coordonnée $x \equiv (\mathbf{r}\sigma q)$

$$\int dx' h(x, x') \varphi_i(x) = \varepsilon_i \varphi_i(x). \quad (1.10)$$

Dans cette équation, le symbole « intégrale » représente les sommes discrètes et continues sur l'ensemble des coordonnées

$$\int dx' \equiv \sum_{\sigma' q'} \int d^3 r'. \quad (1.11)$$

Dans l'équation (1.10), la quantité ε_i s'interprète comme l'énergie de l'état individuel $|\varphi_i\rangle$.

De par leurs faibles coûts numériques, les calculs HF présentent un intérêt indéniables. Avec de telles méthodes il est facile d'explorer la carte des noyaux dans son ensemble et d'étudier les noyaux lourds à superlourds, chose qui est actuellement impossible avec d'autres méthodes de calcul. Ce qui en fait la grande force de l'approximation du champ moyen HF. En revanche, elle nécessite de se limiter à un déterminant de Slater comme fonction d'onde pour décrire le noyau. Or, une fonction produit qui ne prend en compte aucune corrélation entre les nucléons s'avère être une trop grande simplification et va passer à côté de toutes les corrélations qui rendent la physique du noyau extrêmement variée.

Par exemple, on voit dans les spectres d'énergie des noyaux une différence de comportement entre les noyaux pairs et impairs. Les noyaux pairs ont une densité de niveau au-dessus de l'état fondamental plutôt faible en par rapport à leurs homologues impairs qui vont eux avoir une multitude d'excitations possibles au-dessus de cet état.

Ce phénomène va être compris en 1958 par A. Bohr, B. Mottelson et D. Pines [21] comme l'équivalent de la supraconductivité en physique de la matière condensée. Dans les noyaux, c'est la superfluidité, engendrée par les paires de quasi-particules qui va permettre de fournir des explications pour un certain nombre de phénomènes comme :

- l'oscillation des masses entre des isotopes pairs et impairs ;
- les spectres des bandes rotationnelles [22] ;
- les différences entre les barrières de fission des isotopes pairs et impairs (de l'uranium [23] par exemple).

Il a très vite été compris qu'il était indispensable de rajouter cet ingrédient pour avoir une description plus pertinente des noyaux. Pour cela, on va donc avoir besoin d'enrichir la fonction d'onde.

1.3 Approximation de Hartree-Fock-Bogolyubov

La méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB) est une généralisation de l'approximation HF permettant de traiter le cas des noyaux à couches ouvertes. Dans cette approche, la fonction d'essai $|\Psi_{\text{HFB}}\rangle$ est un état de quasi-particules indépendantes qui est une superposition d'états du type (1.5) représentant différentes possibilités pour occuper des états de paires de quasi-particules HF [24].

La valeur moyenne de l'énergie du noyau peut s'exprimer à l'aide de la densité à un corps (1.6) et de la densité d'appariement qui s'écrivent en représentation coordonnées

$$\rho(\mathbf{r}\sigma q, \mathbf{r}'\sigma'q') = \langle \Psi_{\text{HFB}} | a_{\mathbf{r}'\sigma'q'}^\dagger a_{\mathbf{r}\sigma q} | \Psi_{\text{HFB}} \rangle, \quad (1.12)$$

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}\sigma q, \mathbf{r}'\sigma'q') = -2\sigma' \langle \Psi_{\text{HFB}} | a_{\mathbf{r}'\sigma'q'} a_{\mathbf{r}\sigma q} | \Psi_{\text{HFB}} \rangle. \quad (1.13)$$

Si les états de quasi-particules considérés ne mélangent pas les protons et les neutrons, ces densités sont diagonales en q et on notera

$$\rho(\mathbf{r}\sigma q, \mathbf{r}'\sigma'q') = \rho_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') \delta_{qq'}, \quad (1.14)$$

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}\sigma q, \mathbf{r}'\sigma'q') = \tilde{\rho}_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') \delta_{qq'}. \quad (1.15)$$

Pour des noyaux invariants par renversement du temps, ces matrices vérifient les relations :

$$\rho^*(x_1, x_2) = \rho(x_2, x_1), \quad (1.16)$$

$$\tilde{\rho}^*(x_1, x_2) = \tilde{\rho}(x_2, x_1), \quad (1.17)$$

$$\rho(x_1, x_2) = 4\sigma_1\sigma_2\rho(\bar{x}_2, \bar{x}_1), \quad (1.18)$$

$$\tilde{\rho}(x_1, x_2) = 4\sigma_1\sigma_2\tilde{\rho}(\bar{x}_2, \bar{x}_1), \quad (1.19)$$

où on a utilisé la notation $\bar{x} = (\mathbf{r}-\sigma q)$. Pour un noyau invariant par renversement du temps, l'énergie s'écrit

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \tau_0(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 V(x_1, x_2; x_3, x_4) [\rho(x_3, x_1)\rho(x_4, x_2) - \rho(x_4, x_1)\rho(x_3, x_2)] \\ &+ \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 4s_2s_4 V(x_1, \bar{x}_2; x_3, \bar{x}_4) \tilde{\rho}(x_2x_1)\tilde{\rho}(x_3, x_4), \end{aligned} \quad (1.20)$$

où on a introduit la densité cinétique

$$\tau_0(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \nabla' \sum_{q\sigma} \rho_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}. \quad (1.21)$$

Comme l'état $|\Psi_{\text{HFB}}\rangle$ n'est pas un état propre du nombre de particules, la valeur moyenne de l'énergie doit être minimisée en ajoutant des contraintes permettant

d'avoir en moyenne N neutrons et Z protons. Ces contraintes sont obtenues en introduisant les multiplicateurs de Lagrange λ_n et λ_p qui sont ajustés de manière à obtenir les nombres de neutrons et de protons voulus.

On définit les champs moyens normaux h_q et les champs d'appariement \tilde{h}_q par

$$h_q(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) = \frac{\partial E}{\partial \rho_q(\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1)}, \quad (1.22)$$

$$\tilde{h}(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) = \frac{\partial E}{\partial \tilde{\rho}(\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1)}. \quad (1.23)$$

Les équations de HFB obtenues en minimisant l'énergie avec ces contraintes peuvent alors se mettre sous la forme

$$[\mathcal{W}_q, \mathcal{R}_q] = 0, \quad (1.24)$$

où l'on a introduit les notations

$$\mathcal{W}_q = \begin{pmatrix} h_q - \lambda_q & \tilde{h}_q \\ \tilde{h}_q & -h_q + \lambda_q \end{pmatrix}, \quad (1.25)$$

et

$$\mathcal{R}_q = \begin{pmatrix} \rho_q & \tilde{\rho}_q \\ \tilde{\rho}_q & \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta_{\sigma\sigma'} - \rho_q \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

Comme dans le cas (1.8), l'équation (1.24) signifie qu'il existe une base de fonctions dans laquelle les opérateurs \mathcal{W}_q et \mathcal{R}_q sont simultanément diagonaux. Cette condition s'écrit en représentation coordonnée

$$\begin{aligned} \int d^3r' \sum_{\sigma'} \begin{pmatrix} h_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') & \tilde{h}_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') \\ \tilde{h}_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') & -h_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_i(\mathbf{r}'\sigma'q) \\ V_i(\mathbf{r}'\sigma'q) \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} E_i + \lambda_q & 0 \\ 0 & E_i - \lambda_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_i(\mathbf{r}\sigma q) \\ V_i(\mathbf{r}\sigma q) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.27)$$

où les spineurs

$$\begin{pmatrix} U_i(\mathbf{r}\sigma q) \\ V_i(\mathbf{r}\sigma q) \end{pmatrix}. \quad (1.28)$$

sont les fonctions d'ondes des quasi-particules de Bogolyubov en représentation coordonnée.

1.4 Calculs avec contraintes

Sans être rentré dans les détails, nous avons déjà exposé un exemple de calcul contraint avec les équations (1.25) et (1.27). Nous avons imposé, lors du calcul, de trouver en moyenne le bon nombre de neutrons et de protons à l'aide de multiplicateurs de Lagrange. Bien évidemment, rien ne nous empêche de faire le même type de calculs en ajoutant d'autres contraintes.

1.4.1 Calculs Hartree-Fock contraints (CHF ou CHFb)

Lors de l'application du principe variationnel, nous trouvons un état permettant de minimiser l'énergie comme dans les équations (1.8) ou (1.26). Cet état, si on n'autorise pas le système à explorer diverses coordonnées collectives, peut correspondre à un minimum local ou un point-selle. Un moyen d'explorer plus en avant l'espace de configurations est d'imposer une ou plusieurs contraintes lors du calcul, et ainsi d'étudier l'évolution de l'énergie en fonction de ces contraintes. Pour cela, considérons un opérateur \hat{O} , on va chercher à trouver l'état $|\Psi_{\text{HFB}}\rangle$ qui minimise l'énergie tout en satisfaisant la contrainte $\langle \Psi_{\text{HFB}} | \hat{O} | \Psi_{\text{HFB}} \rangle = O^{(0)}$. On peut, par exemple, traiter ce problème à l'aide d'une contrainte quadratique :

$$\delta R = \delta \{ \langle \Psi_{\text{HFB}} | (\hat{H} - C(\hat{O} - O^{(0)}))^2 | \Psi_{\text{HFB}} \rangle \} = 0, \quad (1.29)$$

où C est un coefficient positif représentant l'intensité de la contrainte. Ce type de contrainte quadratique permet d'obtenir un routhien convexe par rapport à la valeur moyenne de \hat{O} et garantit donc l'existence d'un minimum. Pour une discussion plus détaillée concernant l'implémentation des contraintes dans les calculs que nous avons effectués, on pourra se reporter à la thèse de W. Ryssens [25].

On peut considérer un cas particulier pour donner un exemple de calcul avec contrainte.

La plupart des noyaux ont un état fondamental déformé, les noyaux sphériques étant finalement relativement rares. Il faut donc être capable d'explorer la surface d'énergie si l'on veut être en mesure de trouver l'état de plus basse énergie en fonction de la déformation. On fera alors des calculs avec comme contrainte une (ou plusieurs) déformation(s) paramétrée(s) par les multipôles \hat{Q}_{lm} de la distribution de nucléons :

$$\delta R = \delta \left\{ \langle \Psi_{\text{HFB}} | \left[\hat{H} - \sum_{lm} C_{lm} (\hat{Q}_{lm} - Q_{lm}^{(0)})^2 \right] | \Psi_{\text{HFB}} \rangle \right\}. \quad (1.30)$$

Ici, $Q_{lm}^{(0)}$ est la (ou les) valeur(s) visée(s). Un tel calcul nous permet d'obtenir une surface d'énergie en fonction de la déformation comme représentée sur la figure 1.1.

Ceci est un exemple de calcul contraint, mais cet exercice peut se faire sur toute variable considérée comme pertinente pour l'étude d'un système donné, comme par exemple le moment angulaire pour étudier les bandes rotationnelles, ce que l'on nomme un calcul « cranké ».

De plus, comme nous allons le voir dans la partie suivante, les états que l'on peut construire grâce à un calcul CHF ou CHFb, nous permettent d'obtenir des fonctions d'onde que l'on pourra utiliser dans le cadre de la méthode de la coordonnée génératrice (GCM).

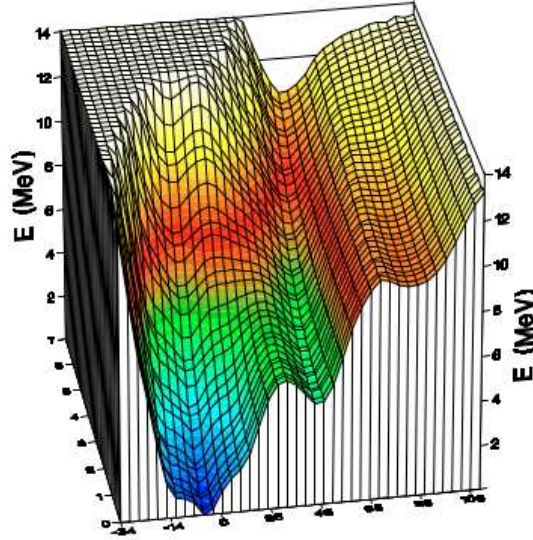


FIGURE 1.1 – Surface d'énergie pour le ^{194}Pu en fonction de la déformation quadripolaire Q_{20} et octupolaire Q_{30} . Figure tirée de [26].

1.5 Calculs au-delà du champ moyen ou multi-références

Dans les parties précédentes, nous avons présenté de manière schématique le formalisme du champ moyen et donné des explications générales sur les méthodes de calculs HF et HFB.

Comme nous l'avons vu, il est possible, à l'aide d'un calcul à l'approximation du champ moyen, d'extraire beaucoup de propriétés intéressantes concernant les noyaux. Il est néanmoins important de souligner que les fonctions d'onde du type $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$ ou $|\Psi_{\text{HFB}}\rangle$ restent des déterminants de Slater (généralisés dans le cas HFB), ce qui nous empêche de prendre en compte certaines corrélations pouvant apparaître dans la fonction d'onde décrivant un noyau.

Le choix fait pour la fonction d'onde et les contraintes appliquées conduisent à la brisure d'un certain nombre de symétries de l'interaction telles l'invariance rotationnelle ou l'invariance par translation. De plus, lors d'un calcul HFB, le nombre de particules n'est pas conservé et doit donc aussi, en principe, être restauré. Dans tous ces cas, la meilleure solution est une restauration des symétries brisées en faisant une projection de la fonction d'onde HF (HFB) dans le but de retrouver un système avec des bons nombres quantiques. Deux approches existent, on peut faire une projection avant variation (appelée VAP) ou une projection après variation (PAV). La première solution est plus coûteuse en temps de calcul. La seconde méthode (PAV) permet d'obtenir des résultats pour un coût moindre, puisque l'on opère les projections sur un état après avoir appliqué le principe variationnel.

Une autre manière de prendre en compte plus de corrélations dans la fonction d'onde peut se faire à l'aide de la « méthode de la coordonnée génératrice » (GCM).

Ce que l'on nomme communément un calcul au-delà du champ moyen, ou multi-référence, correspond donc à enrichir la fonction d'onde dans le but de retrouver les corrélations manquantes dans un calcul au niveau champ moyen (single-référence).

Dans la partie suivante, nous allons succinctement parler de la méthode GCM. La brisure et restauration de symétrie sera évoquée dans le dernier chapitre de ce manuscrit.

1.5.1 Principe général de la GCM

La méthode de la coordonnée génératrice développée par Hill, Wheeler et Griffin [27, 28] permet en partant d'un ensemble d'états HF(B) $\{|\Phi_q\rangle\}$ (où q représente par exemple la valeur moyenne d'une coordonnée collective donnée), de construire une fonction d'onde qui sera une superposition d'états produits caractérisés par des configurations intrinsèques différentes. Une fonction d'onde GCM est définie comme :

$$|\Psi_{\text{GCM}}\rangle = \int dq f(q) |\Phi_q\rangle. \quad (1.31)$$

Ici, q correspond à ce qu'on appelle une coordonnée génératrice et $f(q)$ la fonction de pondération associée à chaque état.

Le principe utilisé pour déterminer la fonction f est le même que celui utilisé pour les calculs à l'approximation du champ moyen. Un principe variationnel appliqué à la valeur moyenne de l'énergie dans l'état (1.31) va permettre de déterminer f en écrivant :

$$\frac{\delta}{\delta f(q)} \frac{\langle \Psi_{\text{GCM}} | \hat{H} | \Psi_{\text{GCM}} \rangle}{\langle \Psi_{\text{GCM}} | \Psi_{\text{GCM}} \rangle} = 0, \quad (1.32)$$

ce qui conduit aux équations de Hill-Wheeler (HW) :

$$\int dq \left\{ \langle \Phi_{q'} | \hat{H} | \Phi_q \rangle - E \langle \Phi_{q'} | \Phi_q \rangle \right\} f(q) = 0. \quad (1.33)$$

Nous pouvons par exemple prendre un ensemble d'états HF(B) avec des contraintes différentes sur le paramètre de déformation Q_{lm} dont la valeur moyenne servira de coordonnée collective.

Il est aussi possible de voir la restauration de symétrie comme un cas particulier de GCM, où les fonctions de poids f dépendent du groupe auquel appartient la symétrie à restaurer. Il n'y a à priori aucune restriction sur le choix de la coordonnée génératrice hormis la pertinence vis à vis du phénomène étudié.

Deuxième partie
Propriétés de surface

Protocole d'ajustement

Ce chapitre servira à introduire l'interaction de Skyrme. Nous aborderons principalement la manière de contraindre les paramètres d'une interaction à l'aide d'une fonction de pénalité. Nous discuterons des observables que l'on peut y mettre ainsi que les difficultés que l'on peut rencontrer lors de l'ajustement. Comme cette partie vise à étudier les systèmes où la déformation joue un rôle central, nous finirons par détailler le protocole d'ajustement que nous avons mis au point dans cette perspective. Nous nous sommes principalement concentrés sur l'impact de la valeur du coefficient d'énergie de surface, sur le traitement de la correction du mouvement du centre de masse et sur le rôle de la masse effective sur les observables calculées.

Contents

2.1	Fonctionnelle standard de Skyrme utilisée	15
2.2	Ajustement à l'aide d'une fonction de pénalité	17
2.2.1	Description du χ^2	17
2.2.2	Coefficient d'énergie de surface	20
2.2.3	Correction du mouvement du centre de masse	21
2.2.4	Autres contraintes du protocole	23
2.3	Conclusion sur le protocole d'ajustement	31

2.1 Fonctionnelle standard de Skyrme utilisée

Pour cette étude, nous avons utilisé la fonctionnelle standard de Skyrme [3]. Celle-ci permet la description de l'interaction effective entre nucléons dans le milieu nucléaire à l'approximation du champ moyen.

Cette interaction est de portée nulle ce qui est modélisée par un delta de Dirac. La portée est simulée par la non-localité des termes en gradients.

De plus, l'interaction standard de Skyrme contient un terme dépendant de la densité. Ce dernier apparaît pour remplacer un terme à trois corps (ou plus), car sans ce terme il est impossible de pouvoir décrire de manière appropriée certaines propriétés, notamment la masse effective [29]. Nous reviendrons sur ce point dans la suite de ce manuscrit au chapitre 6 lorsque nous aborderons l'interaction semi-régularisée. L'interaction de Skyrme à deux corps standard [18, 30, 31] s'écrit de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{Sky}}(x_1, x_2; x_3, x_4) = & \delta(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1)\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4)\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \times \\ & \left[t_0 \left(\hat{1}_\sigma \hat{1}_\tau + x_0 \hat{1}_\tau \hat{P}^\sigma \right) \right. \\ & + \frac{1}{2} t_1 \left(\hat{1}_\sigma \hat{1}_\tau + x_1 \hat{1}_\tau \hat{P}^\sigma \right) \left[\hat{\mathbf{k}}_{12}^{*2} + \hat{\mathbf{k}}_{34}^2 \right] \\ & + t_2 \left(\hat{1}_\sigma \hat{1}_\tau + x_2 \hat{1}_\tau \hat{P}^\sigma \right) \hat{\mathbf{k}}_{12}^* \cdot \hat{\mathbf{k}}_{34} \\ & + \frac{1}{6} t_3 \left(\hat{1}_\sigma \hat{1}_\tau + x_3 \hat{1}_\tau \hat{P}^\sigma \right) \rho_0^\alpha(\mathbf{R}_{12}) \\ & \left. + i W_0 \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{13} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{24} \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \right) \cdot \left(\hat{\mathbf{k}}_{12}^* \times \hat{\mathbf{k}}_{34} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Avec comme définition :

$$|x_i\rangle = |\mathbf{r}_i \sigma_i q_i\rangle, \quad (2.2)$$

$$\hat{1}_\sigma = \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4}, \quad (2.3)$$

$$\hat{1}_\tau = \delta_{\tau_1 \tau_3} \delta_{\tau_2 \tau_4}, \quad (2.4)$$

$$\hat{P}^\sigma = \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3}, \quad (2.5)$$

$$\hat{P}^\tau = \delta_{\tau_1 \tau_4} \delta_{\tau_2 \tau_3}, \quad (2.6)$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{ij} = \langle \sigma_i | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \sigma_j \rangle, \quad (2.7)$$

$$\hat{\mathbf{k}}_{ij} = -\frac{i}{2} (\hat{\nabla}_i - \hat{\nabla}_j), \quad (2.8)$$

$$\mathbf{R}_{ij} = \frac{1}{2} (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j), \quad (2.9)$$

où \mathbf{k}_{ij} correspond au moment relatif entre les nucléons, \mathbf{R}_{ij} est la position du centre de masse entre les positions de deux nucléons et $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{ij}$ les éléments de matrice du vecteur de matrices de Pauli. Il existe aussi des versions plus raffinées avec l'ajout d'un terme tenseur comme les interactions de la série de forces TIJ [32,33], des dépendances en densité supplémentaires [34], des termes dépendants des dérivées jusqu'aux ordres quatre et six [35] ou encore des termes à trois voire quatre corps [36,37] à la place de la dépendance en densité.

L'usage d'une interaction de portée nulle permet d'alléger considérablement les calculs numériques puisque seule une intégrale sera présente lors du calcul de la valeur moyenne de l'énergie.

L'énergie du système considéré sera alors donnée par :

$$E_{\text{Sky}} = \langle \Psi | \hat{V}_{\text{Sky}} | \Psi \rangle = \int d^3r \mathcal{E}_{\text{Sky}}(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

Ici, $|\Psi\rangle$ correspond à un état HF(B) comme donné par l'équation (1.5).

La matrice densité à un corps, comme définie au chapitre 1 par l'équation (1.12), peut être décomposée sur la base formée par la matrice identité et les matrices de Pauli dans les espaces de spin et d'isospin :

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}_1\sigma_1\tau_1, \mathbf{r}_2\sigma_2\tau_2) = \frac{1}{4} \left\{ \rho_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\delta_{\sigma_1\sigma_2}\delta_{\tau_1\tau_2} + \rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\langle\tau_1|\hat{\tau}_z|\tau_2\rangle\delta_{\sigma_1\sigma_2} \right. \\ \left. + \mathbf{s}_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \langle\sigma_1|\hat{\boldsymbol{\sigma}}|\sigma_2\rangle\delta_{\tau_1\tau_2} + \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\langle\tau_1|\hat{\tau}_z|\tau_2\rangle \cdot \langle\sigma_1|\hat{\boldsymbol{\sigma}}|\sigma_2\rangle \right\}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

avec les densités

- scalaire-isoscalaire : $\rho_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma q} \rho(\mathbf{r}_1\sigma q, \mathbf{r}_2\sigma q)$,
- scalaire-isovectorielle : $\rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma_1\sigma_2} \rho(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2)\langle q_2|\hat{\tau}_z|q_1\rangle$,
- vectorielle-isoscalaire : $\mathbf{s}_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma_1\sigma_2} \rho(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2)\langle\sigma_2|\hat{\boldsymbol{\sigma}}|\sigma_1\rangle$,
- vectorielle-isovectorielle : $\mathbf{s}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma_1\sigma_2q_1q_2} \rho(\mathbf{r}_1\sigma_1q_1, \mathbf{r}_2\sigma_2q_2)\langle\sigma_2|\hat{\boldsymbol{\sigma}}|\sigma_1\rangle\langle q_2|\hat{\tau}_z|q_1\rangle$.

On peut aussi définir les densités locales obtenues à partir des définitions précédentes (pour simplifier les définitions sont écrites pour une espèce q) :

- $\rho_q(\mathbf{r}) = \rho_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$,
- $\mathbf{s}_q(\mathbf{r}) = \vec{s}_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$,
- $\tau_q(\mathbf{r}) = \nabla_r \cdot \nabla_{r'} \rho_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$: densité cinétique,
- $\mathbf{T}_q(\mathbf{r}) = \nabla_r \cdot \nabla_{r'} \mathbf{s}_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$: densité cinétique de spin,
- $\mathbf{j}_q(\mathbf{r}) = -\frac{i}{2}(\nabla_r - \nabla_{r'})\rho_q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$: densité de courant,
- $J_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{2}(\nabla_{r,\mu} - \nabla_{r',\mu})s_{q,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$: la densité de spin-courant,
- $F_{q,\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\sum_{\nu}(\nabla_{r,\mu}\nabla_{r',\nu} + \nabla_{r',\mu}\nabla_{r,\nu})s_{q,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$: densité cinétique tensorielle.

Les densités $\rho_q(\mathbf{r}), \tau_q(\mathbf{r})$ et $J_{\mu\nu}(\mathbf{r})$ sont paires par renversement du temps, tandis que les densités $\mathbf{s}_q(\mathbf{r}), \mathbf{T}_q(\mathbf{r}), \mathbf{j}_q(\mathbf{r})$ et $\mathbf{F}_q(\mathbf{r})$, sont impaires par renversement du temps.

2.2 Ajustement à l'aide d'une fonction de pénalité

2.2.1 Description du χ^2

Comme nous avons pu le voir, la forme standard de l'interaction de Skyrme (2.1) fait intervenir 10 paramètres ($t_0, x_0, t_1, x_1, t_2, x_2, t_3, x_3, \alpha, W_0$). Dans cette étude α sera constant et égal à $1/6$, ce qui permet d'obtenir des valeurs raisonnables pour la masse effective et pour le module d'incompressibilité dans la matière infinie [38]. Pour que cette interaction puisse permettre de décrire les propriétés des noyaux, il va falloir ajuster les paramètres. Pour cela, nous allons nous servir d'observables que l'on va séparer en deux catégories.

D'un côté celles que l'on nommera « pseudo-observables » : elles sont reliées aux propriétés de milieux idéalisés correspondants à certaines limites des systèmes nucléaires telle que la matière nucléaire (semi-)infinie. On trouvera dans cette catégorie des observables comme l'énergie par nucléon E/A , le module d'incompressibilité (K_∞), etc...

L'autre catégorie correspond à des propriétés de noyaux provenant de données expérimentales. On pourra y trouver des énergies de liaison, des rayons de charge ou encore des profils de densité de charge.

À l'aide de l'ensemble de ces observables, nous allons pouvoir contraindre les paramètres de l'interaction en utilisant la méthode des moindres carrés. Le but va être de trouver dans l'espace des paramètres p_i le vecteur \mathbf{p}_0 permettant de reproduire au mieux l'ensemble des observables choisies. Ceci se traduira mathématiquement par la minimisation de l'expression suivante :

$$\chi^2 = \sum_i \chi_i^2 \quad \text{avec} \quad \chi_i^2 = \left(\frac{\mathcal{O}_i^{\text{th}}(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i^{\text{exp}}}{\Delta \mathcal{O}_i} \right)^2. \quad (2.12)$$

Où ici nous avons :

- $\chi^2 \rightarrow$ Fonction de pénalité ;
- $\mathcal{O}_i^{\text{th}}(\mathbf{p}) \rightarrow$ Valeur de l'observable calculée à l'aide de l'interaction ;
- $\mathcal{O}_i^{\text{exp}} \rightarrow$ Valeur de l'observable que l'on veut reproduire ;
- $\Delta \mathcal{O}_i \rightarrow$ Tolérance sur l'observable.

Algorithme de minimisation : Approximation quadratique du χ^2

Lorsque l'on parle d'approximation quadratique du χ^2 , on va considérer que pour des petites variations des paramètres, les observables que l'on utilise dans le protocole de minimisation varient linéairement avec les paramètres. Autrement dit on a :

$$\mathcal{O}_i^{\text{th}}(\mathbf{p}) \approx \mathcal{O}_i^{\text{th}}(\mathbf{p}_0) + \sum_{k=1}^N \delta p_k \frac{\partial \mathcal{O}_i^{\text{th}}(\mathbf{p}_0)}{\partial p_k} = a_{i0} + \sum_{k=1}^N \delta p_k a_{ik}. \quad (2.13)$$

Cette approximation prend tout son sens si l'on se trouve au voisinage d'un extremum. De cette manière, le χ^2 pourra être exprimé comme :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^M \frac{1}{\Delta \mathcal{O}_i^2} \left(\mathcal{O}_i^{\text{th}}(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i^{\text{exp}} \right)^2 \approx \sum_{i=1}^M \frac{1}{\Delta \mathcal{O}_i^2} \left(a_{i0} + \sum_{k=1}^N \delta p_k a_{ik} - \mathcal{O}_i^{\text{exp}} \right)^2. \quad (2.14)$$

La minimisation revient donc à trouver l'ensemble des équations pour lesquelles la dérivée première de la fonction de pénalité par rapport aux paramètres s'annule :

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial p_k} = 0. \quad (2.15)$$

Ce qui nous conduit au système linéaire suivant :

$$M\delta\mathbf{p} = \mathbf{b}, \quad (2.16)$$

avec M et \mathbf{b} donnés par :

$$M_{kk'} = \sum_{i=1}^M \frac{a_{ik}a_{ik'}}{\Delta\mathcal{O}_i^2}, \quad (2.17)$$

et

$$b_k = \sum_{i=1}^M \frac{(\mathcal{O}_i^{\text{exp}} - a_{i0})a_{ik}}{\Delta\mathcal{O}_i^2}. \quad (2.18)$$

Les solutions δp_k du système (2.16) donnent les variations des paramètres permettant de se rapprocher du minimum. L'algorithme consiste à commencer le calcul avec des valeurs initiales pour les paramètres $p_k^{(0)}$, puis utiliser le système (2.16) pour calculer de nouveaux paramètres $p_k^{(1)} = p_k^{(0)} + \delta p_k$ et itérer jusqu'à la convergence.

Maintenant vient une question plus délicate au cœur du protocole d'ajustement : quelles observables doit-on choisir pour contraindre les paramètres ?

Il est bon de faire une petite précision dès maintenant. Les capacités prédictives d'une interaction sont le résultat d'un choix que l'on fait pendant l'ajustement. Ce dernier va être motivé par ce que l'on veut étudier avec l'interaction. Il serait naïf de penser qu'il est possible de construire une interaction qui pourrait être considérée comme universelle et capable de reproduire toutes les données en même temps. De plus, dans notre cas, nous développons une interaction utilisable à l'approximation du champ moyen. Dès lors, les choix qui seront fait ne prennent pas en compte l'étudier des phénomènes décrits au-delà de ce niveau d'approximation.

Motivations

Dans notre cas, nous voulons ajuster une interaction permettant de reproduire au mieux les phénomènes que l'on considère comme liés aux propriétés de « surface » du noyau comme : la déformation, la coexistence de forme, les barrières de fission ou encore, indirectement, les bandes rotationnelles. Il est clair que tous ces phénomènes sont corrélés au coefficient d'énergie de surface a_{surf} comme les études de Bartel ou de Jodon [39, 40] l'ont montré.

Notre travail s'inscrit donc dans la suite de ceux des références [40] et [15] sur les propriétés de surface des noyaux lourds et superlourds. À la suite de ces travaux, la série de paramétrisations SLy5sX fut ajustée, notamment la plus utilisée SLy5s1.

Ce qui nous pousse à aller au-delà de SLy5s1 tient au fait que malgré sa capacité à reproduire les propriétés liées aux déformations des noyaux [15, 41], les prédictions obtenues avec cette paramétrisation pour les énergies de liaison des noyaux laissent à désirer.

Nous allons donc reprendre une partie du protocole qui a servi à ajuster cette paramétrisation tout en améliorant les points qui lui font défaut.

Pour cela, nous nous sommes concentrés sur trois points : le coefficient d'énergie de surface ($a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$) (calculé à l'approximation Modified Thomas-Fermi), la correction du mouvement du centre de masse (c.m), qui d'une manière indirecte a un impact sur les propriétés de surface, et enfin la masse effective isoscalaire qui joue un rôle pour les énergies de particules individuelles.

2.2.2 Coefficient d'énergie de surface

Il existe plusieurs méthodes pour calculer la valeur du coefficient a_{surf} . On peut passer par un modèle du type goutte liquide en calculant un grand nombre d'énergies de liaison de noyaux et en les utilisant pour ajuster les coefficients de la formule [2].

Nous avons décidé de calculer ce coefficient en utilisant un modèle de matière nucléaire semi-infinie [42,43] symétrique ($N=Z$). Dans ce modèle, la densité de nucléon ρ_0 est égale à la densité de saturation ρ_{sat} lorsque $z \rightarrow \infty$ et va tendre vers 0 pour $z \rightarrow -\infty$. Les densités sont considérées constantes dans les directions x et y .

Dans ce milieu, la tension de surface σ est définie comme la différence entre l'énergie du système avec des limites dues à la surface et une énergie de référence, qui sera prise comme définie dans la référence [44] et qui correspond à l'énergie de volume du système semi-infini :

$$\sigma = (E_L - E_{\text{ref}})/S. \quad (2.19)$$

L'énergie E_L pour une tranche de matière semi-infinie de largeur L est donnée par :

$$E_L = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathcal{E}(z) dz, \quad (2.20)$$

où \mathcal{E} est la densité d'énergie dans le système semi-infini. L'énergie que ce système devrait avoir s'il était infini, est donnée par :

$$E_{\text{ref}} = a_v \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \rho(z) dz. \quad (2.21)$$

Si l'on reprend les expressions des équations (2.20) et (2.21) et qu'on les réinjecte dans la définition de la tension de surface (2.19), on obtient alors :

$$\sigma = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz [\mathcal{E}(z) - a_v \rho(z)]. \quad (2.22)$$

Dans cette expression, σ correspond bien à une énergie par unité de surface.

Pour un noyau de masse A et de rayon $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ dans lequel la densité est considérée constante, on a :

$$r_0 = \left(\frac{3}{4\pi\rho_{\text{sat}}} \right)^{1/3}, \quad (2.23)$$

et on peut définir une énergie de surface par nucléon comme $\frac{E_{\text{surf}}}{A} = a_{\text{surf}} A^{-\frac{1}{3}}$, ce qui nous conduit à :

$$a_{\text{surf}} = 4\pi r_0^2 \sigma = 4\pi r_0^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz [\mathcal{E}(z) - a_v \rho(z)]. \quad (2.24)$$

Maintenant que l’on a vu comment extraire ce coefficient d’énergie de surface de manière générale dans la matière semi-infinie, nous allons exposer les trois méthodes que l’on peut utiliser pour faire le calcul :

- La méthode Hartree-Fock (HF) [44, 45] ;
- La méthode Thomas-Fermi étendue (ETF) [46, 47] ;
- Et enfin la méthode de Thomas-Fermi modifiée (MTF) [47, 48].

La première, HF nécessite de calculer les fonctions d’onde des nucléons et de faire un calcul auto-cohérent. Ceci va donc demander un temps de calcul non négligeable qui pourrait être un frein à son utilisation lors d’un protocole d’ajustement. De plus, la valeur obtenue pour a_{surf} n’est pas très stable en raison des oscillations observées au bord de la boîte utilisée pour le calcul [14]. Les deux autres méthodes sont basées sur des calculs semi-classiques.

Dans la méthode ETF nous n’utilisons plus de fonction d’onde pour décrire les nucléons, mais directement la densité locale qui dépendra de plusieurs paramètres à ajuster. À partir de la densité de matière, ρ_0 , on peut exprimer la densité cinétique τ_0 et la densité spin-orbite J_0 . De là, nous pouvons de nouveau extraire des propriétés nucléaire via un calcul variationnel. Cette méthode n’utilise plus de fonction d’onde et est par conséquent moins lourde numériquement qu’un calcul HF.

Enfin, la méthode MTF, qui est aussi semi-classique, se base sur des calculs ETF jusqu’à l’ordre $\hbar = 2$, mais avec l’approximation que la masse effective est donnée par une fonction de la densité ρ_0 . Avec cette condition supplémentaire, le calcul MTF permet d’obtenir une équation d’Euler-Lagrange que l’on peut résoudre de manière analytique donc sans avoir à passer par un calcul variationnel.

Les trois méthodes exposées ici permettent d’extraire de manière plus ou moins rapide et stable le coefficient a_{surf} . Comme les auteurs de [40] l’ont montré et comme présenté sur la figure 2.1, la valeur de ce coefficient va être décalée selon la méthode de calcul employée. Les différences entre les résultats obtenus par des calculs HF/ETF ou HF/MTF restent globalement constantes comme le montre la figure 2.2. Il ne semble donc pas nécessaire d’utiliser une méthode très complexe pour explorer les différentes valeurs de ce paramètre puisqu’une méthode simple de type MTF est équivalente à une méthode HF à un décalage constant près. Sachant que notre intérêt n’est pas tant la valeur de ce paramètre, mais plutôt d’avoir un moyen de le contrôler, nous allons prendre l’approximation la plus facile d’utilisation pour contraindre a_{surf} . Nous avons donc choisi d’utiliser l’approximation MTF pour le protocole d’ajustement.

La série SLy5sX a été ajustée avec un intervalle allant de 18.0 à 19.4 MeV. Dans la nouvelle étude que nous présentons ici, nous avons élargi un peu la fenêtre de valeurs et fait varier $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ de 16.5 à 20.0 MeV par pas de 0.2 MeV pour chaque jeu de paramétrisations (qui seront détaillés dans la suite).

2.2.3 Correction du mouvement du centre de masse

À l’approximation du champ moyen, on utilise une fonction d’onde qui est le produit de A fonctions d’onde individuelles qui, en représentation coordonnée, seront calculées aux A positions des nucléons.

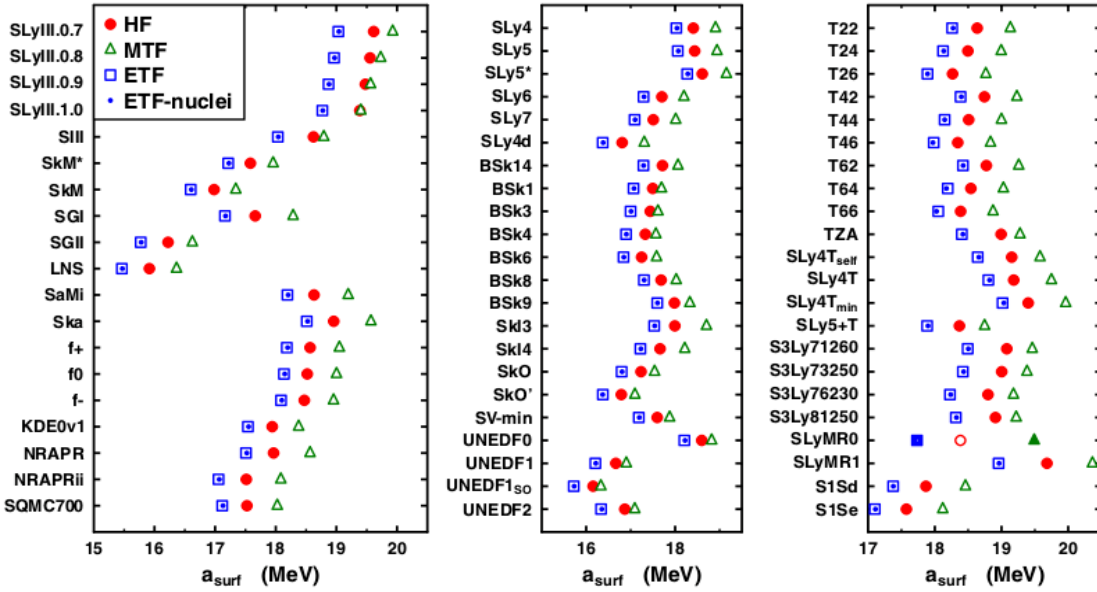


FIGURE 2.1 – Coefficient d'énergie de surface pour différentes paramétrisations pour des valeurs de a_{surf} calculées avec les méthodes HF, ETF et MTF. Les références sur les différentes paramétrisations sont données dans [40]. Figure tirée de Jodon *et al.* [40]

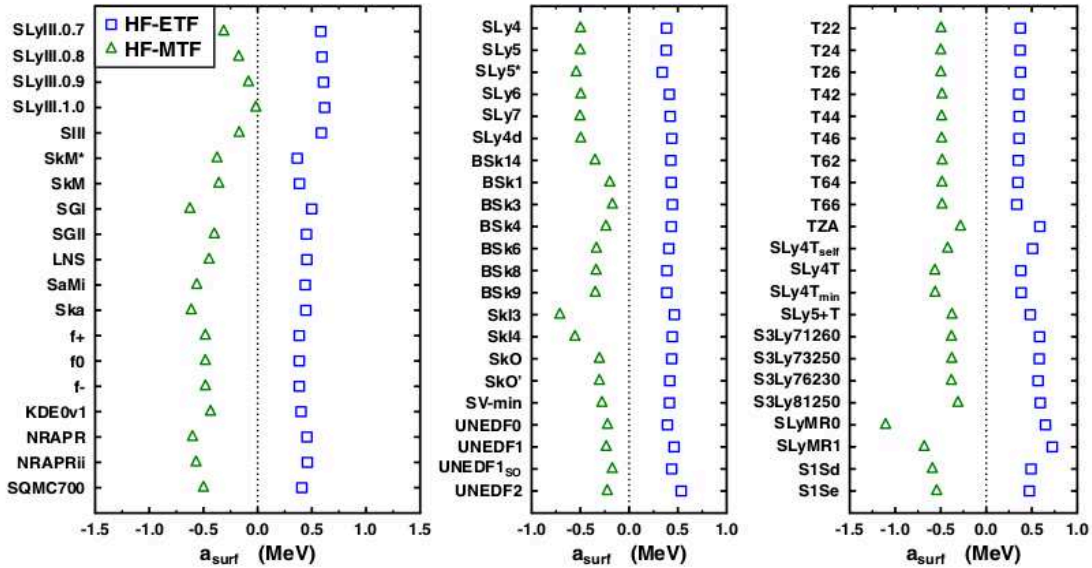


FIGURE 2.2 – Différence Δa_{surf} entre les résultats obtenus avec différentes méthodes et avec le même ensemble de paramétrisations que sur la figure 2.1. Figure tirée de Jodon *et al.* [40]

Ce choix, bien qu'il facilite les calculs va avoir des conséquences sur les résultats puisque l'on va briser la symétrie par translation. Une de ces conséquences est le fait de voir apparaître une contribution supplémentaire dans l'énergie correspondant au mouvement du centre de masse.

L'énergie interne du système doit normalement dépendre des coordonnées relatives entre les nucléons, chose impossible avec une fonction d'onde produit puisque l'on utilise A coordonnées au lieu de $A - 1$.

Pour pallier à ce problème, nous soustrayons à l'énergie totale la partie due à la valeur moyenne de l'énergie du centre de masse de la manière suivante :

$$E_{\text{tot}} = \langle \hat{H} - \frac{\hat{\mathbf{P}}_{\text{c.m.}}^2}{2mA} \rangle = E_{\text{int}} - E_{\text{c.m.}}^{\text{mic}}, \quad (2.25)$$

avec

$$E_{\text{int}} = \langle \hat{H} \rangle, \quad \text{et} \quad E_{\text{c.m.}}^{\text{mic}} = \frac{\langle \hat{\mathbf{P}}_{\text{c.m.}}^2 \rangle}{2Am} = \sum_i \frac{\langle \mathbf{p}_i^2 \rangle}{2Am} + \sum_{i < j} \frac{\langle \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j \rangle}{Am}. \quad (2.26)$$

On voit apparaître dans l'expression de l'énergie du c.m. deux termes. Le premier, est un opérateur à un corps et donne une contribution locale au champ moyen. Ce terme à la même structure que l'énergie cinétique et introduit une renormalisation en $(1 - \frac{1}{A})$ à cette dernière. Le second terme est un opérateur à deux corps et va donner une contribution non-locale au champ moyen. Historiquement, la plupart des interactions ont été ajustées sans prendre en compte le deuxième terme à cause de sa complexité d'implémentation numérique et surtout à cause de son temps de calcul non négligeable. Il s'avère qu'un certain nombre d'interactions ont également été construites au fil du temps sans aucun des deux termes ou seulement avec la correction à un corps.

Différents traitement pour la correction du centre de masse

L'étude menée par Bender *et al.* [49] a montré que le terme à deux corps de la correction du mouvement du centre de masse a un comportement en $A^{2/3}$ et est donc proportionnel à l'énergie de surface [2]. Sachant que ce terme va avoir une influence sur les propriétés que l'on considère comme étant liées à la surface, nous avons décidé d'explorer son impact sur l'étude de quelques noyaux. Nous avons ajusté des interactions en traitant la correction du centre de masse de manière auto-cohérente dans le protocole d'ajustement, c'est-à-dire en prenant en compte la contribution au champ moyen¹.

Nous avons finalement fait le choix de construire trois séries d'interactions qui seront par la suite notées 1F2F lorsqu'aucune correction pour le centre de masse n'aura été prise en comptes, 1T2F pour les paramétrisations avec seulement le terme à un corps de la correction et 1T2T pour celles avec la correction à un et deux corps.

2.2.4 Autres contraintes du protocole

Maintenant, que nous avons expliqué les principaux changements que nous voulions apporter au protocole d'ajustement, nous allons aussi parler des autres contraintes qui ont

1. Dans le programme MOCCA [50] la correction à deux corps est traitée de manière perturbative à cause de son coût numérique relativement important en 3D.

été utilisées. Le sujet de la masse effective sera abordé dans la discussion sur la matière nucléaire infinie symétrique puisque cette quantité est obtenue à partir d'un calcul dans ce milieu.

Matière nucléaire infinie symétrique

La matière nucléaire infinie est un milieu idéalisé infiniment grand, homogène et isotrope composée de neutrons et de protons. Dans ce milieu, l'interaction coulombienne entre les protons est considérée comme nulle pour éviter toute divergence de l'énergie totale du système. Le milieu étant invariant par translation, les fonctions d'onde s'écriront comme des ondes planes (C.1).

La matière symétrique infinie est définie comme non-polarisée avec des nombres identiques de protons et de neutrons. Les corrélations d'appariement sont supposées inexistantes. On aura donc :

$$\rho_n = \rho_p = \frac{1}{2} \rho_0, \quad \tau_n = \tau_p = \frac{1}{2} \tau_0, \quad (2.27)$$

$$\rho_1 = \rho_n - \rho_p = 0, \quad \mathbf{s}_0 = \mathbf{s}_1 = 0. \quad (2.28)$$

L'interaction entre deux nucléons est de courte portée, il en découle que les nucléons au centre des noyaux lourds vont dans une certaine mesure pouvoir être considérés comme étant dans ce milieu idéalisé qu'est la matière nucléaire infinie. Il devient alors intéressant de connaître quelques propriétés de ce milieu.

Une première quantité que l'on peut extraire correspond à l'énergie par nucléon donnée par l'équation (C.12). De là, nous pouvons définir le point de saturation qui est le point où la pression de la matière nucléaire devient nulle (voir eq. (C.13)), ce qui donne accès à la densité de saturation ρ_{sat} représentée sur la figure 2.3. Les expériences de diffusion montrent que la densité de nucléons au centre des noyaux lourds semble être à peu près constante [51]. Cette densité donne une estimation de la densité de saturation ($\rho_{\text{sat}} \approx 0,16 \text{ fm}^{-3}$).

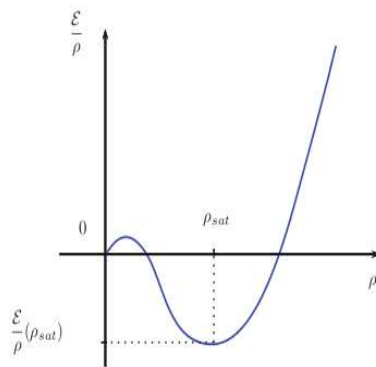


FIGURE 2.3 – Énergie par nucléons dans la matière nucléaire infinie symétrique. Le point de saturation est indiqué par l'intersection des lignes pointillées. Figure tirée de la thèse de R. Jodon [36].

Une autre quantité caractéristique est le module d'incompressibilité K_∞ . Ce dernier est proportionnel à la dérivée seconde de l'énergie par nucléon par rapport à la densité au point de saturation (voir équation (C.14)).

Dans la matière nucléaire infinie les nucléons sont considérés comme libres, mais baignant dans un milieu, l'énergie d'un nucléon de moment \mathbf{k} est donnée par :

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (2.29)$$

Comme les nucléons sont, à l'approximation du champ moyen, des quasi-particules sans interaction, leurs énergie cinétique est donnée par :

$$\langle \mathbf{k} | h | \mathbf{k}' \rangle = \varepsilon_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \equiv \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (2.30)$$

où h est le champ moyen. On extrait de cette expression la masse effective isoscalaire m^*/m par la relation

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \left. \frac{1}{2k} \frac{d\varepsilon_{\mathbf{k}}}{dk} \right|_{k=k_F}, \quad (2.31)$$

avec k_F le moment de Fermi.

Cette quantité présente un intérêt tout particulier dans cette étude puisque la masse effective a un impact sur la densité d'états. Or, la déformation des noyaux est en partie due aux effets de couches. On comprend alors l'intérêt de la masse effective qui va permettre de jouer sur la densité d'états et son évolution avec la déformation.

Matière nucléaire infinie asymétrique (AINM)

Considérons maintenant la matière nucléaire infinie asymétrique dans laquelle $\rho_n \neq \rho_p$. Ceci implique que la densité isovectorielle ρ_1 n'est plus nulle. On introduit le paramètre d'asymétrie, noté I et défini comme étant :

$$I = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho_n + \rho_p} = \frac{\rho_1}{\rho_0}. \quad (2.32)$$

L'équation d'état dans cette matière, réécrite en fonction de ρ_0 et de I , va prendre la forme de l'équation (C.16).

À partir de l'équation d'état, on peut en déduire le coefficient d'énergie de symétrie J qui est proportionnel à la dérivée seconde de l'énergie par nucléons à $I = 0$ (voir équation C.18), et la pente de l'énergie de symétrie L qui est proportionnelle à la dérivée de J par rapport à la densité (voir équation C.19).

Matière de neutrons (PNM)

La matière de neutrons est caractérisée par la seule présence de neutrons, on a donc un facteur d'asymétrie I égal à 1 et les densités isoscalaires et isovectorielles vont être égales ($\rho_0 = \rho_1 = \rho_n$). Aucun état lié n'est prédit dans ce milieu. L'intérêt porté pour ce type de matière vient de la volonté de fortement contraindre la dépendance en isospin des fonctionnelles. De plus, au-delà de l'étude des noyaux, ajouter l'équation d'état de

la matière de neutrons parmi les contraintes permettant d'ajuster les paramètres d'une interaction peut s'avérer utile dans l'optique d'étudier des systèmes astrophysiques tels que l'écorce des étoiles à neutrons.

Données concernant les noyaux

Pour le moment, nous avons contraint les paramètres en ne prenant en compte que des propriétés de matière nucléaire infinie. Dans ces milieux les termes spin-orbite, les termes de surface ou encore l'appariement ne contribuent pas.

Or, un noyau est un système de taille finie, donc avec une surface et qui surtout présente des effets de couches. Il est alors nécessaire d'apporter de l'information sur ce type de système si l'on veut des interactions qui puissent être prédictives. Pour ce faire, nous allons donc ajouter des observables propres aux noyaux. La première question à se poser est donc de savoir quelles sont les observables que l'interaction doit reproduire au mieux. Car, encore une fois, le pouvoir prédictif d'une interaction est dépendant du choix des observables utilisées pour contraindre ses paramètres.

Dans le cadre de cette étude, nous voulons construire une paramétrisation en mesure de reproduire au mieux les effets de surface des noyaux en jouant surtout sur l'impact de trois facteurs : la valeur du coefficient d'énergie de surface $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$, le traitement de la correction du mouvement du centre de masse et la valeur de la masse effective. Il faut ajouter à cela le fait que l'on veut que l'interaction ait une meilleure capacité prédictive pour les énergies de liaison que SLy5s1.

Au vu des facteurs sur lesquels on va jouer, nous avons été amenés à ajuster un grand nombre de paramétrisations (nous avons considéré 3 valeurs pour la masse effective, 3 traitements possibles pour la correction du mouvement du c.m. et des valeurs de a_{surf} entre 16,5 et 20 MeV). Il nous a donc fallu choisir des observables de noyaux qui soient simples et rapides à calculer pour pouvoir faire une étude comparative. Nous avons également voulu savoir si le simple fait de contraindre le coefficient d'énergie de surface permettait d'obtenir une interaction prédictive pour les propriétés des noyaux déformés sans prendre en compte de tels noyaux pour l'ajustement des paramètres des interactions.

Nous avons donc décidé de ne prendre en compte que des énergies de liaison de noyaux sphériques (et doublement magiques donc sans corrélation d'appariement). Ce choix est motivé par le fait que le temps de calcul pour ces noyaux est assez faible. De plus, le choix des noyaux est aussi justifié par le fait que ce travail s'inscrit dans la suite des travaux de [14] qui ont permis de mettre au point SLy5s1. Nous voulons un protocole assez proche de ce dernier pour pouvoir comparer les résultats avec SLy5s1. Pour contraindre le terme spin-orbite, nous avons considéré la différence d'énergie de liaison entre le ^{56}Ni et le ^{40}Ca en partant du principe qu'une partie de la différence entre les énergies de ces deux noyaux vient de la position de la couche $f_{7/2}$ par rapport à la couche (sd).

L'ensemble des noyaux utilisés dans le protocole d'ajustement est donné dans le tableau 2.1.

Instabilités de taille finie

Il a été mis en évidence, il y a maintenant plusieurs années que certaines paramétrisations sont sujettes à des instabilités non physiques [52]. On peut voir les manifestations

de ce phénomène par des calculs ne parvenant pas à converger malgré un nombre anormalement important d'itérations, ou bien par exemple, par des oscillations de très grandes amplitudes des densités de neutrons et protons dans des noyaux entraînant une séparation entre les deux espèces. Il n'est pas évident au premier abord de savoir si une interaction est instable. En effet, des causes de différentes origines peuvent masquer la nature instable de ces paramétrisations. Par exemple, SLy5 est stable dans le canal $S = 0, T = 1$, mais présente des instabilités dans les canaux vectoriels. Ceci implique qu'il est possible de faire des calculs pour des noyaux pairs par renversement du temps (à symétrie sphérique par exemple), mais si l'on veut effectuer des calculs avec des termes impairs alors cette paramétrisation donnerait des résultats non physiques.

Une autre difficulté peut venir des choix pour la résolution numérique des équations HF(B). Des calculs ont été effectués avec des programmes unidimensionnel et tridimensionnel avec des pas de réseaux différents, et il semble qu'une résolution numérique insuffisamment fine puisse masquer ces instabilités [53].

Les effets peuvent aussi être dissimulés selon la base utilisée pour représenter les fonctions d'onde du système. Sur une base de fonctions d'oscillateurs harmoniques tronquée et caractérisée par un nombre de couches N donné [53], il est possible de voir dans certains cas que l'augmentation du nombre de couches n'entraîne pas nécessairement une diminution de l'énergie du système. Or, ceci ne devrait pas être le cas. En augmentant la taille de l'espace variationnel, nous ne pouvons que trouver des énergies de plus en plus basses et non l'inverse. Autrement dit, il n'y a pas de convergence visible avec l'augmentation de N [53], ce qui rentre en contradiction avec le principe même de la méthode.

Tous ces points nous obligent à faire preuve de vigilance et à essayer de trouver un moyen de prévenir ces instabilités de taille finie. Pour cela, il est possible à l'aide de calcul RPA (random phase approximation) d'étudier les conditions pour lesquelles on va voir apparaître des pôles dans la fonction de réponse, signatures d'une instabilité [54].

La réponse linéaire comme sonde des instabilités

Le formalisme de la réponse linéaire offre un outil pour mettre en évidence l'apparition de possibles instabilités. Il a été mis en avant dans les références [53, 55] que l'apparition d'un pôle dans la fonction de réponse RPA dans la matière infinie, à des densités proches de celles que l'on peut observer dans des systèmes finis, pouvait être reliée à l'émergence d'instabilités dans les noyaux.

La réponse linéaire permet de sonder, à l'aide de l'interaction résiduelle particule-trou (ph) et dans le cadre de la théorie des liquides de Fermi, la réponse d'un système soumis à une excitation extérieure d'énergie ω^2 avec un moment transféré \mathbf{q} entre les états de particules et de trous.

Nous avons pour cela besoin de définir la fonction de Green correspondant au propagateur particule-trou :

$$G_{\text{HF}}(q, \mathbf{k}_1, \omega) = \frac{\theta(k_F - k_1) - \theta(k_F - |\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|)}{\omega + \varepsilon(k_1) - \varepsilon(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|) + i\eta}, \quad (2.33)$$

2. Dans le formalisme de la réponse linéaire, on utilise en général un système d'unités dans lequel $\hbar = 1$ et donc $E = \hbar\omega \equiv \omega$.

ce qui permet ensuite d'obtenir la fonction de réponse HF :

$$\chi_{\text{HF}}(\mathbf{q}, \omega) = n_d \int \frac{d^3 k_1}{(2\pi)^3} G_{\text{HF}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}, \omega), \quad (2.34)$$

où n_d correspond au facteur de dégénérescence (4 pour la matière infinie symétrique et 2 pour la matière de neutrons pure). Il faut ensuite ajouter des corrélations via l'interaction résiduelle pour construire la fonction de réponse RPA. L'interaction résiduelle est donnée par la dérivée seconde de la densité d'énergie par rapport aux densités de nucléons :

$$V_{ph}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{\delta^2 \mathcal{E}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_1) \delta \rho(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{q})}. \quad (2.35)$$

La fonction de green $G_{RPA}^{(\alpha)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}, \omega)$ est alors donnée par :

$$G_{RPA}^{(\alpha)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}, \omega) = G_{\text{HF}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}, \omega) + G_{\text{HF}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}, \omega) \sum_{\alpha'} \int \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3} V_{ph}^{(\alpha, \alpha')}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) G_{RPA}^{(\alpha')}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}, \omega). \quad (2.36)$$

Ce qui permet de définir la fonction de réponse $\chi_{RPA}^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \omega)$ comme :

$$\chi_{RPA}^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \omega) = n_d \int \frac{d^3 k_1}{(2\pi)^3} G_{RPA}^{(\alpha)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}, \omega). \quad (2.37)$$

On définira une instabilité ρ_{crit} comme un point dans l'espace (q, ρ_0) où, pour une énergie d'excitation $\omega = 0$, la fonction de réponse $\chi_{RPA}^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \omega)$ présente un pôle.

Comme dit précédemment, ce formalisme est un outil nous permettant de voir où vont apparaître les instabilités dans la matière nucléaire infinie, mais ce qui nous intéresse est d'étudier l'impact de ces pôles sur les noyaux. Dans la référence [54], les auteurs ont pris la paramétrisation SLy5 et ont augmenté l'intensité de la valeur de la constante de couplage du terme en gradient de la densité scalaire-isovectorielle $C_1^{\rho\Delta\rho}$ qui est originellement de 16 MeV fm⁵, pour l'augmenter à 37 voire 47 MeV fm⁵. Sur la droite de la figure 2.4, on voit qu'une augmentation de cette constante de couplage va rapprocher la valeur de ρ_{crit} jusqu'à des valeurs plus petites que la densité de saturation ρ_{sat} . La partie gauche de la figure 2.4 montre l'effet de l'augmentation de cette constante de couplage dans les noyaux. On voit que pour SLy5 qui a une densité critique bien au-delà de la saturation dans la matière infinie, les oscillations de la densité isovectorielle ρ_1 sont de faibles amplitudes comparées à celles de la courbe en pointillée où la paramétrisation présente des instabilités à des valeurs de ρ_0 plus proches de celles dans les noyaux.

Toute instabilité ne conduit pas à un résultat non physique. Par exemple, à basse densité, il existe une instabilité, dite « spinodale », correspondant à une transition de phase liquide-gaz dans la matière nucléaire pour le canal $(S = 0, T = 0)$. En revanche, les autres instabilités que l'on peut rencontrer n'ont, a priori, pas d'origine physique.

Ceci permet donc d'avoir un moyen d'identifier, ou tout du moins une quantité sur laquelle jouer pour éviter tout comportement indésirable lors de l'ajustement des interactions.

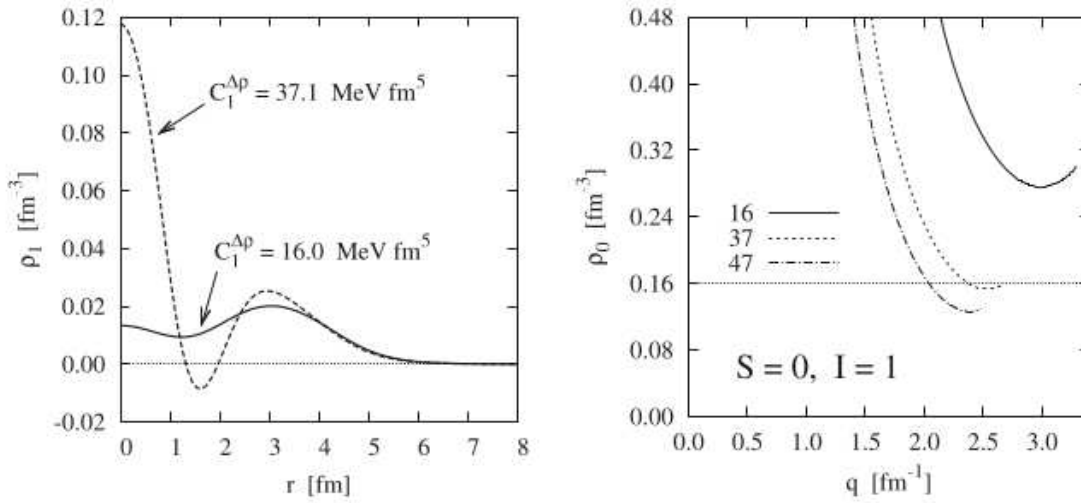


FIGURE 2.4 – La figure de gauche est représentée la densité isovectorielle ρ_1 en fonction de r pour différentes valeurs de la constante de couplage $C_1^{\Delta\rho}$ dans le ^{48}Ca . À droite, nous avons la densité isoscalaire ρ_0 en fonction du moment transféré q entre une particule et un trou encore pour différentes valeurs de $C_1^{\Delta\rho}$ dans la matière infinie symétrique. Figure prise de la thèse de T. Lesinski [33].

Contraintes des fonctionnelles en évitant les instabilités

Lors de l'ajustement d'une interaction, nous n'allons pas à proprement parler faire disparaître les instabilités, mais plutôt mettre une contrainte sur les densités minimales $\rho_{\min}^{(\alpha)}$ auxquelles elles peuvent apparaître dans chaque canal $\alpha = (S, T)$ pour les repousser de sorte que $\rho_{\min}^{(\alpha)} > 1,4 \times \rho_{\text{sat}}$. Cette technique a été utilisée pour réajuster l'interaction SLy5 et ainsi obtenir SLy5* [56] qui est stable dans le canal $S=1$, ce qui n'était pas le cas pour SLy5. On peut donc supposer que cette méthode nous permettra à minima de repousser les instabilités assez loin pour qu'elles ne soient pas problématiques pour les calculs effectués.

Données	$\mathcal{O}_i^{\text{target}}$	$\Delta\mathcal{O}_i$	Unités
Énergie de liaison			
$E(^{40}\text{Ca})$	-342,034	1,0	MeV
$E(^{48}\text{Ca})$	-415,983	1,0	MeV
$E(^{56}\text{Ni})$	-483,954	1,0	MeV
$E(^{78}\text{Ni})$	-642,522	2,0	MeV
$E(^{100}\text{Sn})$	-824,995	1,0	MeV
$E(^{132}\text{Sn})$	-1102,675	1,0	MeV
$E(^{208}\text{Pb})$	-1635,862	1,0	MeV
$E(^{56}\text{Ni}) - E(^{40}\text{Ca})$	-141,920	1,0	MeV
INM			
ρ_{sat}	0,160		fm^{-3}
$\mathcal{E}/\rho(\text{sat}, 0)$	-16,0	0,1	MeV
K_∞	230,0	10,0	MeV
m_0^*/m	(0,70 ; 0,80 ; 0,85)		
AINM			
J	32,0	1,0	MeV
L	50,0	5,0	MeV
PNM			
\mathcal{E}/ρ avec $\rho = 0,1 \text{ fm}^{-3}$	12,52	25%	MeV
Matière de neutron			
\mathcal{E}/ρ avec $\rho \in [0,03,0,45] \text{ fm}^{-3}$	[6,973 ; 42,12]	25%	MeV

TABLE 2.1 – Contraintes employées pour l'ajustement des paramètres des interactions. Les quantités ρ_{sat} et m_0^*/m sont données sans tolérance car deux relations ont été imposées entre les paramètres de l'interaction afin de fixer exactement leurs valeurs.

2.3 Conclusion sur le protocole d'ajustement

Dans ce chapitre nous avons présenté l'interaction de Skyrme standard qui sera utilisée dans la suite de cette partie. Nous avons vu que contraindre les paramètres d'une interaction n'est pas quelque chose d'évident. Il faut, pour commencer, bien réfléchir au but pour lequel la paramétrisation va être employée et choisir les observables qui rentreront dans le protocole d'ajustement.

Ensuite, nous avons abordé la question des instabilités de taille finie. Nous avons expliqué comment, avec une interaction de Skyrme, il était possible dans le protocole d'ajustement de repousser au plus loin la densité critique de manière à pouvoir faire des calculs sans se soucier d'un quelconque aspect pathologique des paramétrisations.

Dans le chapitre suivant, nous allons présenter les différents résultats que nous avons obtenus.

Résultats obtenus et analyse de données

Nous allons au cours de ce chapitre présenter l'ensemble des résultats obtenus avec les nouvelles paramétrisations. Nous commencerons par un bref regard sur les caractéristiques de ces paramétrisations, à savoir les résultats de la fonction de pénalité ainsi que les propriétés de la matière nucléaire infinie. Nous passerons ensuite aux différentes barrières de fission que nous avons étudiées. Puis nous regarderons les prédictions concernant les énergies de liaison de noyaux sphériques et déformés pour ensuite passer à la description des différentes déformations de noyaux. Enfin, nous examinerons les prédictions concernant l'appariement obtenues avec ces nouvelles paramétrisations.

Contents

3.1	Résultats de l'ajustement	34
3.1.1	Vérification des conditions de détermination du coefficient d'énergie de surface	34
3.1.2	Fonction de pénalité et matière nucléaire infinie	34
3.1.3	Énergies de particules individuelles de noyaux doublement magiques	37
3.2	Résultats des nouvelles paramétrisations pour les noyaux	38
3.2.1	Barrières de fission du ^{240}Pu et du ^{180}Hg	38
3.2.2	Déformation octupolaire β_{30} dans le ^{226}Ra	41
3.2.3	Énergies de liaisons	41
3.2.4	États à déformation normale et superdéformés	44
3.2.5	Étude concernant l'appariement	47
3.2.6	Oscillations des rayons de charges	50

3.1 Résultats de l'ajustement

3.1.1 Vérification des conditions de détermination du coefficient d'énergie de surface

Dans cette partie, nous allons exposer les résultats de l'ajustement des fonctionnelles. En premier lieu, nous devons vérifier que l'hypothèse centrale pour la détermination de la valeur de a_{surf} reste valable, à savoir que la différence entre les calculs HF, ETF et MTF, pour différentes valeurs de la masse effective, est toujours une fonction approximativement constante ou du moins monotone. La figure 3.1 présente les résultats pour a_{surf} calculés avec les trois méthodes pour chaque paramétrisation¹. La partie droite de la figure 3.1 montre que la différence Δa_{surf} obtenue avec les calculs HF et ETF d'une part, et HF et MTF d'autre part, est une fonction monotone de la masse effective.

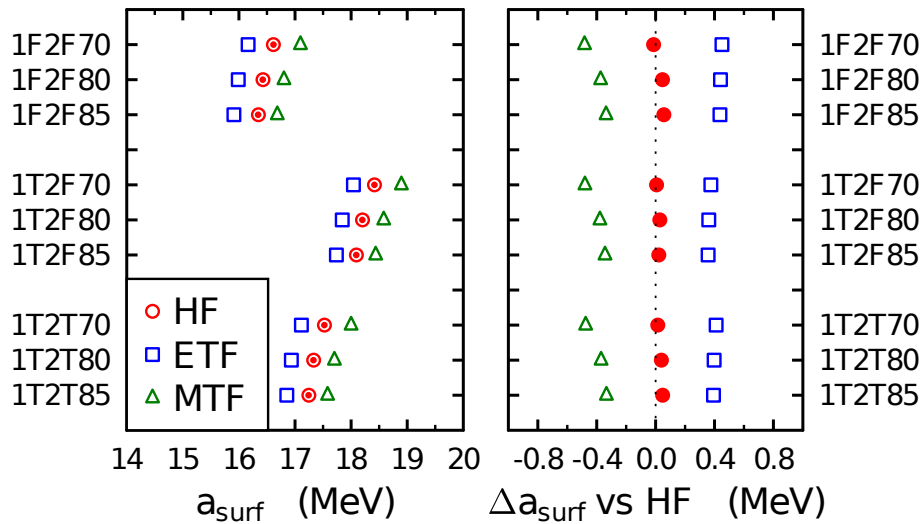


FIGURE 3.1 – Valeur du coefficient a_{surf} calculé avec la méthode HF en rouge, ETF en bleu et MTF en vert. Les points rouges sur la figure de gauche correspondent à des calculs HF faits avec un programme différent pour comparaison. Pour les points rouges de la figure de droite ce sont les différences entre les résultats des deux programmes.

3.1.2 Fonction de pénalité et matière nucléaire infinie

Résultats de la fonction de pénalité χ^2

Nous pouvons maintenant passer à une analyse post-ajustement. La figure 3.2 montre la fonction de pénalité en fonction de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ pour les trois différents traitements de la correction du mouvement du centre de masse. Il a été mis en évidence à plusieurs reprises que

1. Le choix des paramétrisations utilisées pour cette figure sera expliqué dans la suite de ce chapitre mais ne change rien à son analyse.

les interactions permettant une description raisonnable des barrières de fission et d'autres propriétés liées à la déformation avaient une valeur pour $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ comprise entre 17,6 et 18,0 MeV [14, 15]. À partir de la figure 3.2, on voit que le fait de prendre en compte les deux termes de la correction du mouvement du centre de masse permet d'obtenir pour les paramétrisations (1T2T), qui minimisent le χ^2 , une valeur de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ approximativement dans cet intervalle.

D'un autre côté, on voit que le fait de ne pas considérer cette correction (pour les interactions 1F2F) conduit à des valeurs de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ bien en dessous de celles attendues et que le fait de ne considérer que le terme à un corps conduit à des valeurs bien au-dessus (pour les interactions 1T2F).

Ceci nous permet d'expliquer pourquoi SLy5s1, qui a été ajustée avec le terme à un corps et dont la valeur de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ est égale à 18,0 MeV donne une bonne description des propriétés de déformation des noyaux mais, comme le montre la courbe bleue de la figure 3.2, ceci se fait au détriment d'autres observables, en particulier la description des énergies de liaison.

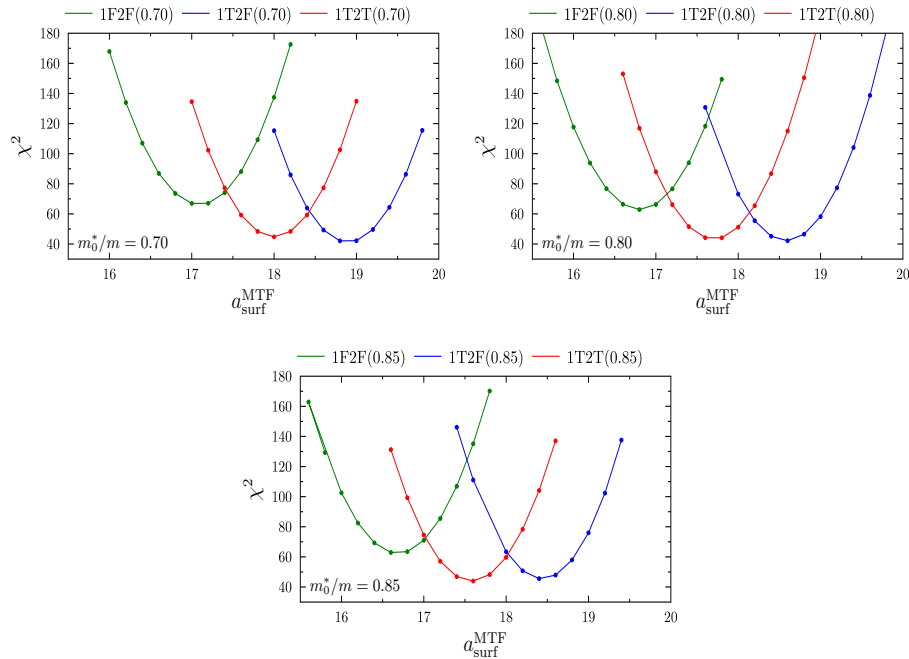


FIGURE 3.2 – Fonction de pénalité en fonction de la valeur (en MeV) à laquelle a été contraint le coefficient $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$. Les résultats sont donnés pour une masse effective égale à 0,70 (en haut à gauche), 0,80 (en haut à droite) et 0,85 (en bas) et pour trois traitements différents de la correction du mouvement du centre de masse (pas de correction pour les interactions 1F2F, terme à un corps uniquement pour les interactions 1T2F et termes à un et deux corps pour les interactions 1T2T).

Puisque l'optimisation des paramètres des fonctionnelles de type 1T2T donne des valeurs de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ proches de l'intervalle de valeurs supposées optimales, nous avons décidé de

produire une dernière série de paramétrisations pour lesquelles $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ n'est pas contrainte. Ces paramétrisations correspondent donc aux minima visibles sur la figure 3.2. Pour le reste de la discussion, nous utiliserons ces interactions qui seront appelées 1F2F(X), 1T2F(X), 1T2T(X) où X correspond à la valeur de la masse effective ainsi que les interactions SLy5s1 et SLy7 [57, 58] pour comparaison. La paramétrisation SLy7 a été ajustée avec les termes à un et deux corps pour la correction du mouvement du centre de masse mais elle est instable dans les canaux $S = 1$ [59].

	$a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ [MeV]	E/A [MeV]	K_{∞} [MeV]	J [MeV]	L [MeV]
1F2F(0,70)	17,1	-15,7	226,9	30,6	33,4
1T2F(0,70)	18,9	-16,0	229,0	30,7	33,4
1T2T(0,70)	18,0	-15,9	228,1	30,6	33,5
1F2F(0,80)	16,8	-15,7	214,7	30,8	35,0
1T2F(0,80)	18,6	-15,9	216,9	30,9	34,8
1T2T(0,80)	17,7	-15,8	216,0	30,8	35,2
1F2F(0,85)	16,7	-15,7	209,7	30,8	35,7
1T2F(0,85)	18,4	-15,9	211,8	30,9	35,0
1T2T(0,85)	17,6	-15,8	211,0	30,9	35,8
SLy5s1	18,0	-15,8	222,1	31,4	48,1
SLy7	18,0	-15,9	229,7	32,0	47,2

TABLE 3.1 – Propriétés de la matière nucléaire infinie. La densité de saturation est égale à $0,16 \text{ fm}^{-3}$ pour toutes ces interactions. La valeur de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ pour chaque interaction est également donnée.

Le tableau 3.1, permet de visualiser les résultats obtenus pour les quantités caractérisant la matière nucléaire infinie pour chaque interaction sélectionnée. On constate que toutes les paramétrisations 1F2F(X) donnent une valeur de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ comprise entre 16,6 et 17,1 MeV. Pour les paramétrisations 1T2F(X) on a des valeurs nettement plus grandes allant de 18,4 à 18,9 MeV. Pour finir, les paramétrisations 1T2T(X) donnent des valeurs intermédiaires entre 17,5 et 18,0 MeV. De plus, on constate qu'une augmentation de la masse effective entraîne une diminution de K_{∞} comme expliqué dans [57].

Ajustement des corrélations d'appariement

Avant de passer aux résultats pour les noyaux, nous devons définir la manière dont nous allons traiter les corrélations d'appariement. Lors de cette étude, nous avons utilisé deux programmes : `finres4` [60] qui permet de résoudre les équations HF(B) pour des noyaux sphériques (en utilisant des interactions de portée nulle ou de portée finie) et MOCCa [50] qui est un programme 3D permettant de résoudre les équations HF(B) pour des interactions de Skyrme. Les méthodes de résolution des équations de HF(B) sont très différentes dans ces deux programmes : intégrations des équations HF(B) avec la méthode proposée par Hooverman [61] dans le cas de `finres4` avec un cut-off dans le spectre de quasi-particules lorsqu'une interaction de portée nulle est utilisée dans le canal d'appariement [24] et avec

la méthode du temps imaginaire combinée à la « méthode à deux bases » avec un cut-off dans le spectre Hartree-Fock [50, 62–64] dans le cas de MOCCa.

Il n'est pas possible de traiter l'appariement de la même manière dans ces deux programmes, du moins dans leurs versions actuelles. Cette différence de traitement ne représente cependant probablement pas un problème car les détails concernant la forme de l'interaction utilisée dans le canal d'appariement et le choix fait pour le cut-off n'auront pas une grande influence sur les observables que nous allons calculer avec `finres4` (sauf, peut-être, pour les noyaux les plus exotiques [65]) et pour lesquelles nous ne voulons obtenir que des tendances globales.

Pour les calculs concernant les noyaux sphériques faits avec `finres4`, nous avons utilisé un simple appariement de volume (avec un cut-off à 60 MeV dans le spectre des quasi-particules [24]) et une intensité ajustée de manière à reproduire la même valeur moyenne du gap pour les neutrons que celle obtenue avec l'interaction D1S [4] dans ^{120}Sn .

Pour les calculs 3D, nous avons utilisé le programme MOCCa [50]. Dans le canal d'appariement nous avons utilisé une interaction de surface de la forme :

$$E_{\text{pair}} = \sum_{q=p,n} \frac{V_q}{4} \int d^3r \left[1 - \frac{\rho_0(\mathbf{r})}{\rho_c} \right] \tilde{\rho}_q^*(\mathbf{r}) \tilde{\rho}_q(\mathbf{r}). \quad (3.1)$$

Pour cette interaction, la valeur de la densité ρ_c pour laquelle l'appariement devient nulle est fixée à $0,16 \text{ fm}^{-3}$ et le cut-off est de $E_{\text{cut}} = 5 \text{ MeV}$ au dessus et en dessous du niveau de Fermi pour les protons et les neutrons comme défini dans la référence [62]. Dans le programme MOCCa, l'intensité du pairing V_q était à l'origine définie pour des interactions dont la masse effective valait 0,70 [14, 15]. Dans cette étude, nous avons ajusté des interactions avec des masses effectives de 0,80 et 0,85, nous avons donc du adapter la valeur de V_q en conséquence. Pour cela, nous avons décidé de prendre comme référence la valeur du gap de neutron dans le ^{188}Pb qui est d'environ 1,15 MeV et d'ajuster V_q . Ceci nous a conduit aux valeurs ci-dessous :

- $m^*/m = 0,70 \rightarrow V_q = -1250 \text{ MeV fm}^{-3}$;
- $m^*/m = 0,80 \rightarrow V_q = -1175 \text{ MeV fm}^{-3}$;
- $m^*/m = 0,85 \rightarrow V_q = -1140 \text{ MeV fm}^{-3}$.

3.1.3 Énergies de particules individuelles de noyaux doublement magiques

Ici, nous présentons les spectres d'énergies de particules individuelles de noyaux doublement magiques présents dans le protocole d'ajustement. Ces figures (3.3, 3.4) nous servent principalement à illustrer la contraction des spectres avec l'augmentation de la masse effective. Nous nous sommes limités à montrer les résultats pour le ^{40}Ca et pour le ^{208}Pb mais la conclusion est identique pour les autres noyaux. On peut aussi voir sur ces spectres que les paramétrisations de types 1F2F(X) et 1T2T(X) donnent des spectres assez similaires contrairement aux interactions du type 1T2F(X). Par exemple, pour le plomb, on voit que les paramétrisations 1T2F(X) ne prédisent pas les mêmes structures pour certaines énergies de particules individuelles. On peut voir, par exemple, que les états $2f_{7/2}$ et $1g_{9/2}$ pour les neutrons sont quasi-dégénérés pour une masse effective de 0,70 voire inversés pour

les autres, contrairement à ce que l'on obtient pour les 1F2F(X) et les 1T2T(X). Les états protons $2f_{7/2}$ et $1h_{9/2}$ sont également beaucoup plus proches l'un de l'autre avec les interactions du type 1T2F(X) qu'avec les deux autres. Ces résultats illustrent le fait que le choix fait pour le traitement de la correction du mouvement du centre de masse lors de l'ajustement des paramètres d'une interaction a un impact sur les énergies de particules individuelles. Cette observation est en accord avec celle faite lors de l'ajustement des interactions D1 et D1' [66].

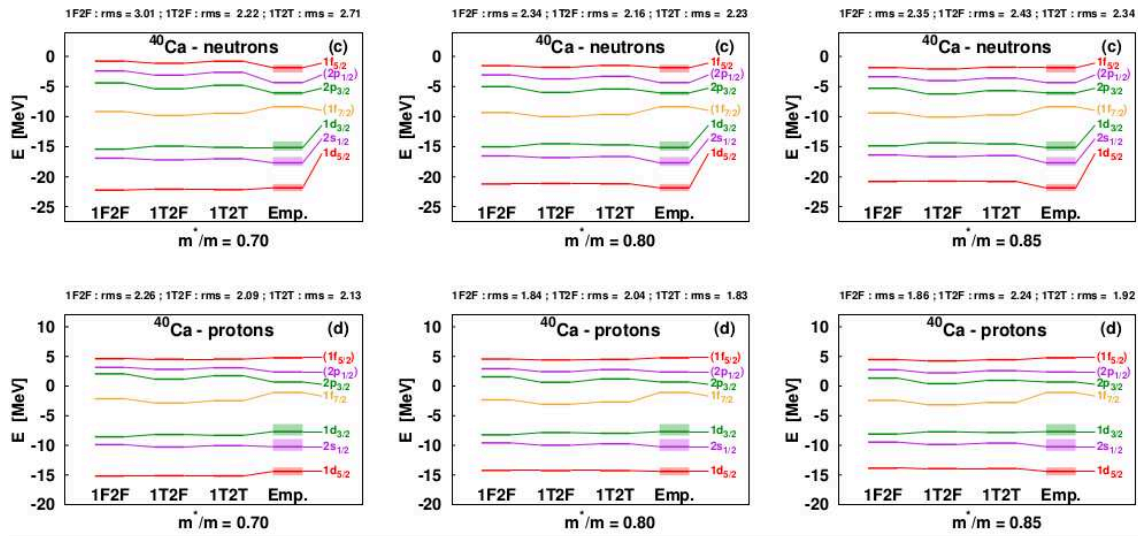


FIGURE 3.3 – Spectres d'énergies de particules individuelles du ^{40}Ca pour les trois masses effectives. En haut pour les neutrons et en bas pour les protons.

3.2 Résultats des nouvelles paramétrisations pour les noyaux

3.2.1 Barrières de fission du ^{240}Pu et du ^{180}Hg

Après avoir discuté des résultats concernant les fonctions de pénalité et quelques observables pour des noyaux pris en compte parmi les contraintes utilisées pour ajuster les paramètres, nous allons utiliser ces nouvelles paramétrisations pour le calcul de barrières de fission. Les calculs ont été effectués à l'aide du programme de simulation MOCCA, développé par W. Ryssens *et al.* [50]. Il nous permet de faire des calculs avec brisure de symétrie axiale dans le même esprit que ceux décrits dans [67].

Nous avons choisi de calculer des barrières de fission pour deux noyaux. Le premier, le ^{240}Pu , est un noyau souvent utilisé lors de ce type de calcul, il nous servira donc facilement de référence pour comparer les résultats avec ceux obtenus avec d'autres interactions.

Le second noyau est le ^{180}Hg car des données sont disponibles pour sa barrière de fission. De plus, il a aussi été utilisé dans l'étude des SLy5s(X), ce qui nous permettra une

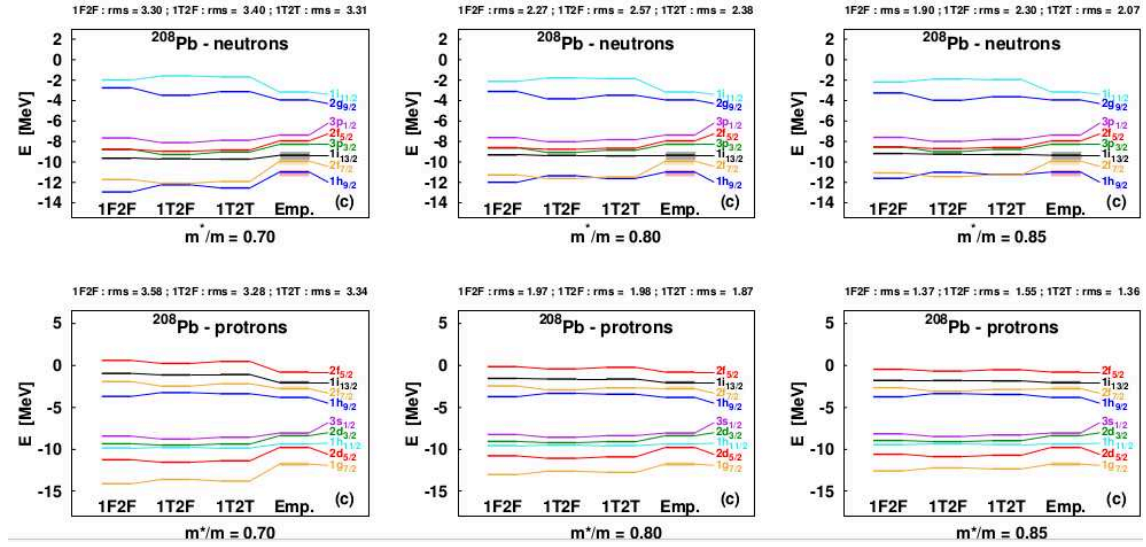


FIGURE 3.4 – Spectres d'énergies de particules individuelles du ^{208}Pb pour les trois masses effectives. En haut pour les neutrons en bas pour les protons.

comparaison plus simple avec les nouveaux résultats. Sur les figures 3.5 et 3.6 nous avons représenté l'énergie du noyau en fonction de la déformation quadrupolaire β_{20} . L'énergie est décalée de sorte que les minima soient à 0 MeV. Nous avons ici comparé les résultats avec ceux obtenus avec Sly5s1 et Sly7.

Barrière du plutonium ^{240}Pu

Ce noyau est caractérisé expérimentalement par un état fondamental prolate à $\beta_2 = 0,293 \pm 0,002$ d'après [68], ce qui est assez bien reproduit par l'ensemble des paramétrisations présentées ici.

Il exhibe aussi un isomère de forme à $\beta_{20} \approx 0,8$ avec une première barrière aux alentours de $\beta_{20} \approx 0,5$ et une seconde à $\beta_{20} \approx 1,3$. L'énergie correspondant à la correction du centre de masse varie très peu avec la déformation (moins de 0,5 MeV) comme le montre la partie droite de la figure 3.5.

Une conclusion importante que l'on peut tirer de cette figure est que la prise en compte de la correction du mouvement du centre de masse lors de l'ajustement des paramètres d'une interaction a un impact important sur la hauteur de la barrière (du moins pour ce noyau). Ajouter ou retirer la correction du mouvement du centre de masse lors du calcul avec une interaction qui n'a pas été ajustée en conséquence ne va faire que globalement décaler la courbe mais la hauteur de la barrière restera pratiquement inchangée.

Les interactions 1T2F(X) ont tendance à largement surestimer la hauteur des barrières (avec un $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}} > 18,0$ MeV), à l'inverse, les 1F2F(X) sous-estiment la barrière de fission (avec un $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}} < 17,0$ MeV). En revanche, la série 1T2T(X) donne des résultats assez proches de ceux attendus pour les hauteurs de barrières et pour l'isomère. On obtient des résultats comparables à ceux donnés par Sly5s1 et Sly7.

Malgré un effet moins prononcé que celui du centre de masse, on peut noter l'effet de

la masse effective isoscalaire sur chaque jeu d'interactions. Pour les interactions 1T2T, la valeur de $m^*/m = 0,80$ semble être optimale pour la description de ce noyau.

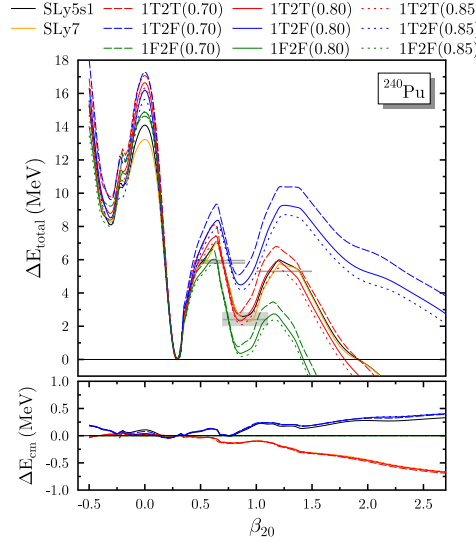


FIGURE 3.5 – Énergie de déformation du ^{240}Pu en fonction de la valeur de β_{20} comme définie dans [67] pour les paramétrisations indiquées. Les énergies sont décalées pour obtenir l'état fondamental à 0 MeV. Les barres grises indiquent les valeurs expérimentales pour l'énergie d'excitation de l'isomère de forme et pour la hauteur des barrières. La figure du bas représente la contribution de la correction du centre de masse à l'énergie totale.

Barrière du mercure ^{180}Hg

Pour le ^{180}Hg , la structure de la barrière est bien différente de celle obtenue pour le ^{240}Pu . Cette fois, on a une barrière très large d'environ 8 MeV [69] qui s'étend jusqu'à de grandes déformations. On peut voir à basse déformation une coexistence de forme entre l'état oblate à $\beta_{20} \approx -0,2$ et l'état prolate à $\beta_{20} \approx 0,3$.

Une fois de plus, on voit que les interactions 1T2F(X) et 1F2F(X) donnent des estimations, soit bien trop grandes soit bien trop petites pour la hauteur de la barrière. Les paramétrisations 1T2T(X) donnent des résultats plus raisonnables et proches de l'expérience. À grande déformation, nous obtenons de meilleurs résultats qu'avec SLy5s1 et aussi bons qu'avec SLy7. Pour ce qui est des petites déformations, expérimentalement l'état fondamental du mercure ^{180}Hg est mesuré comme étant oblate. Or, beaucoup d'interactions ne sont pas en mesure de reproduire cette donnée qui fût une des réussites de SLy5s1. Sur la figure 3.6, on constate qu'aucunes des interactions du type 1F2F(X) ne sont en mesure de reproduire la déformation mesuré pour l'état fondamental. Ceci s'explique certainement (mais pas seulement) par une valeur de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ trop petite. Malgré tout, on voit aussi que SLy7 avec $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}} = 18,0$ MeV prédit plutôt un minimum prolate.

Pour cette barrière, on voit une différence notable entre la nouvelle série de paramétrisations 1T2T(X) et SLy5s1 ou SLy7. Les paramétrisations 1T2T(X) sont non seulement capables de donner, comme SLy5s1, une déformation oblate pour l'état fondamental du ^{180}Hg , mais également de donner une hauteur de barrière plus proche de l'expérience.

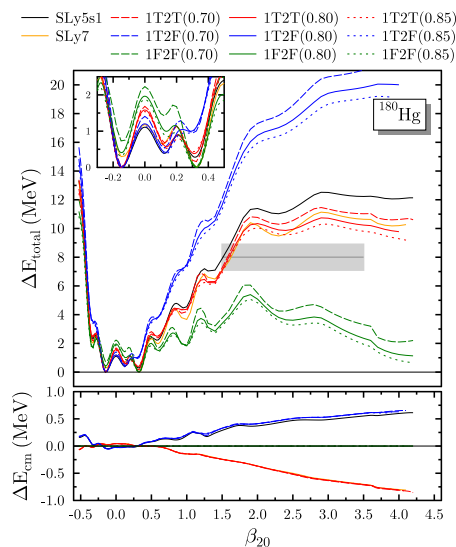


FIGURE 3.6 – Barrière de fission du ^{180}Hg . Estimation de la hauteur de la barrière indiquée par la zone grise horizontale. La courbe d'énergie s'arrête là où le calcul donne une solution avec deux fragments quand la déformation devient trop grande. La figure dubas représente la contribution de la correction du centre de masse à l'énergie totale.

3.2.2 Déformation octupolaire β_{30} dans le ^{226}Ra

Pour finir, nous avons exploré, et représenté sur la figure 3.7, l'énergie de déformation du ^{226}Ra en fonction de la déformation axiale octupolaire β_{30} . Le décalage entre les minima prédits par chaque paramétrisation semble une fois de plus être impacté par la valeur du coefficient d'énergie de surface. Une valeur plus grande de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ semble entraîner une diminution de la déformation octupolaire. Néanmoins, ce paramètre ne peut à lui seul expliquer ce que l'on observe. Les paramétrisations SLy5s1 et SLy7 ont une valeur de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ similaire aux paramétrisations 1T2T(X) et prédisent une valeur de β_{30} bien plus petite. On voit aussi que l'interaction 1T2T(0.85) se rapproche plus des 1T2F(X).

3.2.3 Énergies de liaisons

Comme nous avons pu le discuter auparavant, l'amélioration des capacités prédictives concernant les propriétés de déformation qui a pu être obtenue avec SLy5s1 par rapport à SLy5 s'est faite au détriment de la reproduction des énergies de liaison. Les résultats

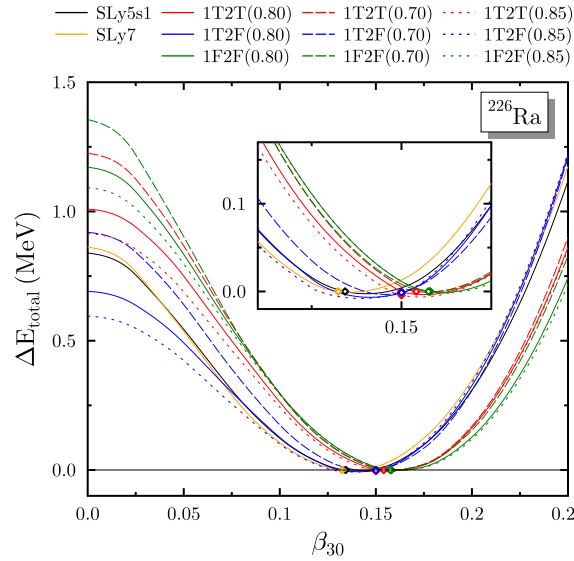


FIGURE 3.7 – Énergie de déformation du ^{226}Ra en fonction de β_{30} . Les losanges indiquent l'état de plus basse énergie.

discutés jusqu'à maintenant semblent montrer que les paramétrisations 1T2T(X) donnent de meilleurs résultats que SLy5s1 pour l'étude des barrières de fissions. Il est donc maintenant intéressant de voir si ces résultats ont pu être obtenus sans compromettre leur pouvoir prédictif concernant les énergies de liaison.

Énergies de liaison de noyaux sphériques

Pour faire cette comparaison, nous avons utilisé une liste de 214 noyaux supposés sphériques (ou presque sphériques) et pour lesquelles l'énergie de liaison est soit connue soit extrapolée de l'expérience (voir [70]). Les résultats sont présentés sur la figure 3.8. La valeur moyenne (mean) et la déviation standard (rms) sont aussi indiquées sur la figure.

Le panneau du haut nous montre qu'une augmentation de la masse effective nous permet d'obtenir un meilleur accord avec les valeurs expérimentales. De plus, si nous regardons le panneau du bas, nous voyons que sans la correction du centre de masse à un et deux corps, les prédictions sur les énergies semblent aussi s'améliorer à masse effective égale. L'interaction 1T2F(0.80) donne une valeur moyenne meilleure que 1T2T(0.80), mais une déviation plus grande. D'après les résultats obtenus jusqu'à présent dans cette étude, il semble donc être plus satisfaisant de prendre en compte les deux termes pour la correction du mouvement du centre de masse (interactions du type 1T2T) ou de n'en prendre aucun en compte (interactions du type 1F2F). Le choix fait le plus couramment et qui consiste à ne prendre en compte que le terme à un corps (interactions du type 1T2F) semble être le moins satisfaisant.



FIGURE 3.8 – Résidus des énergies de liaison pour un ensemble de 214 noyaux sphériques ou quasi-sphériques.

Énergies de liaison de noyaux déformés

Dans cette partie, nous allons nous intéresser aux séries isotopiques de différents actinides (Cm, Pu, U) et du mercure (Hg).

Pour les actinides (figures. 3.9), les nouvelles paramétrisations ont tendance à sous-estimer l'énergie de liaison d'environ 10 MeV dans cette région. On voit que l'augmentation de la masse effective donne de meilleurs prédictions, et il en va de même selon le traitement de la correction du mouvement du centre de masse en allant de 1T2F à 1T2T pour finir avec les paramétrisations 1F2F. Malgré des écarts relativement élevés, on constate tout de même une nette amélioration par rapport à SLy5s1 qui donne une différence d'énergie de liaison par rapport à l'expérience pour les actinides de l'ordre de 15 MeV, et pour les isotopes du mercures d'environ 10 MeV. Nous avons aussi fait cette évaluation avec SLy7, qui donne des résultats meilleurs que les nouvelles paramétrisations. En revanche, même si SLy7 semble plus prédictive pour cet ensemble de noyaux, il faut rappeler que son utilisation est limitée aux systèmes pairs par renversement du temps à cause d'instabilités de taille finie dans les canaux $S = 1$.

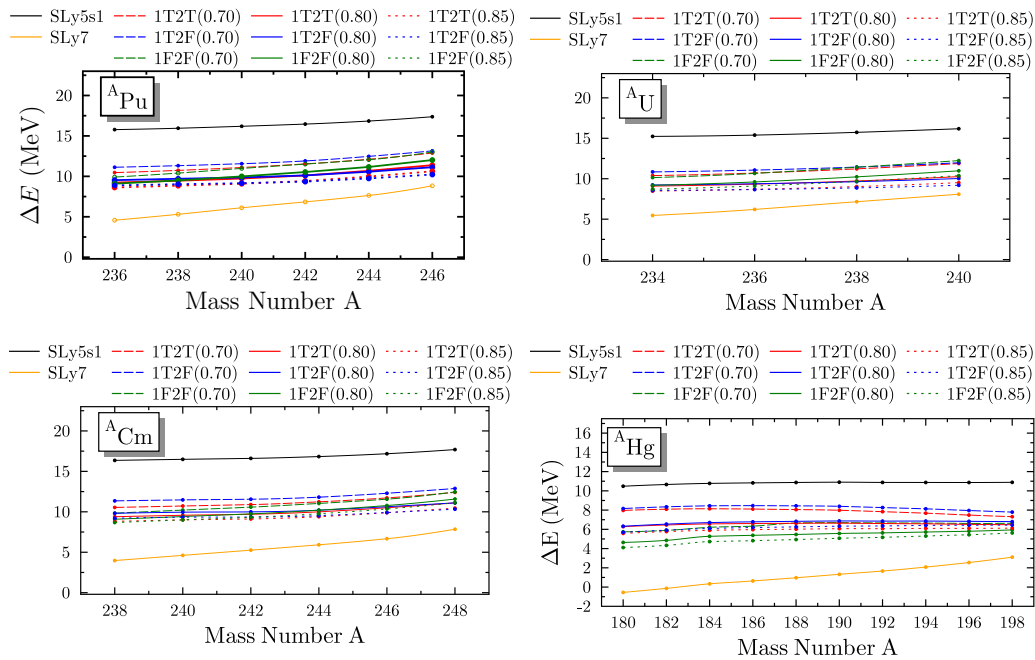


FIGURE 3.9 – Résidus des énergies de liaison pour les états fondamentaux des séries isotopiques des Pu, U, Cm, et du Hg. Les valeurs positives correspondent à des systèmes sous-liés.

3.2.4 États à déformation normale et superdéformés

Après cette étude sur les énergies de liaisons pour les noyaux sphériques et déformés, nous allons étudier les prédictions concernant plus spécifiquement la déformation.

Étude sur les actinides à déformation normale

Commençons par étudier les actinides (Cm, Pu, U) pour des petites valeurs des paramètres de déformation β_{lm} . Le premier constat assez frappant que l'on peut faire à l'aide de la figure 3.10 est qu'il n'y a presque aucune différence entre les résultats obtenus avec chaque paramétrisation. Elles permettent toutes de reproduire la déformation quadrupolaire β_{20} pour chaque noyau étudié. Les résultats sont plus contestables pour la déformation hexadécapolaire β_{40} . Les résultats pour les valeurs de β_{40} sont cependant compatibles avec les valeurs expérimentales accompagnées de leurs barres d'erreur pour les plutoniums et les uraniums et légèrement plus éloignés pour les curiums.

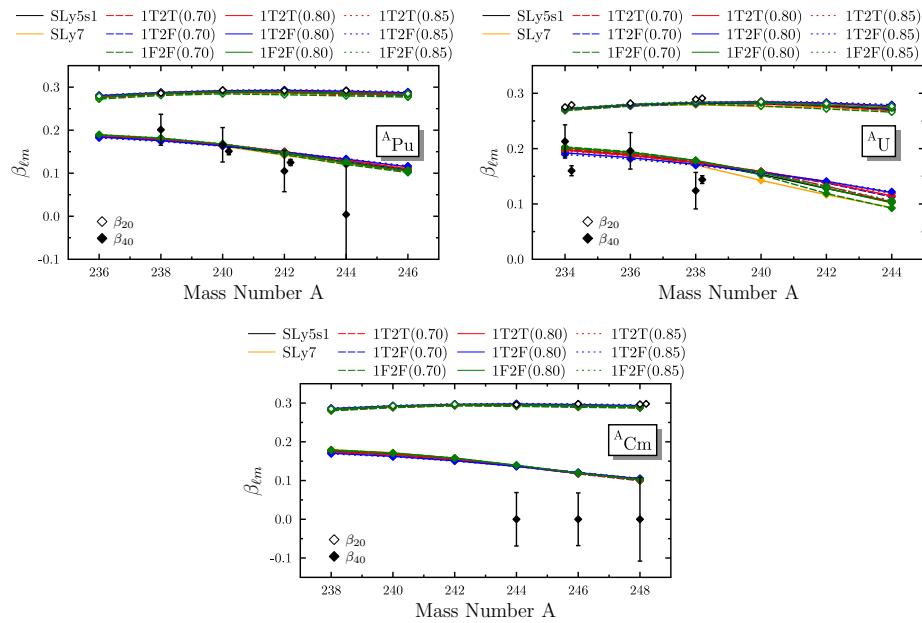


FIGURE 3.10 – Paramètres multipolaires caractérisant la déformation. Les valeurs expérimentales des β_{20} et β_{40} sont prises de [68, 71].

Étude concernant la super-déformation

Pour la partie super-déformée (SD), nous avons pris les mêmes séries isotopiques que pour l'étude sur la déformation normale tout en ajoutant les séries des plombs sur la figure 3.12.

Encore une fois, pour les états SD sur les figures 3.11 et 3.12, on voit que l'on obtient les mêmes différences de tendance entre les interactions avec des traitements du centre de masse différents que celles observées avec les barrières de fission. Les 1T2F(X) surestiment toujours les valeurs expérimentales et, à l'opposé, les 1F2F(X) vont sous-estimer les données. La prise en compte des deux termes de la correction du mouvement du centre de masse, avec les paramétrisations 1T2T(X), permet de mieux reproduire les données pour les états SD.

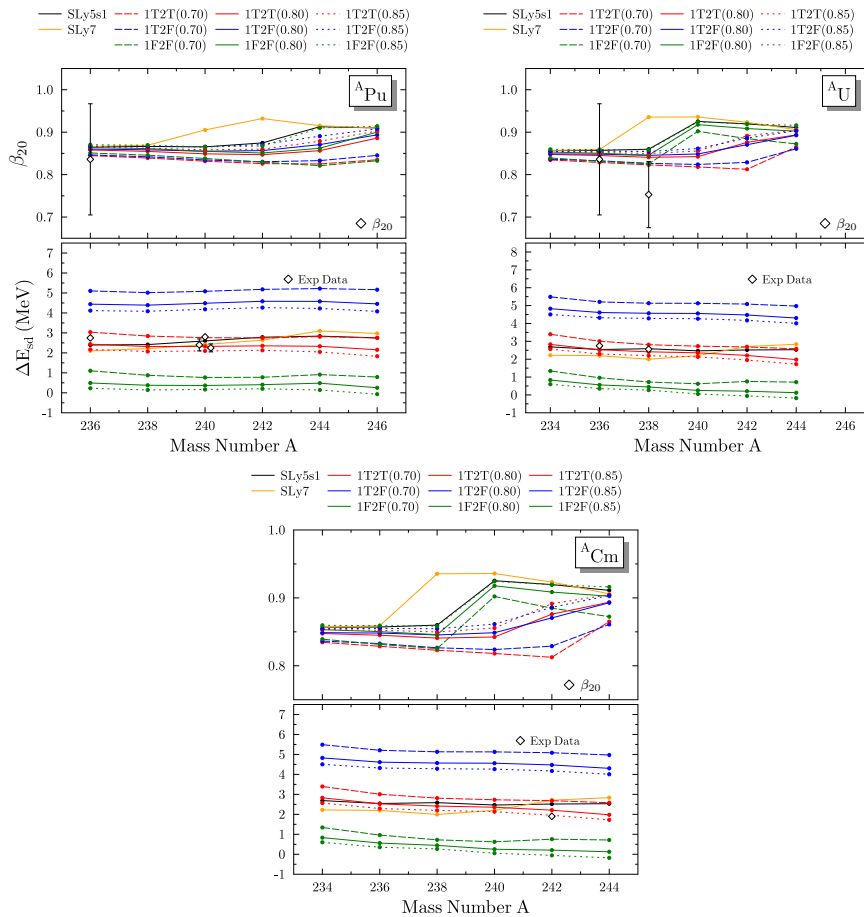


FIGURE 3.11 – Panneaux du bas : Énergie d’excitation de l’état 0^+ des isomères de fission des isotopes pairs-pairs des Pu, U et Cm. Les valeurs des énergies expérimentales sont tirées de [67, 72].

Panneaux du haut : Valeurs calculées et expérimentales de β_{20} . Voir le tableau 3 de Singh *et al.* [72] pour les déformations. Seuls les isomères identifiés comme tête de bande 0^+ sont gardés comme dans Nikolov *et al.* [67].

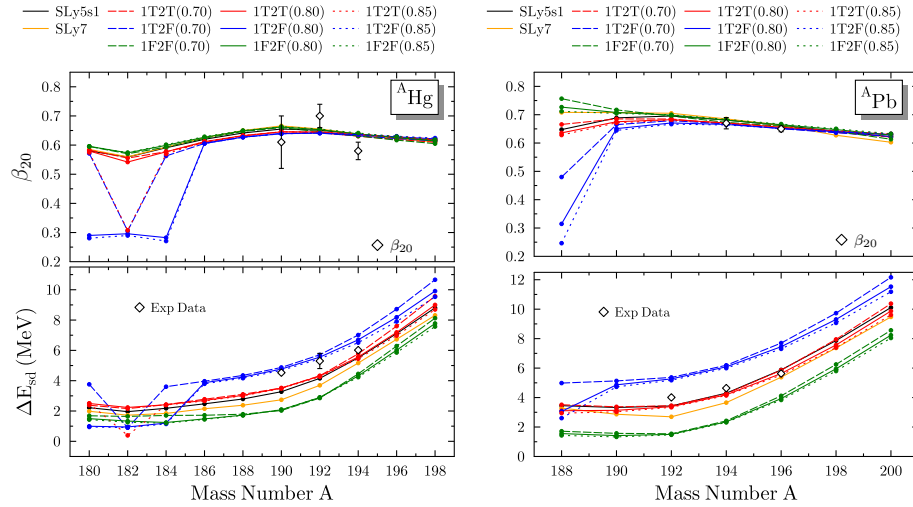


FIGURE 3.12 – Panneaux du bas : Énergie d’excitation 0^+ de la tête de bande de la bande rotationnelle de l’état superdéformé des isotopes du Hg et Pb. Panneaux du haut : Valeurs des β_{20} calculées comparées aux données expérimentales. Voir les discussions sur les tableaux III et IV de [15].

3.2.5 Étude concernant l’appariement

Oscillation des masses pairs-impairs

Le phénomène que l’on nomme « oscillation »² pairs-impairs des masses se manifeste lorsque l’on regarde la différence des énergies de liaison entre les isotopes pairs et impairs d’un élément.

Il s’avère que l’énergie de liaison d’un noyau impair est inférieure (en valeur absolue) à la moyenne arithmétique des énergies de ces deux voisins pairs. En traçant l’évolution des énergies de liaison d’une série d’isotopes, on observe donc un décalage entre les énergies de liaison des noyaux pairs et celles des noyaux impairs. On explique ce décalage par les corrélations d’appariement dans les noyaux pairs-pairs ce qui a pour conséquence une augmentation de l’énergie de liaison pour ces noyaux. On pourra se servir de cette observation pour quantifier l’appariement à l’aide d’une formule à trois points donnée par [73] :

$$\Delta_q^{(3)}(N_0) \equiv \frac{(-1)^{N_0}}{2} [E(N_0 - 1) - 2E(N_0) + E(N_0 + 1)]. \quad (3.2)$$

Nous avons donc étudié ce phénomène dans la série isotopique des mercures ${}^A\text{Hg}$, les résultats sont représentés sur la figure 3.13. Ici, nous comparons les résultats obtenus avec SLy5s1 et la série d’interactions avec des masses effectives $m_0^*/m = 0,80$ pour les trois traitements de la correction du mouvement du centre de masse sur le panneau du haut et avec les interactions avec la même correction pour le centre de masse, mais des masses effectives différentes sur le panneau du bas.

2. *staggering* en anglais.

Pour commencer, nous pouvons constater que toutes les paramétrisations ont une tendance à sous-estimer les corrélations d'appariement dans cette chaîne isotopique. Il y a aussi une diminution de la valeur de $\Delta_n^{(3)}$ pour les isotopes avec un nombre de neutrons entre 99 et 105 avec l'interaction 1F2F(0.80) (panneau du haut) et entre 99 et 103 pour l'interaction 1T2T(0.70) (panneau du bas). La raison de cette diminution n'est pas bien comprise et nécessite plus d'investigations, elle ne sera pas discutée dans ce manuscrit.

L'interaction 1T2F(0.80) donne en moyenne une valeur de $\Delta_n^{(3)}$ plus grande qu'avec les deux autres interactions et se retrouve donc plus proche des données expérimentales. Nous avons ensuite l'interaction 1T2T(0.80) et enfin 1F2F(0.80). Sur le panneau du bas, hormis pour un nombre de neutrons entre 99 et 103 c'est l'interaction 1T2T(0.70) qui reproduit au mieux les données suivie de 1T2T(0.80) puis de 1T2T(0.85). Néanmoins, SLy5s1 reste l'interaction donnant les meilleurs résultats pour l'évaluation des corrélations d'appariement pour cette série isotopique.

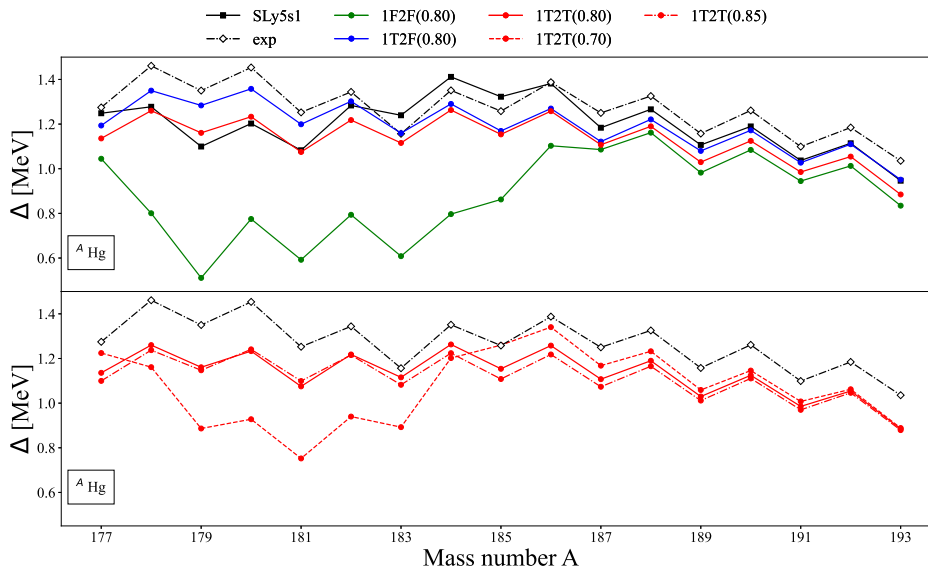


FIGURE 3.13 – Oscillations des masses pairs-impairs pour les isotopes des mercures de ^{176}Hg à ^{194}Hg avec les interactions SLy5s1, 1F2F(0.80), 1T2F(0.80), 1T2T(0.80), 1T2T(0.70), 1T2T(0.85).

Moment d'inertie et appariement

Lorsqu'un noyau présente un état non sphérique, on voit apparaître un spectre en énergie d'excitation identifiable à un système en rotation. On nommera ce type de spectre une bande rotationnelle. Les bandes rotationnelles sont un type de spectre assez caractéristiques et peuvent, en première approximation, s'expliquer à l'aide du modèle du rotor

rigide où l'énergie en fonction du moment angulaire est donnée par :

$$E(J) = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I}, \quad (3.3)$$

avec :

- $I \rightarrow$ le moment d'inertie ;
- $J \rightarrow$ le moment angulaire.

Le modèle du rotor rigide permet une bonne description qualitative des spectres, mais peine à bien reproduire les données car il a tendance à surestimer les valeurs expérimentales [22]. C'est avec un modèle intégrant l'appariement proposé par Bohr et Moddelson [21] que les résultats ont pu se rapprocher des données expérimentales. Dès lors, nous savons que la superfluidité va avoir un impact sur les bandes rotationnelles. On va donc pouvoir se servir de cette information pour étudier les corrélations d'appariement.

Nous avons étudié la bande rotationnelle du ^{194}Hg qui présente un état SD à $\beta_{20} \approx 0,58 \pm 0,03$. Dans les états SD, on voit apparaître une cascade de désexcitation rendant la connaissance du moment angulaire difficile d'accès expérimentalement. On va donc étudier le moment d'inertie dynamique car il est plus simple à extraire et défini comme :

$$\mathcal{I}^{(2)} \equiv \left(\frac{d^2 E}{dJ^2} \right)^{-1} = \left(\frac{d\omega}{dJ} \right)^{-1}. \quad (3.4)$$

avec ω la fréquence de rotation donnée par :

$$\omega \equiv \frac{dE}{dJ}. \quad (3.5)$$

Pour obtenir le moment d'inertie dynamique du noyau, nous avons effectué des calculs HFB contraints dits « crankés » dans un référentiel en rotation. La structure interne du noyau en rotation de moment angulaire total J , est décrite par l'état de quasi-particules $|\psi(J)\rangle$ qui minimise la fonctionnelle.

Le principe de ce calcul consiste à prendre l'axe de symétrie du noyau comme étant l'axe dans la direction J_x puis de faire varier la valeur de la fréquence de rotation ω_z considérée comme une contrainte. Ceci se traduit par l'équation :

$$\delta \langle \psi(J) | (\hat{H} - \omega_z \hat{J}_z) | \psi(J) \rangle. \quad (3.6)$$

Pour un noyau pair-pair et avec des transitions $\Delta J = 2\hbar$, la fréquence de rotation et le moment d'inertie dynamique expérimental peuvent être extraits avec les définitions suivantes prises de [15] :

$$\hbar\omega_{\text{exp}} = \frac{1}{4} [E_\gamma(J+2 \rightarrow J) + E_\gamma(J \rightarrow J-2)], \quad (3.7)$$

et

$$\mathcal{I}_{\text{exp}}^{(2)} = \frac{4}{[E_\gamma(J+2 \rightarrow J) - E_\gamma(J \rightarrow J-2)]}. \quad (3.8)$$

Dans [15], le même calcul a été effectué et les résultats sont en très bon accord avec les données expérimentales. Ceci nous a donc motivés pour étudier cette bande pour pouvoir

faire la comparaison avec les nouvelles paramétrisations, puisque le but est d'obtenir des interactions dont les qualités prédictives soient à minima aussi bonnes que celles de SLy5s1. En regardant la figure 3.14, on constate que les résultats sont cependant décalés par rapport aux résultats expérimentaux contrairement à ce qui avait été obtenu dans [15].

Une possible explication pour cette différence pourrait être que, dans l'étude menée dans [15], les calculs ont été effectués en utilisant la méthode Lipkin-Nogami [74]. Or, dans notre cas nous ne l'avons pas utilisée. Il semblerait, pour des raisons qui ne sont pour l'instant pas totalement comprises, que sans l'utilisation de Lipkin-Nogami la description de cette bande rotationnelle ne soit que très peu satisfaisante. Une étude plus approfondie semble nécessaire pour mieux comprendre l'origine de ce désaccord.

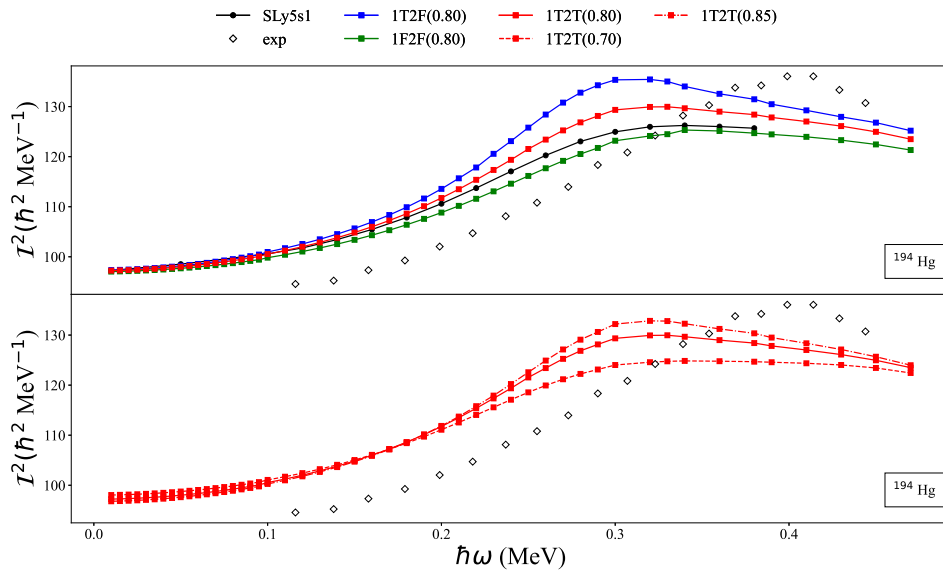


FIGURE 3.14 – Moment d'inertie dynamique en fonction de la fréquence de rotation pour la bande de l'état SD du mercure ^{194}Hg .

3.2.6 Oscillations des rayons de charges

Cette fois, nous allons nous intéresser à l'oscillation des rayons de charges toujours pour la chaîne isotopique des mercures ^AHg . On définira le décalage isotopique $\delta\langle r^2 \rangle$ comme la différence entre le rayon quadratique moyen de charge d'un noyau par rapport à un isotope de référence, qui sera ici le ^{186}Hg :

$$\delta\langle r^2 \rangle = \langle r^2 \rangle_A - \langle r^2 \rangle_{186} . \quad (3.9)$$

Cette série présente un intérêt particulier du fait de la coexistence de forme présente dans certains mercures avec trois minima très proches en énergie. De par cette coexistence de forme, le passage d'un noyau à un autre peut faire passer d'un état oblate pour l'un à un état prolata pour le suivant. Ceci va donc entraîner un changement de rayon relativement important entre des isotopes successifs et donc une amplitude d'oscillation des rayons bien

plus grande que ce que l'on observerait sans ce phénomène. Pour les mercures entre $A = 181$ et $A = 185$, on va donc avoir des états fondamentaux oblates pour les isotopes pairs et prolates pour les impairs. Ce phénomène a été étudié dans l'article de Sels *et al* [41] et les données expérimentales pour les noyaux de mercure ^{181}Hg à ^{185}Hg viennent de cet article.

Sur la figure 3.15, on voit que SLy5s1 prédit bel et bien cet effet, mais avec un décalage vers les noyaux plus légers. On a donc le ^{179}Hg qui est prolata au lieu d'être oblate et inversement le ^{185}Hg est oblate au lieu d'être prolata. Avec l'interaction 1T2T(0.80), contrairement à SLy5s1, on obtient bien un état oblate pour le ^{179}Hg , mais nous n'obtenons pas des états prolates pour les mercures ^{183}Hg et ^{185}Hg . Pour l'interaction 1T2F(0.80), ce phénomène de forte augmentation de l'amplitude du *staggering* n'apparaît pas car tous les noyaux sont prédits comme étant oblates. La paramétrisation 1F2F(0.80) prédit seulement des noyaux prolates pour les mercures ^{179}Hg et ^{185}Hg . Enfin, l'interaction 1T2T(0.70) donne des résultats similaires à SLy5s1. La figure 3.16 permet aussi une visualisation de ce résultat, mais en regardant plutôt les différences d'énergie entre les états faiblement ou fortement prolates et l'état oblate prédit par chaque interaction pour chaque isotope. Une valeur négative de cette différence correspond à un état prolata. On peut donc, à l'aide de cette figure, prédire l'oscillation des rayons de charges due au changement de forme.

L'oscillation des rayons dépend de la forme des noyaux et donc des propriétés de surface. On peut constater encore une fois qu'une valeur de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ trop petite donne des noyaux principalement prolates (1F2F) et, à contrario, une valeur trop grande seulement des noyaux oblates (1T2F).

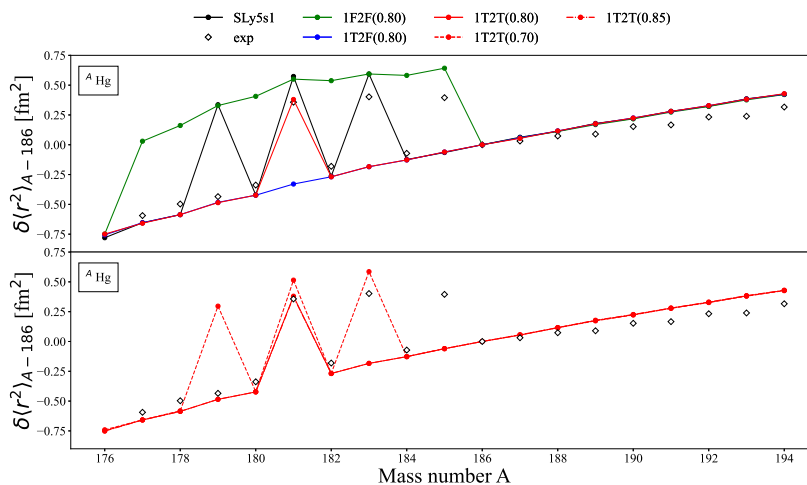


FIGURE 3.15 – Décalage isotopique des rayons de charges pour les interactions SLy5s1, 1F2F(0.80), 1T2F(0.80), 1T2T(0.80), 1T2T(0.70), 1T2T(0.85) dans les mercures $^{176,194}\text{Hg}$.

Avant de conclure sur cette partie, il est important de noter qu'aucune des interactions présentées ici ne reproduit l'oscillation des rayons avec le bon signe à partir du ^{187}Hg .

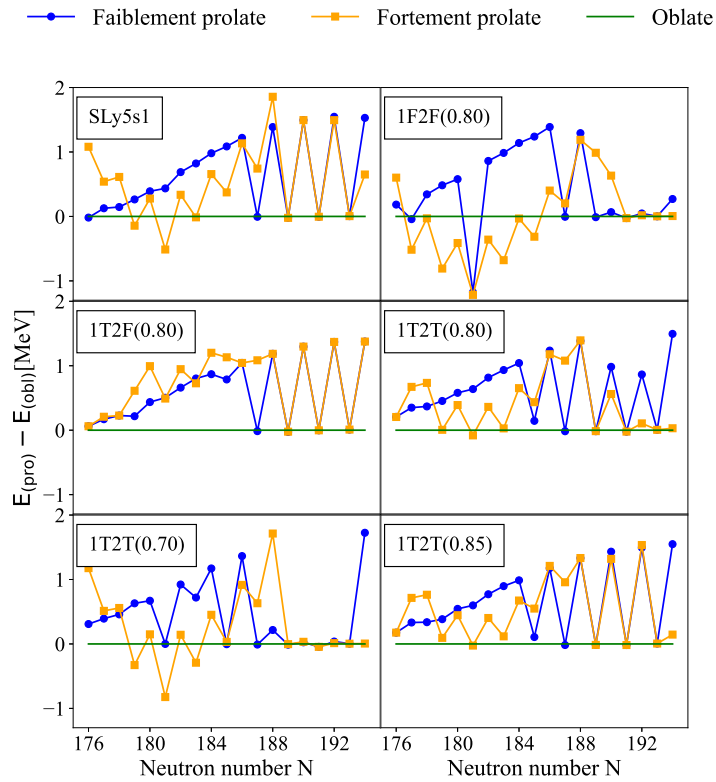


FIGURE 3.16 – Différence d'énergie entre les états fortement prolates et oblates en orange et faiblement prolates et oblates en bleu, toujours pour les interactions SLy5s1, 1F2F(0.80), 1T2F(0.80), 1T2T(0.80), 1T2T(0.70), 1T2T(0.85).

Conclusion

Dans cette partie de la thèse, nous avons prolongé le travail entamé par R. Jodon *et al.* [40] pour la mise en œuvre d'un protocole visant à décrire de manière simple les propriétés des noyaux liées à leur déformation. Il a été montré, dans la thèse de R. Jodon, qu'une bonne description des barrières de fission pouvait se faire à l'aide d'un protocole d'ajustement simple n'impliquant que de contraindre la valeur du coefficient de l'énergie de surface a_{surf} (pouvant être calculé à l'approximation MTF) au lieu de passer par des calculs plus complexes comme cela a été fait avec l'interaction SKM* [75]. Ces travaux ont débouché sur l'ajustement de l'interaction SLy5s1 qui est un succès pour la description des déformations des noyaux [15], mais qui peine à reproduire leurs énergies de liaison avec une précision suffisante.

En nous inspirant des travaux de M. Bender *et al.* [49] qui a montré que le terme à deux corps de la correction du mouvement du centre de masse était lié au coefficient d'énergie de surface a_{surf} nous avons décidé d'ajuster une nouvelle série d'interactions en considérant différents traitements possibles pour cette correction.

Au cours de cette thèse, nous avons redéfini le protocole d'ajustement en élargissant l'intervalle de recherche pour a_{surf} . Nous avons exploré les différentes conséquences qu'implique l'ajout partiel ou total de la correction du mouvement du centre de masse et testé plusieurs valeurs pour la masse effective m^*/m .

À la suite de ces ajustements, nous avons pu conclure que le simple fait de prendre en compte les deux termes de la correction du mouvement du centre de masse toute la correction permettait, sans contrainte sur a_{surf} , d'obtenir une valeur pour a_{surf} proche de celle attendue et, surtout, une bonne description des barrières de fission. On a aussi pu constater que les interactions 1T2F(X) en donnaient une valeur trop grande et à l'inverse les interactions 1F2F(X) une valeur trop petite. En explorant différents résultats sur la déformation nous avons pu constater que les paramétrisations 1T2T(X) et particulièrement 1T2T(0.80) permettaient de reproduire aussi bien, voire mieux que SLy5s1, l'ensemble des systèmes que nous avons considérés.

Un point clef de cette étude était d'obtenir de meilleures prédictions sur les énergies de liaison. Les paramétrisations 1T2T(X) ont permis de réussir à mieux reproduire ces observables. Les résultats ont été comparés avec ceux obtenus avec SLy7. Cette dernière interaction donne de meilleurs résultats sur ce point. Néanmoins, il faut rappeler le fait

que SLy7 n'est utilisable que pour des systèmes pairs par renversement du temps en raison d'instabilités de tailles finies dans les canaux $S = 1$. Or, les paramétrisations mise au point au cours de ce travail sont toutes stables dans les différents canaux (S, T) et sont donc utilisables pour tout type de calcul à l'approximation du champ moyen. La paramétrisation qui a donnée les meilleurs résultats est la 1T2T(0.80) que l'on nommera désormais SLy7s1.

Troisième partie
Interaction de Gogny D2

Interactions & fonctionnelles de Gogny

DANS la seconde partie de ce manuscrit, nous allons passer à l'étude des interactions de portée finie et plus particulièrement l'interaction de Gogny [66, 76] et ses différentes paramétrisations. Le but est d'étudier la paramétrisation D2 pour laquelle le terme dépendant de la densité a été modifié pour passer d'une portée nulle à une portée finie [77]. Ensuite, nous regarderons les implications de cette modification en faisant une étude comparative entre D2 et un ensemble de paramétrisations de Gogny. Nous allons surtout considérer la stabilité de ces paramétrisations et étudier s'il existe une corrélation avec les résultats concernant les densités de charge et les densités isovectorielles.

De plus, notre intérêt pour D2 vient du fait que le terme de portée finie dépendant de la densité donne, dans la fonctionnelle, des contributions ayant une structure très similaires à ceux obtenus avec une interaction à trois corps semi-régularisée. Cette dernière nous servira donc d'interaction test avant de passer à l'implémentation numérique de la nouvelle interaction qui fera l'objet de la dernière partie.

Contents

5.1	Interaction standard de Gogny	57
5.2	Évolution de la dépendance en densité. Vers une portée finie	59
5.3	Résultats	61
5.3.1	Étude des densités avec les interactions de Gogny	61
5.3.2	Gouttelettes de neutrons	70
5.3.3	Conclusion concernant l'interaction D2	74

5.1 Interaction standard de Gogny

Comme l'interaction de Skyrme, celle de Gogny est une interaction effective utilisée à l'approximation du champ moyen (et au-delà). La différence entre ces deux interactions

vient de la portée utilisée pour modéliser l'interaction nucléaire effective. Pour les interactions de Skyrme, comme précisé dans le chapitre 2, équation (2.1), un delta de Dirac est utilisé, ce qui donne une interaction de contact non-locale, mais conduit à un champ moyen local. Pour les interactions de Gogny, on utilise explicitement une portée avec deux gaussiennes comme facteurs de forme, ce qui donnera un champ moyen non-local. De plus, pour les mêmes raisons que dans le cas d'une interaction de type Skyrme, un terme dépendant de la densité a été rajouté. La forme usuelle de l'interaction de Gogny s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
 \hat{V}_{\text{Gogny}}(x_1, x_2; x_3, x_4) &= \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4) \\
 &\times \left[\sum_{j=1,2} e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{\mu_j^2}} \left\{ W_j \hat{1}_\sigma \hat{1}_\tau + B_j \hat{P}_\sigma \hat{1}_\tau - H_j \hat{1}_\sigma \hat{P}_\tau - M_j \hat{P}_\sigma \hat{P}_\tau \right\} \right. \\
 &+ t_0 \left(\hat{1}_{12} + x_0 \hat{P}_{12}^\sigma \right) \rho_0^\alpha(\mathbf{R}) \delta_{12}^{\mathbf{r}} \\
 &\left. + iW_0 (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{13} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{24} \delta_{\sigma_1 \sigma_3}) \cdot (\hat{\mathbf{k}}_{12}^* \times \hat{\mathbf{k}}_{34}) \right]. \quad (5.1)
 \end{aligned}$$

Les notations dans cette équation sont les mêmes que celles utilisées dans la première partie de ce manuscrit (2). Cette fois il y aura 13 paramètres à ajuster ($W_{1,2}$, $B_{1,2}$, $H_{1,2}$, $M_{1,2}$, $\mu_{1,2}$, t_0 , α , W_0 , le paramètre α étant en général constant et égal à 1/3). Il existe beaucoup moins de paramétrisations pour les interactions de Gogny que pour celles de Skyrme. Les paramétrisations D1 et D1' sont les premières mises au point par J. Dechargé et D. Gogny [78]. La paramétrisation D1S [79], qui vise à une amélioration des prédictions sur les propriétés de surface des noyaux, est aujourd'hui la plus utilisée. On peut également citer D1N [80] qui a pour but une meilleure description des systèmes présentant une forte asymétrie entre neutrons et protons, mais cette paramétrisation conduit à des instabilités de taille finie si elle est utilisée dans un programme traitant les équations HFB en représentation position [81]. Plus récemment, la paramétrisation D1M [82] a été ajustée avec l'intention de mieux reproduire les énergies de liaison des noyaux. Comme D1M est en mesure de faire de bonnes prédictions concernant les masses mais donne cependant une valeur assez basse de la pente de l'énergie de symétrie (avec $L \simeq 24,8$ MeV), une nouvelle paramétrisation, D1M* [83], fut construite à partir d'elle avec pour but d'augmenter ce paramètre qui, même s'il est toujours relativement mal connu, semble être environ égal à $L = 70 \pm 20$ MeV [34, 84, 85]. La majorité des paramétrisations de Gogny en donne une valeur bien inférieure comme on peut le voir dans le tableau 5.1.

À cause de la valeur de L trop petite, aucune paramétrisation de Gogny (à part D1M*) n'est en mesure de reproduire la valeur maximale observée d'environ deux masses solaires pour les étoiles à neutrons. La paramétrisation D1M* a donc pour but une augmentation de L pour une utilisation tournée vers l'astrophysique tout en essayant de conserver les bonnes propriétés de D1M.

Dans la suite de ce manuscrit, nous allons comparer D2 avec l'ensemble de ces paramétrisations.

5.2 Évolution de la dépendance en densité. Vers une portée finie

Presque tous les termes de l'interaction de Gogny contiennent une portée, hormis le terme dépendant de la densité et le terme spin-orbite. Il semble à priori plus « naturel » de vouloir que ces deux termes soient eux aussi de portée finie [86]. Dans sa thèse F. Chappert a proposé une modification du terme dépendant de la densité dans le but de lui mettre une portée. Cette évolution est aussi motivée par le fait qu'une dépendance en densité avec une portée nulle comme prise jusqu'à maintenant ne peut être active dans les canaux $(S, T) = (0, 0)$ et $(1, 1)$ (voir partie III.1 de la référence [87]). Dans les interactions traditionnelles de Gogny, le paramètre x_0 vaut 1 pour éviter une contribution dans le canal d'appariement qui engendrerait des divergences si aucun cut-off n'était appliqué. Cette modification permet donc de pouvoir agir dans chacun de ces canaux et en plus d'avoir quatre paramètres supplémentaires à ajuster (W_3, B_3, H_3, M_3 et μ_3 au lieu de t_3) et, par conséquent, d'avoir une plus grande souplesse de la fonctionnelle. Le terme dépendant de la densité est choisi de la forme suivante :

$$\hat{V}_{DD}(x_1, x_2; x_3, x_4) = \frac{\rho^\alpha(\mathbf{r}_1) + \rho^\alpha(\mathbf{r}_2)}{2} \frac{e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(a_3 \sqrt{\pi})^3} \times \left[W_3 \hat{1}_\sigma \hat{1}_\tau + B_3 \hat{\mathbb{P}}_\sigma \hat{1}_\tau - H_3 \hat{1}_\sigma \hat{\mathbb{P}}_\tau - M_3 \hat{\mathbb{P}}_\sigma \hat{\mathbb{P}}_\tau \right], \quad (5.2)$$

ce qui donne la nouvelle interaction ci-dessous :

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{Gogny}}(x_1, x_2; x_3, x_4) &= \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4) \\ &\times \left\{ \sum_{j=1,2} e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{\mu_j^2}} \left[W_j \hat{1}_\sigma \hat{1}_\tau + B_j \hat{\mathbb{P}}_\sigma \hat{1}_\tau - H_j \hat{1}_\sigma \hat{\mathbb{P}}_\tau - M_j \hat{\mathbb{P}}_\sigma \hat{\mathbb{P}}_\tau \right] \right. \\ &+ \frac{e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{a_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \frac{\rho^\alpha(r_1) + \rho^\alpha(r_2)}{2} \left[W_3 \hat{1}_\sigma \hat{1}_\tau + B_3 \hat{\mathbb{P}}_\sigma \hat{1}_\tau - H_3 \hat{1}_\sigma \hat{\mathbb{P}}_\tau - M_3 \hat{\mathbb{P}}_\sigma \hat{\mathbb{P}}_\tau \right] \\ &\left. + i W_0 (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{13} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{24} \delta_{\sigma_1 \sigma_3}) \cdot (\hat{\mathbf{k}}_{12}^* \times \hat{\mathbf{k}}_{34}) \right\}. \quad (5.3) \end{aligned}$$

Avant de passer à une étude concernant les systèmes finis, nous avons exposé dans le tableau 5.1 certaines observables caractéristiques de la matière nucléaire infinie pour plusieurs paramétrisations de Gogny qui seront utilisées à titre de comparaison dans la suite de ce chapitre.

Dans ce tableau, on observe que D1 et D1S donnent une masse effective plus petite que les autres paramétrisations. Pour ce qui est du module d'incompressibilité, cette fois D2 et D1S donnent une valeur plus faible mais toujours dans un intervalle de valeurs acceptables. La grande différence est surtout observée pour la pente de l'énergie de symétrie L bien plus élevée avec D2 que pour les anciennes paramétrisations sans pour autant que cette observable ne soit contrainte comme c'est le cas pour D1M*.

Nous allons donc voir dans la partie suivante quelques résultats et dans quelle mesure cette modification de la dépendance en densité permet de meilleures prédictions.

Matière nucléaire infinie						
	ρ_{sat} [fm ⁻³]	E/A [MeV]	m^*/m	K_∞ [MeV]	J [MeV]	L [MeV]
D1	0,166	-16,303	0,670	229,353	30,697	18,365
D2	0,163	-15,995	0,738	209,251	31,110	44,831
D1S	0,163	-16,007	0,697	202,841	31,125	22,441
D1N	0,161	-15,955	0,748	225,537	29,585	33,553
D1M	0,165	-16,023	0,746	224,965	28,552	24,834
D1M*	0,165	-16,061	0,746	225,401	30,249	43,177
Est.	$0,160 \pm 0,002$	$-16,0 \pm 0,2$	0,70 à 0,80	210 ± 20	30 ± 2	70 ± 20

TABLE 5.1 – Grandeurs caractéristiques des paramétrisations de l’interaction de Gogny dans la matière nucléaire infinie. Les estimations (sur la dernière ligne) proviennent de [51] et de [34, 84, 85].

5.3 Résultats

Nous allons maintenant présenter l'ensemble des résultats que nous avons obtenus. Nous étudierons la stabilité des différentes paramétrisations via les résultats obtenus avec les densités de charge et les densités isovectorielles pour un ensemble de noyaux. Puis nous nous intéresserons aux systèmes totalement asymétriques que sont les gouttelettes de neutrons.

Il est bon de préciser que tous les calculs ont été effectués avec les termes à un et deux corps de la correction du mouvement du centre de masse. L'interaction coulombienne a été traitée de manière exacte en considérant les protons comme des charges ponctuelles.

5.3.1 Étude des densités avec les interactions de Gogny

Comme nous l'avons mentionné dans la première partie de ce manuscrit, il peut arriver qu'une interaction présente des instabilités de taille finie. Nous avons vu comment mettre en évidence ces instabilités à l'aide d'un calcul de réponse linéaire, mais surtout à les éviter lors de l'ajustement des paramètres d'une interaction. Tous ces procédés sont relativement simples à mettre en œuvre avec une interaction de Skyrme, car le coût numérique des calculs reste raisonnable. En revanche, tout ceci semble bien plus compliqué pour une interaction de portée finie [55, 88]. Le temps de calcul demandé pour le calcul de la réponse linéaire pour une interaction de portée finie est bien trop important pour envisager l'utilisation de cette méthode dans une procédure d'ajustement.

Il existe des critères de stabilité qui sont imposés par les paramètres de Landau, spécifiquement, on doit avoir $F_\ell^{ST} > -(2\ell + 1)$ [89] (les notations pour les paramètres de Landau sont ici celles de [87]). De ce point de vue, toutes les paramétrisations présentées ici respectent ces conditions de stabilité à la densité de saturation comme le montre le tableau 5.2 et la figure 5.1. Sur cette figure, on présente les paramètres de Landau pour $\ell = 0$, ce qui impose notamment $F_0^{ST} > -1$ pour avoir des interactions stables. Pour le canal $(S, T) = (0, 0)$, l'instabilité à faible densité est due à un effet physique appelé instabilité spinodale [90]. Dans le canal $(S, T) = (0, 1)$, on voit que seul D1M* et D2 sont stables à très haute densité, en ce qui concerne D1, D1S, et D1N, on voit que le critère $F_0^{01} > -1$ n'est plus respecté pour $\rho_0 > 0,5 \text{ fm}^{-3}$ (à une densité un peu plus élevée que pour D1S) ce qui correspond à des densités que l'on ne rencontrera pas dans les systèmes étudiés. On voit aussi des instabilités apparaître pour $(S, T) = (1, 1)$, mais cette fois avec D1S, D1M, D1N et D1M. Les interactions D1 et D2, semblent rester stables. Malgré tout, ces instabilités arrivent à des densités bien supérieures à ce que l'on attend dans un noyau. On peut donc considérer que toutes les paramétrisations présentées ici respectent les conditions de stabilité sur un intervalle de densité assez grand pour ne pas avoir à s'en inquiéter pour des calculs concernant des noyaux. Les paramètres de Landau donnent donc des conditions nécessaires, mais non suffisantes pour inférer sur l'éventuel caractère pathologique d'une paramétrisation dans les noyaux.

Il est aussi possible de faire une analyse post-ajustement comme cela a été fait dans la référence [55] à l'aide de la RPA. Dans cet article, les auteurs ont montré que les densités critiques auxquelles apparaissent les instabilités dans le canal scalaire-isovectoriel $(S, T) = (0, 1)$ sont plus proches de la saturation avec D1N, suivie de D1M puis D1S et enfin

Paramètres de Landau pour $\ell = 0$ ($F_0^{ST} > -1$)				
	F_0^{00}	F_0^{01}	F_0^{10}	F_0^{11}
D1	-0,323 316	0,630 232	0,466 278	0,602 136
D2	-0,308 987	0,849 242	0,197 302	0,961 978
D1S	-0,369 032	0,742 754	0,466 101	0,631 028
D1N	-0,241 161	0,791 719	0,761 175	0,374 916
D1M	-0,255 411	0,701 047	-0,013 155	0,710 549
D1M*	-0,254 950	0,799 738	0,085 885	0,644 516
Paramètres de Landau pour $\ell = 1$ ($F_1^{ST} > -3$)				
	F_1^{00}	F_1^{01}	F_1^{10}	F_1^{11}
D1	-0,990 749	0,570 066	0,062 797	0,342 345
D2	-0,784 699	0,696 080	0,069 482	0,639 014
D1S	-0,908 860	0,470 433	-0,184 390	0,610 333
D1N	-0,757 267	-0,054 990	-0,596 704	0,937 428
D1M	-0,761 932	0,378 172	-0,379 783	0,651 448
D1M*	-0,762 386	0,093 300	-0,665 569	0,842 451
Paramètres de Landau pour $\ell = 2$ ($F_2^{ST} > -5$)				
	F_2^{00}	F_2^{01}	F_2^{10}	F_2^{11}
D1	-0,333 578	0,138 198	0,124 164	0,076 248
D2	-0,828 976	0,557 270	0,285 508	-0,032 018
D1S	-0,557 772	0,342 395	0,244 971	-0,037 692
D1N	-0,283 462	0,324 104	0,468 623	-0,140 733
D1M	-0,302 014	0,632 497	0,483 422	-0,243 453
D1M*	-0,302 634	0,777 505	0,628 095	-0,339 726

TABLE 5.2 – Paramètres de Landau (pour $\ell = 0, 1$ et 2) pour les paramétrisations utilisées.

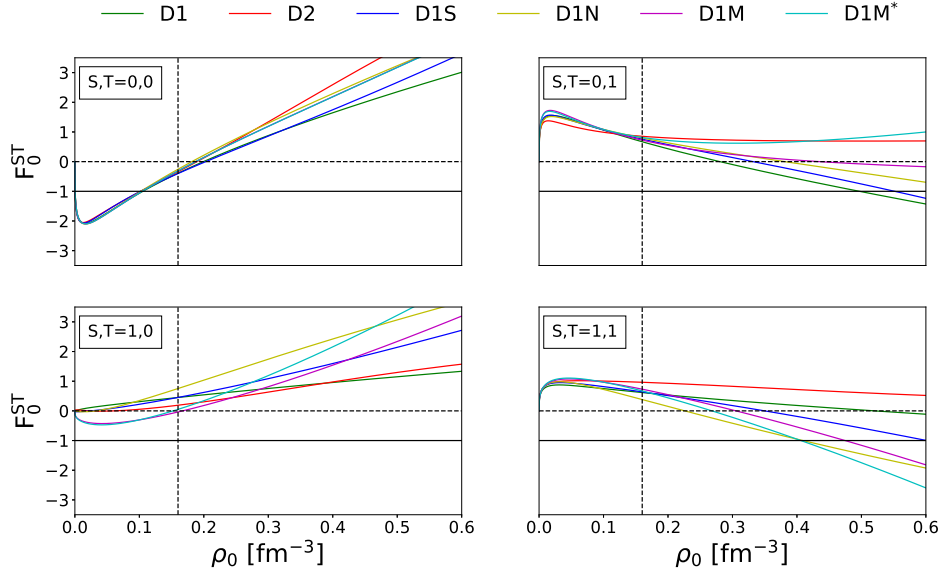


FIGURE 5.1 – Paramètres de Landau pour $\ell = 0$ dans les quatre canaux (S, T) en fonction de la densité ρ_0 pour les interactions D1, D1S, D1N et D1M. Le trait pointillé vertical représente la position de la densité de saturation empirique $\rho_{\text{sat}} = 0,16 \text{ fm}^{-3}$.

D1 comme on peut le voir sur la figure 5.2 sur laquelle ont été représentées les densités auxquelles apparaissent des pôles dans la fonction réponse dans le plan (q, ρ_0) (q étant le moment transféré entre une particule et un trou et ρ_0 la densité de la matière nucléaire infinie symétrique).

Dans la partie suivante, nous allons donc étudier les distributions des densités de charge et des densités isovectorielles pour un certain nombre de noyaux avec les paramétrisations D1, D1S, D1N, D1M, D1M* et D2 afin de voir si l'on observe aussi une corrélation entre l'apparition des pôles dans la fonction de réponse RPA à certaines densités et les instabilités dans les noyaux.

Nous avons choisi 9 noyaux représentant un ensemble de masses assez variées ainsi qu'une grande diversité vis-à-vis des moments orbitaux des couches voisines du niveau de Fermi. Les noyaux sont soit simplement soit doublement magiques. Nous avons aussi pris des noyaux saturés ou non en spin. La liste des noyaux considérés est donnée dans le tableau 5.3.

Il n'existe pas de données expérimentales pour les profils de densité de charge (ou de neutrons) pour chacun de ces noyaux mais, quand cela a été possible, nous avons comparé les densités de charge avec les valeurs expérimentales tirées de [91]. Dans ces cas, nous avons représenté sur chaque figure la déviation par rapport à l'expérience pour chaque paramétrisation. Cette déviation est définie par :

$$\Delta\rho_{\text{ch}} = \sqrt{\int dr 4\pi r^2 \left(\rho_{\text{ch}}^{\text{calc}}(r) - \rho_{\text{ch}}^{\text{exp}}(r) \right)^2}. \quad (5.4)$$

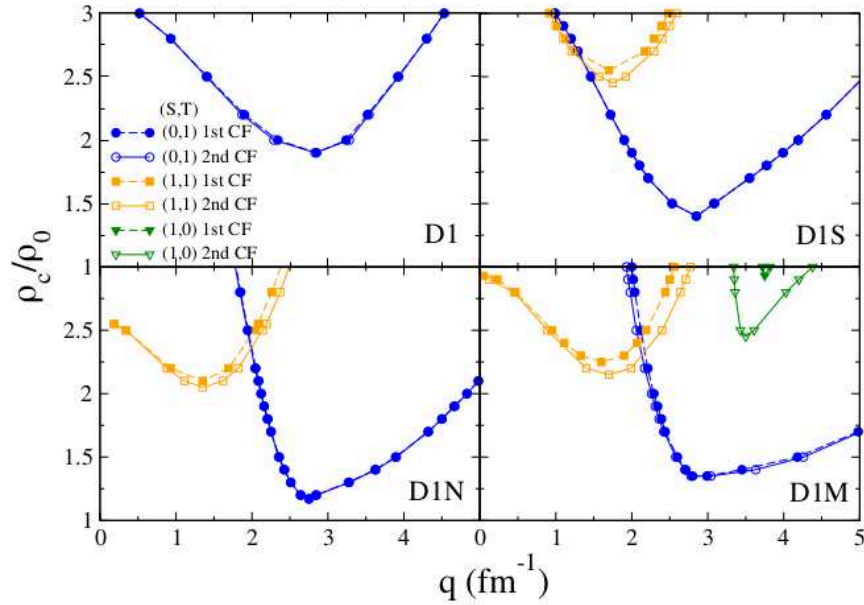


FIGURE 5.2 – Densité critique ρ_c divisée par la densité de saturation $\rho_{\text{sat}} = 0,16 \text{ fm}^{-3}$ (notée ρ_0 sur cette figure) en fonction du moment transféré q (en fm^{-1}) pour D1, D1S, D1N et D1M. Cette figure est tirée de [55].

Noyaux étudiés				
noyau	magique pour les neutrons	magique pour les protons	saturé en spin (neutrons)	saturé en spin (protons)
^{30}Si	×	×	✓	×
^{34}Si	✓	×	✓	×
^{40}Ca	✓	✓	✓	✓
^{48}Ca	✓	✓	✓	×
^{60}Ni	×	✓	×	×
^{80}Zr	×	×	✓	✓
^{90}Zr	✓	×	×	✓
^{120}Sn	×	✓	✓	✓
^{208}Pb	✓	✓	×	×

TABLE 5.3 – Tableau contenant l'ensemble des noyaux utilisés pour cette étude. Il est indiqué s'ils sont simplement ou doublement magiques et s'ils sont saturés ou non en spin.

Noyaux doublement magiques

Nous allons commencer par regarder ce que l'on obtient avec les noyaux doublement magiques qui seront ici les calciums $^{40,48}\text{Ca}$, et le plomb ^{208}Pb .

Sur les figures 5.3, 5.4 et 5.5, on peut constater que toutes les paramétrisations, hormis D1M*, donnent des résultats qui convergent et donnent des solutions à priori physiques pour ces systèmes.

Pour le ^{208}Pb , sur la figure 5.5, on voit que D1N surestime la densité de charge au centre du noyau par rapport aux autres interactions et surtout par rapport à l'expérience (toutefois il est bon de rappeler que les des barres d'erreurs sur les valeurs expérimentales ne sont pas fournies). Les différences au centre du noyau peuvent en partie s'expliquer par la valeur de la densité de saturation qui est différente pour chaque paramétrisation (voir le tableau 5.1). Pour ce noyau, aucune paramétrisation ne semble donner une reproduction précise du profil expérimentale (même si, encore une fois, l'absence de barres d'erreur sur les données rend cette observation délicate). Par contre, en s'intéressant aux déviations par rapport aux profils de densité de charges expérimentales $\Delta\rho_{ch}$ qui sont données dans le tableau 5.4, on voit des différences plus marquées entre les paramétrisations. Pour ces trois noyaux doublement magiques, D2 semble être la paramétrisation reproduisant au mieux les données expérimentales. Nous avons ensuite D1M, D1S, D1N et enfin D1.

noyaux	I	D1	D2	D1S	D1N	D1M
^{40}Ca	0	0,0192	0,0143	0,0275	0,0193	0,0141
^{48}Ca	0,166	0,0218	0,0151	0,0286	0,0237	0,0131
^{208}Pb	0,211	0,0552	0,0343	0,0361	0,0510	0,0504
Somme		0,0962	0,0637	0,0922	0,0940	0,0776

TABLE 5.4 – Déviation à la densité de charge expérimentale $\Delta\rho_{ch}$ pour chaque paramétrisation. La somme sur les trois noyaux est mise à titre indicatif.

Nous pouvons tirer plus d'informations sur un caractère éventuellement instable en regardant la densité isovectorielle pour chaque noyau. On voit que, de manière systématique, les amplitudes de la densité isovectorielle sont extrêmement grandes pour D1N par rapport aux autres paramétrisations. Dans certains cas, l'interaction D1M donne également des amplitudes assez grandes, on a ensuite D1S et enfin D1 et D2 qui produisent des profils assez similaires. Ce qui est à mettre en avant semble être la possible corrélation entre la proximité des pôles dans la fonction de réponse présentée sur la figure 5.2 et la hiérarchie entre l'amplitude des oscillations de la densité isovectorielle dans les noyaux.

Noyaux semi-magiques

Nous allons maintenant nous intéresser aux noyaux semi-magiques ^{34}Si , ^{60}Ni , ^{90}Zr et ^{120}Sn .

Cette fois, nous observons des noyaux pour lesquels les calculs ne convergent pas pour toutes les paramétrisations (en plus de D1M*). Pour le ^{34}Si , le ^{60}Ni et le ^{120}Sn respectivement sur les figures 5.6, 5.7 et 5.9, on voit que D1N et D1M* ne conduisent pas à une

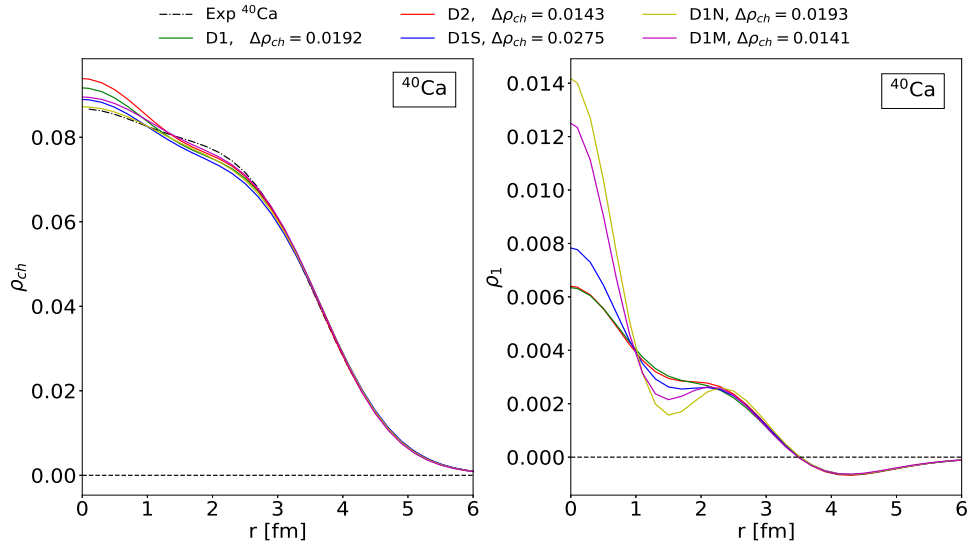


FIGURE 5.3 – Sur la figure de gauche est représenté le profil de la densité de charge pour le ^{40}Ca . La densité isovectorielle est représentée à droite.

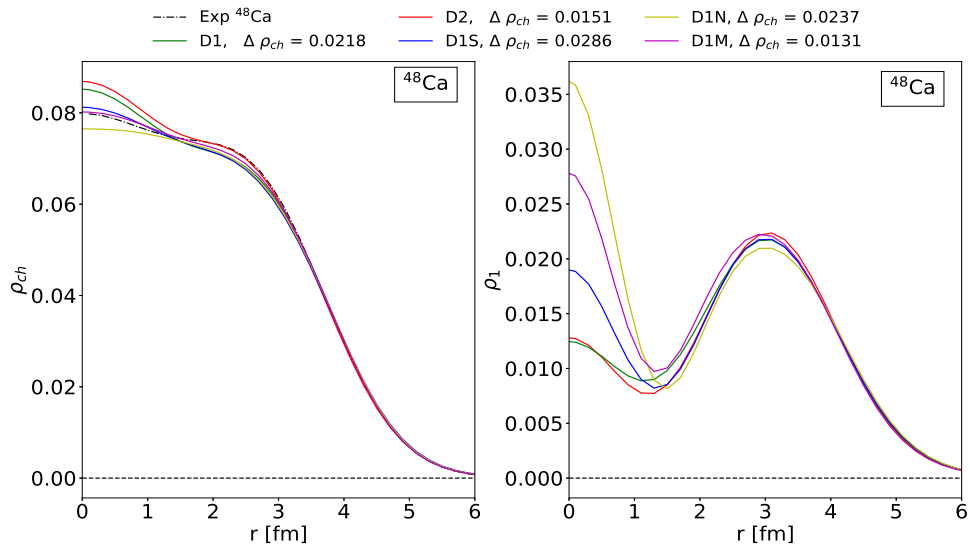


FIGURE 5.4 – Sur la figure de gauche est représenté le profil de la densité de charge pour le ^{48}Ca . La densité isovectorielle est représentée à droite.

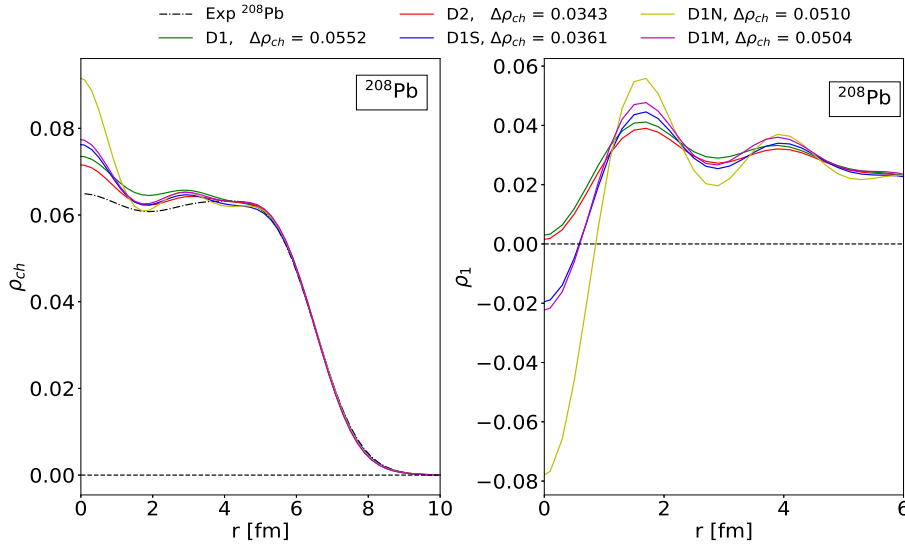


FIGURE 5.5 – Sur la figure de gauche est représenté le profil de la densité de charge pour le ^{208}Pb . La densité isovectorielle est représentée à droite.

convergence des calculs. Nous avons des valeurs expérimentales concernant les densités de charge pour seulement deux des noyaux considérés dans ce paragraphe. Les $\Delta\rho_{ch}$ sont représentés dans le tableau 5.5. Malgré des écarts pouvant paraître grands au centre du noyau par rapport à l'expérience pour certaines paramétrisations, on voit que la valeur de la déviation $\Delta\rho_{ch}$ nous informe sur les différences globales entre les prédictions de chaque paramétrisations. Néanmoins, ce chiffre seul ne peut suffire à englober toute la discussion. Par exemple, il ne prend pas en compte les oscillations des densités de charge obtenues avec chaque paramétrisation autour des valeurs expérimentales. En effet, si on ne se fie qu'à ce nombre alors D1S semble être la paramétrisation permettant la meilleure reproduction de la densité de charge du ^{60}Ni , mais si on regarde la figure on voit que cette paramétrisation présente un profil plus éloigné de l'expérience au centre que D1 ou D2. Il nous faudra donc bien ces deux informations pour juger des différentes paramétrisations.

Pour le ^{90}Zr toutes les paramétrisations convergent et on observe toujours le même schéma concernant l'amplitude de la densité ρ_1 prédite pour chaque noyau.

noyaux	I	D1	D2	D1S	D1N	D1M	D1M*
^{60}Ni	0,066	0,0387	0,0312	0,0306	NC	0,0359	NC
^{90}Zr	0,111	0,0424	0,0365	0,0312	0,0176	0,0266	0,0280

TABLE 5.5 – Déviation à la densité de charge expérimentale pour chaque paramétrisation (NC signifie « Non conservé »).

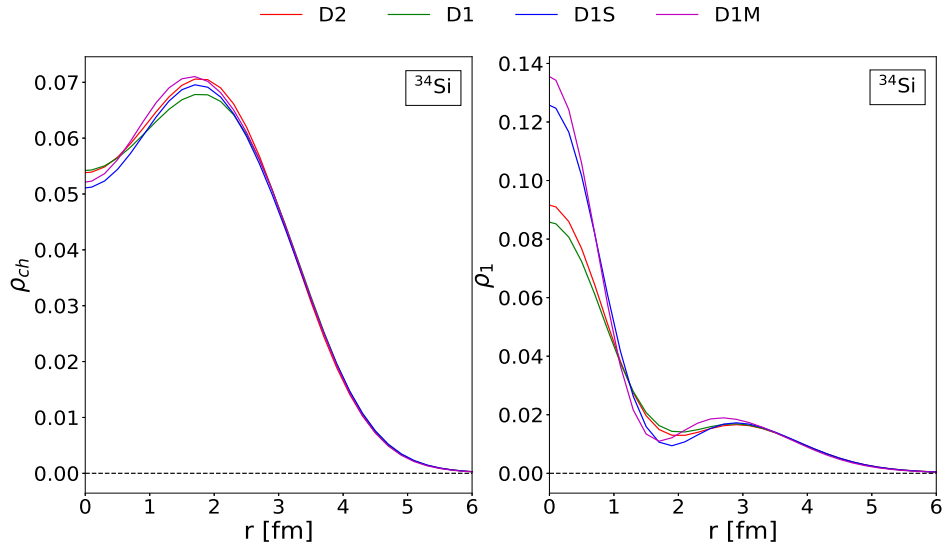


FIGURE 5.6 – Sur la figure de gauche est représenté le profil de la densité de charge pour le ^{34}Si . La densité isovectorielle est représentée à droite.

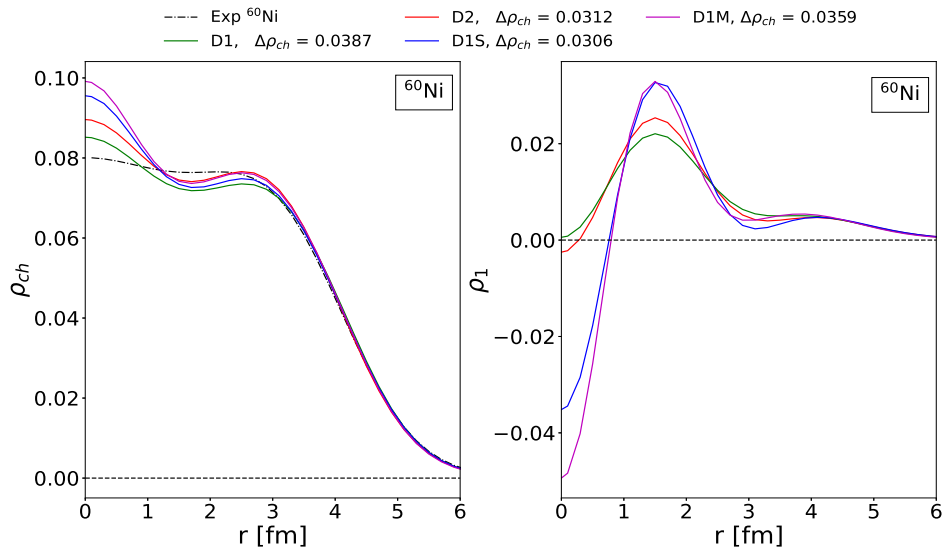


FIGURE 5.7 – Sur la figure de gauche est représenté le profil de la densité de charge pour le ^{60}Ni . La densité isovectorielle est représentée à droite.

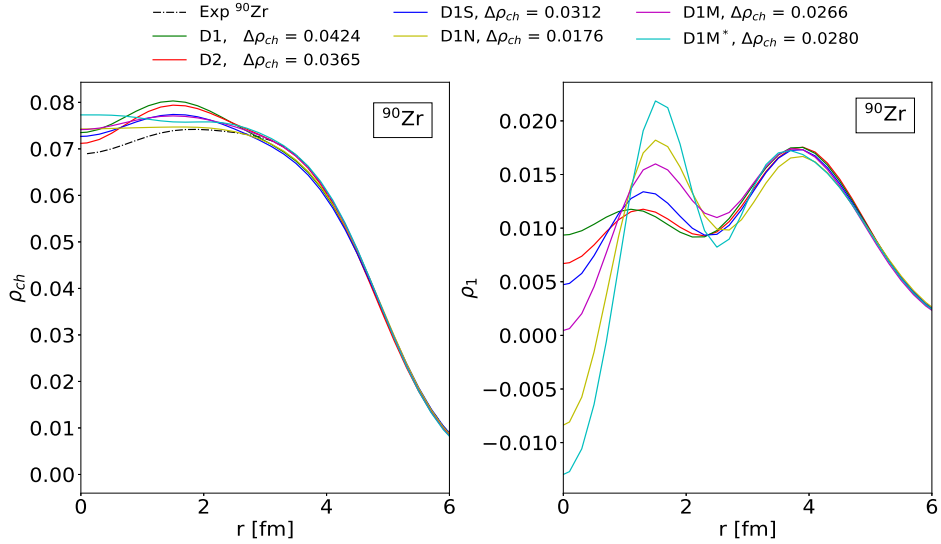


FIGURE 5.8 – Sur la figure de gauche est représenté le profil de la densité de charge pour le ^{90}Zr . La densité isovectorielle est représentée à droite.

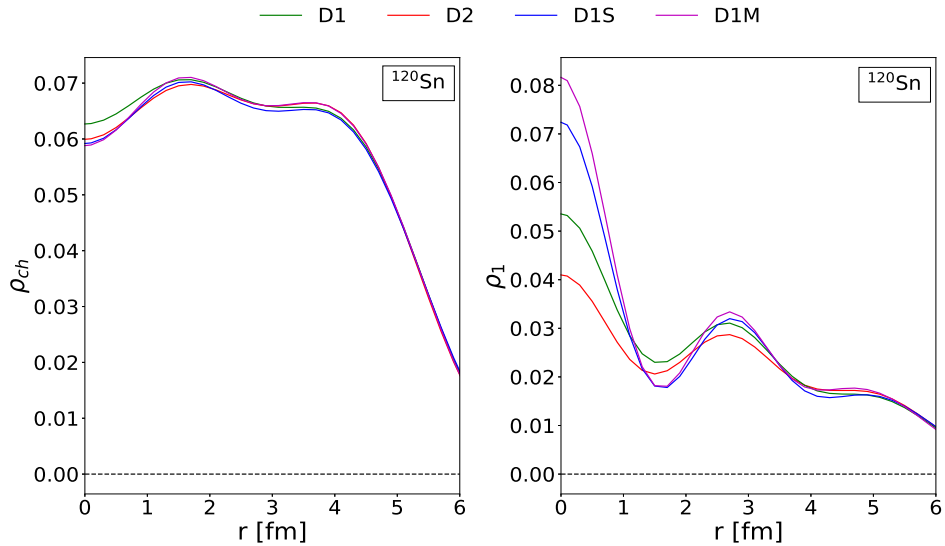


FIGURE 5.9 – Sur la figure de gauche est représenté le profil de la densité de charge pour le ^{120}Sn . La densité isovectorielle est représentée à droite.

Autres noyaux

Les deux derniers noyaux considérés ici sont le ^{30}Si et le ^{80}Zr , ils ne sont cette fois pas magiques. Le ^{80}Zr est en revanche un noyau symétrique avec $N = Z$. Pour le ^{80}Zr , D1M* est la seule interaction qui ne donne pas de résultat convergé.

Le ^{30}Si , représenté sur la figure 5.10, il n'est pas saturé en spin, et il présente une légère asymétrie avec $I = 0,067$. Cette fois, nous avons quatre interactions qui ne parviennent pas à converger pour ce noyau. Seules les interactions D1 et D2 donnent des résultats.

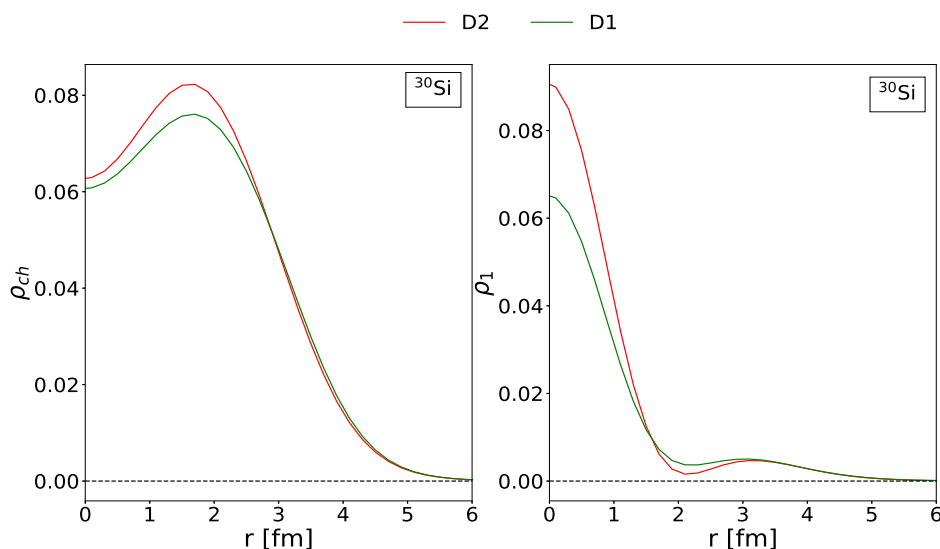


FIGURE 5.10 – Sur la figure de gauche est représenté le profil de la densité de charge pour le ^{30}Si . La densité isovectorielle est représenté à droite.

Grâce à l'étude des densités dans les noyaux, nous pouvons émettre l'hypothèse qu'il existe une corrélation entre la présence d'un pôle de la fonction réponse dans le canal $(S, T) = (0, 1)$ au voisinage de la saturation (comme représenté sur la figure 5.2) et l'amplitude des densités isovectorielles ρ_1 dans les noyaux. De fortes oscillations de cette densité peuvent laisser envisager un caractère pathologique pour une paramétrisation. Si on suppose que cette hypothèse est valide, alors un moyen d'éviter l'apparition d'instabilités de taille finie pourrait être de contraindre la densité isovectorielle de certains noyaux durant l'ajustement des paramètres. Comme des mesures précises de la densité isovectorielle ne sont pas disponibles, on peut envisager de contraindre des densités de charge en supposant que ces dernières auront un impacte indirecte sur les densités isovectorielles, ou éventuellement utiliser des résultats de calculs *ab initio* (pour des noyaux relativement légers).

5.3.2 Gouttelettes de neutrons

Nous avons vu dans la partie précédente que plusieurs paramétrisations de l'interaction de Gogny ne permettent pas de donner des résultats convergés pour certains noyaux. Nous savons qu'il existe un lien entre la présence d'un pôle dans la fonction réponse au voisinage

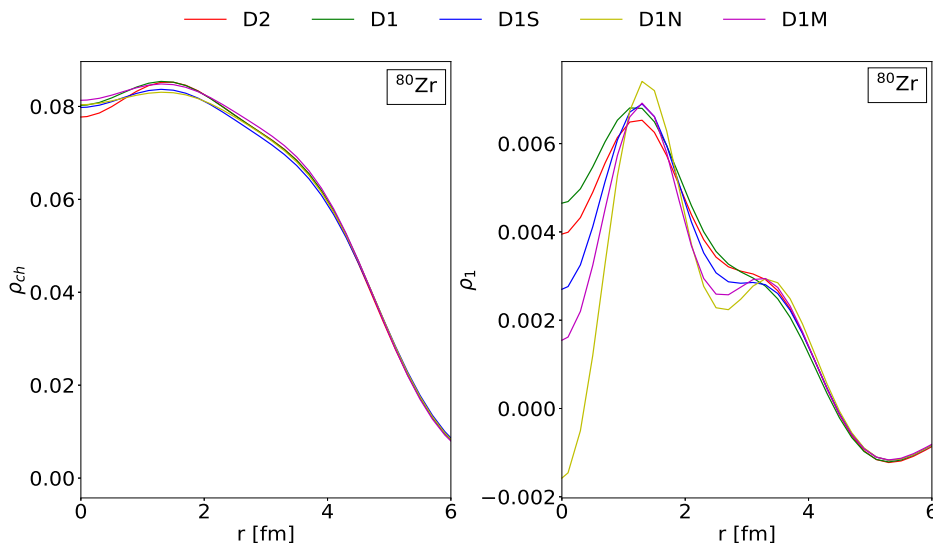


FIGURE 5.11 – Sur la figure de gauche est représenté le profil de la densité de charge pour le ^{80}Zr . La densité isovectorielle est représenté à droite.

de la densité de saturation et l'apparition d'instabilités comme discuté dans [55] et visible sur la figure 5.2. Comme le montre le tableau 5.2, aucun des paramètres de Landau ne nous a permis de prédire le comportement potentiellement instable des paramétrisations dans les noyaux.

En revanche, on constate une différence notable entre les interactions en ce qui concerne la valeur de la pente de l'énergie de symétrie L dans la matière nucléaire infinie (voir le tableau 5.1). Il semble en effet que plus la valeur de L est grande plus le caractère instable des paramétrisations de Gogny a pu se manifester, sauf dans le cas de D2 qui a une forme différente, alors que les autres sont des paramétrisations différentes d'une même interaction.

Dans cette partie, nous allons étudier les gouttelettes de neutrons qui sont des systèmes pour lesquels la valeur de L peut jouer un rôle significatif.

Sur la figure 5.12, est représentée l'équation d'état de la matière infinie symétrique et de la matière de neutrons pour chaque interaction utilisée dans ce chapitre.

Toutes les paramétrisations ont un comportement à peu près similaire dans la matière nucléaire symétrique. Pour ce qui est de la matière de neutrons, on observe des différences notables. À grande densité, D1 et D1S finissent par s'effondrer. Pour ce qui est de D2, D1N, D1M et D1M*, on voit qu'aucun effondrement de l'équation d'état ne semble se manifester avec l'augmentation de la densité. Malgré des similarités en ce qui concerne les comportements, on voit tout de même l'impact que jouent les valeurs de J et L (voir tableau 5.1). En effet, on sait qu'au voisinage de la densité de saturation, la pente de l'énergie de symétrie L est corrélée à la pente de l'équation d'état de la matière de neutrons, et l'énergie de symétrie est reliée à la différence entre les énergies par particule dans la matière de neutron et dans la matière symétrique (dans l'approximation dite « parabolique »).

Passons maintenant à des systèmes de taille finie. Les expériences pour sonder les noyaux très asymétriques en neutrons sont peu nombreuses en raison de la difficulté qu'en-

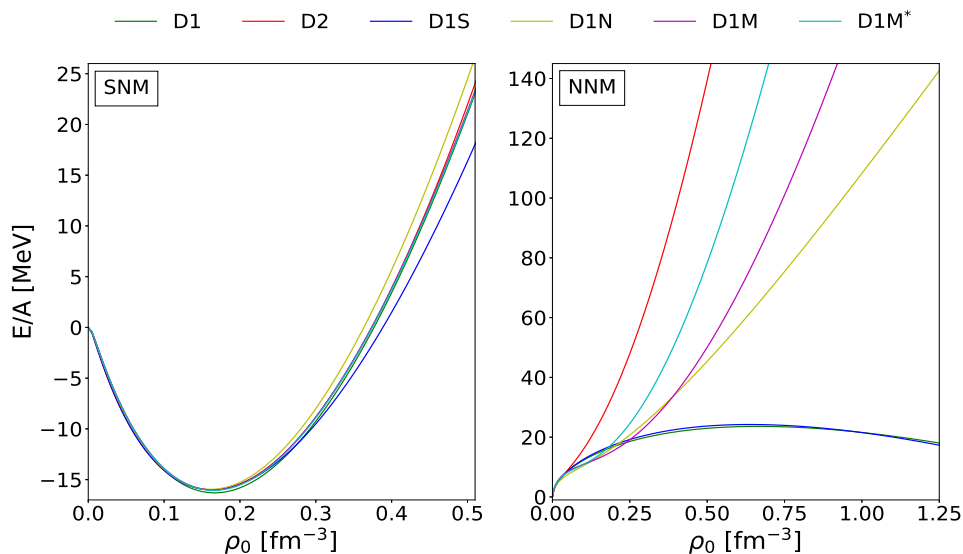


FIGURE 5.12 – Sur la figure de gauche est présentée l'énergie par nucléon dans la matière nucléaire infinie symétrique en fonction de la densité ρ_0 . À droite dans la matière de neutron.

traîne la création de ces noyaux. Mieux connaître les propriétés de ce type de matière permettrait d'évaluer d'une manière plus approfondie les caractéristiques de l'écorce des étoiles à neutrons, mais également d'éventuellement mieux comprendre comment se produit le « processus r » en astrophysique. Malgré l'impossibilité évidente d'avoir des données expérimentales, il existe des calculs ab-initio permettant de modéliser des gouttelettes de neutrons piégées dans un potentiel harmonique (caractérisé par $\hbar\omega$ avec ω la pulsation classique de l'oscillateur) à l'aide d'une interaction dite « réaliste » comme dans [92]. Les calculs effectués dans [92] (pour $\hbar\omega = 5$ MeV et 10 MeV) donnent une évaluation de ce que pourrait être le comportement de la matière de neutrons et feront office de données « expérimentales ».

Ici, le point que nous voulons mettre en avant est seulement la possibilité de calculer les propriétés de ces gouttelettes, nous ne rentrerons pas dans une discussion quant à la capacité de décrire précisément ces systèmes (énergie par neutron, taille etc...). On peut toutefois constater que toutes les paramétrisations considérées dans ce chapitre donnent grossièrement une tendance similaire (les résultats obtenus sont présentés sur la figure 5.13). Pour un piège avec $\hbar\omega = 5$ MeV, D1M* est cependant la paramétrisation la plus éloignée des valeurs « expérimentales » mais la plus proche lorsque l'on prend un piège avec $\hbar\omega = 10$ MeV, l'interaction D2 étant alors la plus éloignée.

Pour un potentiel $\hbar\omega = 5$ MeV on voit que toutes les paramétrisations permettent, avec plus ou moins de précision, de reproduire l'énergie des gouttelettes. En revanche, pour un potentiel avec $\hbar\omega = 10$ MeV, et donc un confinement plus intense des neutrons, on commence à observer des différences de comportement.

Pour commencer, les paramétrisations les plus instables et avec une pente de l'énergie de symétrie plus élevée semblent plus aptes à produire des gouttelettes. On voit que D1M*,

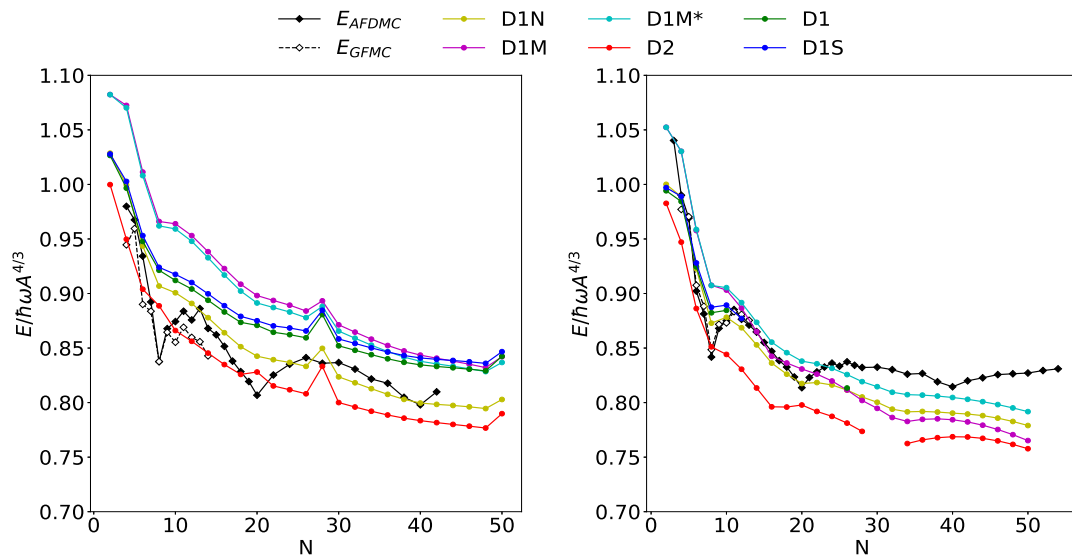


FIGURE 5.13 – Énergies des gouttelettes de neutrons (exprimées sous la forme $E/\hbar\omega A^{4/3}$ où A est le nombre de neutrons) piégées dans un potentiel harmonique avec $\hbar\omega = 5$ MeV à gauche et 10 MeV à droite. Les données auxquelles sont comparées sont les résultats venant de [92]. Les acronymes AFDMC et GFMC correspondent respectivement à « auxiliary field diffusion Monte Carlo » [93] et « Green's function Monte Carlo » [94]. Les points manquants correspondent à des calculs qui n'ont pas convergé.

D1N et D1M convergent pour tous les calculs effectués. Ceci peut s'expliquer en regardant le comportement de ces paramétrisations dans la matière de neutrons. D'après la figure 5.12, on voit que D1M*, D1N et D1M donnent une équation d'état pour la matière de neutrons qui ne s'effondre pas à haute densité. En revanche, la convergence n'est pas assurée dans tous les cas pour D1, D1S et D2. La paramétrisation D1S ne converge plus du tout à partir de $N = 12$. Nous observons aussi le même problème avec D1, mais elle donne cependant des résultats pour $N = 16$ et $N = 20$. Si l'on reprend l'équation d'état, on voit que ces paramétrisations aboutissent à un effondrement de la matière de neutrons. On comprend donc mieux le fait qu'à partir d'un certain nombre de neutrons assez fortement confinés, il devient difficile d'aboutir à une convergence des calculs pour ces systèmes. En ce qui concerne l'interaction D2, toutes les valeurs de A ont conduit à des résultats ayant convergé pour les deux valeurs de $\hbar\omega$ sauf dans le cas $N = 32$ pour $\hbar\omega = 10$ MeV pour une raison qui n'est pas comprise. On peut émettre deux hypothèses concernant cette absence de convergence pour $N = 32$:

- elle pourrait être due à un pôle dans la fonction réponse dans la matière de neutrons ;
- elle pourrait être liée à une transition de phase (comme celle discutée dans l'appendice B de [32]) due à une augmentation de la densité de spin non-locale $\mathbf{s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, ceci est envisageable puisque $N = 32$ correspond pour un potentiel d'oscillateur à un remplissage des états $1f_{7/2}$ et $2p_{3/2}$.

Des calculs supplémentaires devront être entrepris pour mieux comprendre l'origine de ce problème.

5.3.3 Conclusion concernant l'interaction D2

Dans ce chapitre, nous avons étudié la stabilité des différentes paramétrisations standard de Gogny et comparé les résultats avec la version évoluée D2. On a pu constater qu'il était impossible de prédire le caractère stable d'une paramétrisation en se basant seulement sur l'étude des paramètres de Landau. Les paramétrisations présentées dans cette étude ont toutes déjà été utilisées par le passé sans poser de problème apparent du même type que ceux discutés dans ce chapitre. Ceci vient du fait qu'elles ont été la plupart du temps utilisées en développant les fonctions d'onde individuelles sur une base d'oscillateur harmonique, ce qui a pour effet de régulariser les divergences et donc de les masquer, comme expliqué dans [53, 81].

En effet, sans un code de réponse linéaire et une étude comme celle menée dans [55] pour déceler la position de la densité critique, il est difficile de détecter les instabilités d'une paramétrisation à moins de travailler en représentation position (ce qui semble actuellement inenvisageable pour les instabilités dans les canaux avec $S = 1$).

Néanmoins, nous avons vu qu'il semblait impossible, ou en tout cas très peu probable, avec une interaction de Gogny standard de reproduire à la fois les données concernant les noyaux et en même temps d'obtenir une valeur raisonnable pour la pente de l'énergie de symétrie. En augmentant ce paramètre, on observe dans le canal scalaire-isovectoriel de très grandes amplitudes de la densité ρ_1 qui peuvent suggérer un caractère pathologique. Un changement du protocole d'ajustement en ajoutant des profils de densité de charge comme contrainte pourrait aider à éloigner la densité critique et empêcher les divergences.

En revanche, le passage d'un terme dépendant de la densité de portée nulle à une portée finie permet en même temps d'avoir une interaction qui semble stable, mais en plus d'avoir des résultats pour les densités que l'on pourrait qualifier de raisonnables et une pente de l'énergie de symétrie d'une valeur plus élevée que les paramétrisations précédentes. De plus, contrairement à toutes les autres paramétrisations de Gogny, l'interaction D2 est la seule avec laquelle il est possible d'obtenir des résultats à la fois pour les noyaux et pour les gouttelettes de neutrons.

Quatrième partie

Interaction à 3 corps semi-régularisée

Nécessité d'une interaction à 3 corps

Pour la dernière partie de cette thèse, nous allons essayer de construire une interaction à trois corps permettant de faire des calculs au-delà de l'approximation du champ moyen. Nous allons commencer ce chapitre en expliquant la raison pour laquelle nous voulons construire une telle interaction. Ensuite nous verrons quelles sont les contraintes à satisfaire et quelles ont été les tentatives dans cette direction jusqu'à présent.

Contents

6.1	Insuffisance d'une interaction à deux corps	79
6.1.1	Problème de la masse effective	79
6.1.2	La solution de la dépendance en densité	80
6.2	Interaction permettant d'aller au-delà du champ moyen	81
6.2.1	Contraintes pour des calcul MR	81
6.2.2	Interactions permettant d'aller au-delà du champ moyen .	82

6.1 Insuffisance d'une interaction à deux corps

6.1.1 Problème de la masse effective

Il a été démontré, par Weisskopf [95] puis plus tard dans [29], qu'il est impossible avec une interaction à deux corps (sans terme dépendant de la densité) de portée finie ou non, de reproduire l'ensemble des données de la matière nucléaire infinie symétrique ou même des noyaux. Le problème vient de l'impossibilité avec ce type d'interaction d'obtenir une masse effective m^*/m supérieure à environ 0,4. Des interactions comme SV [96], SHZ2 [97] ou B1 [98] donnent approximativement cette valeur pour la masse effective.

Des interactions plus raffinées avec des termes dérivatifs d'ordre 4 (N2LO) voire d'ordre 6 (N3LO)¹ permettent d'ajouter des contributions qui ne sont que négligeables à m^*/m et ne permettent pas d'outrepasser cette difficulté. Dans la matière infinie symétrique, on

1. NⁿLO correspond à des termes dérivatifs allant jusqu'à l'ordre $2n$.

peut exprimer la masse effective d'une quasi-particule se propageant à la surface de Fermi (c'est à dire avec une énergie ε_F) par l'intermédiaire de l'expression suivante :

$$\left. \frac{m}{m^*} \right|_{2B} = \frac{11}{8} + \frac{5}{72} \frac{1}{\varepsilon_F} (K_\infty - 21\varepsilon_0) + \Delta_{FR}, \quad (6.1)$$

avec ε_0 l'énergie par nucléon, K_∞ le module d'incompressibilité et Δ_{FR} un terme comprenant toutes les contributions au-delà de NLO ou venant des termes pouvant apparaître avec une interaction de portée finie. Ce dernier terme étant très petit par rapport aux deux premiers [29].

La masse effective a un impact sur la densité d'états des particules individuelles. Ceci a donc des conséquences non-négligeables notamment pour l'intensité des corrélations d'appariement. Si la densité d'états est trop faible alors le gap d'appariement risque de se retrouver trop petit ce qui aura tendance à faire disparaître ces corrélations. La solution la plus évidente est donc l'utilisation d'une interaction comportant des contributions à 3 corps (voire 4). Le choix le plus simple, celui d'un à trois corps « de contact » (de portée nulle) entraîne cependant une transition ferromagnétique à haute densité et donne donc une interaction qui ne peut pas être utilisée pour des systèmes brisant le renversement du temps.

Une méthode simple pour contourner ce problème est de remplacer ce à 3 corps de contact par un à 2 corps dépendant de la densité [18] (ce qui donne la même densité d'énergie dans la matière infinie symétrique).

L'interaction ainsi obtenue donne cependant un module d'incompressibilité dans la matière infinie symétrique K_∞ de l'ordre de 300 MeV. Or certaines observables, comme l'énergie de la résonance géante monopolaire isoscalaire du ^{208}Pb , montrent que K_∞ ne doit pas être supérieur à 250 MeV [99]. Une solution simple permettant de régler ce dernier problème consiste à remplacer le terme à 2 corps dépendant linéairement de la densité par un terme dépendant d'une puissance fractionnaire de celle-ci.

Nous allons détailler les avantages, inconvénients et implications d'un tel choix dans la partie suivante.

6.1.2 La solution de la dépendance en densité

Comme énoncé précédemment, la solution au problème d'une masse effective trop petite dans la matière nucléaire infinie fût résolu grâce à l'ajout d'un terme dépendant de la densité. On peut justifier ce choix pour une interaction utilisable à l'approximation du champ moyen en considérant qu'il permet de « mimer » les effets de corrélations d'ordre supérieur dans la fonctionnelle.

Ce terme peut s'écrire sous la forme :

$$V_{123} = t_3 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3). \quad (6.2)$$

Il permet d'obtenir une fonctionnelle donnant une masse effective dans l'intervalle empirique $0,7 \lesssim m^*/m \lesssim 0,8$ [51].

Comme expliqué dans le paragraphe précédent, la nécessité d'éviter l'effondrement à haute densité de la matière polarisée (ferromagnétisme) et le besoin d'obtenir une valeur

raisonnable pour le module d'incompressibilité ont motivé le remplacement du terme (6.2) par un 2 corps dépendant d'une puissance fractionnaire de la densité :

$$V_{\text{DD}} = \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \rho_0^\alpha. \quad (6.3)$$

On peut également remarquer que le fait de remplacer l'expression (6.2) par (6.3) permet d'introduire un opérateur d'échange de spin \hat{P}_σ avec un poids relatif x_3 ce qui donne plus de souplesse pour la fonctionnelle ainsi obtenue.

Comme cela a été discuté dans [57], pour une interaction de portée nulle, la puissance α de la densité doit être choisie telle que $1/6 \lesssim \alpha \lesssim 1/3$ afin d'obtenir des valeurs acceptables pour m^*/m et K_∞ .

De même, le paramètre x_3 est un paramètre libre pour la plupart des interactions de Skyrme mais est fixé à 1 pour les interactions de Gogny (pour lesquelles il est noté x_0) afin que l'interaction (6.3) ne contribue pas dans le canal d'appariement (sauf dans le cas où on mélange les protons et les neutrons comme on peut le voir avec les équations (41a) et (66a) dans l'article [20]).

La dépendance en densité est donc un moyen astucieux et simple pour compenser les manques que présente une interaction à deux corps. La masse effective verra une nouvelle contribution apparaître et prendra à la densité de saturation ρ_{sat} la forme ci-dessous :

$$\left. \frac{m}{m^*} \right|_{2B} = \frac{11}{8} + \frac{5}{72} \frac{1}{\varepsilon_F} (K_\infty - 21\varepsilon_0) + \Delta_{FR} - \frac{5}{384} \alpha (10 + 3\alpha) \frac{t_3 \rho_{\text{sat}}^{\alpha+1}}{\varepsilon_F}. \quad (6.4)$$

Cette expression contient maintenant suffisamment de degrés de liberté pour pouvoir obtenir (avec une valeur de α correctement choisie) des valeurs pour ε_0 , ρ_{sat} , K_∞ et m^*/m proches de ce qui est attendues empiriquement.

6.2 Interaction permettant d'aller au-delà du champ moyen

Nous avons évoqué le fait qu'une interaction à deux corps n'est pas suffisante pour décrire les propriétés empiriques de la matière nucléaire infinie et donc, indirectement, celles des noyaux. Cette difficulté, comme nous avons pu en discuter, fut dépassée par l'ajout d'une dépendance en densité. Malgré tout, jusqu'à présent, nous nous sommes contenté de considérer des problèmes éventuellement rencontrés lors des calculs à l'approximation du champ moyen.

Or comme nous l'avons énoncé dans le premier chapitre, il est nécessaire d'aller au-delà de cette l'approximation pour décrire correctement certaines observables. Le principe est en théorie simple, mais la mise en application l'est beaucoup moins.

Un des problèmes dont nous allons discuter est lié à l'interprétation du terme dépendant de la densité et aux manipulations qui devront être faites avec ce terme dans des calculs « multi-référence » (MR).

6.2.1 Contraintes pour des calcul MR

On appellera « pseudo-potentiel » une interaction effective à 2 corps ou plus ne contenant pas de termes qui dépendent de la densité. On dira qu'une fonctionnelle dérive d'un

pseudo-potentiel (ou d'une interaction effective) si tous les termes de cette fonctionnelle sont calculés à partir d'un seul et même pseudo-potentiel (ou interaction effective) et si aucun terme n'est omis ou modifié.

De nombreuses fonctionnelles notamment celles de Skyrme ne dérivent pas directement d'un pseudo-potentiel, ni même d'une interaction effective. En effet, bon nombre d'entre elles, pour des raisons diverses et variées, ont été construites en faisant le choix de retirer ou de modifier certains termes comme par exemple : (i) des contributions proportionnelles aux densités \mathbf{J}_t^2 ($t = 0, 1$) sont parfois omises, (ii) le terme d'échange de l'interaction coulombienne est omis ou traité à l'approximation de Slater ou encore (iii) l'interaction utilisée dans le canal d'appariement est choisie avec une forme plus simple que dans le canal particule-trou.

Tous ces choix, bien que pouvant être justifiés par des raisons pratiques, vont entraîner des conséquences dans le cas de calculs au-delà du champ moyen. Le fait de ne pas utiliser une fonctionnelle dérivant d'un pseudo-potentiel ne respecte pas le principe de Pauli. Il a été montré que ce type d'approches entraînait l'apparition de pôles [9–11] et de sauts [12,13] dans l'énergie obtenue après mélange de configurations ou restauration de symétrie.

De nombreuses méthodes ont été mises au point au fil du temps dans le but de contourner ce problème [11, 100–102], mais elles présentent toutes soit un domaine d'application limité, soit sont des recettes *ad hoc* et l'interprétation physique des résultats peut être questionnée.

Ces considérations nous obligent si l'on veut effectuer un calcul allant au-delà du champ moyen sans rencontrer de difficultés à respecter certaines contraintes pour la création d'une nouvelle interaction, explicitement :

- utiliser une fonctionnelle dont tous les termes dérivent d'une seule interaction,
- calculer cette fonctionnelle à partir d'une interaction ne faisant pas intervenir de dépendance en densité. Ce qui implique nécessairement, à minima, l'utilisation d'un terme à trois corps.

6.2.2 Interactions permettant d'aller au-delà du champ moyen

Par le passé, plusieurs pistes ont été explorées dans le but de construire une fonctionnelle permettant d'aller au-delà du champ moyen. Nous allons ici brièvement exposer les quelques interactions qui ont eu pour but d'effectuer de tels calculs et discuter des difficultés qui ont été rencontrées. Lors de leurs travaux de thèse, R. Jodon [36] et J. Sadoudi [103] ont testé de nouvelle forme pour l'interaction de Skyrme. Ils ont ajouté des termes à 3 et 4 corps de contact, ainsi qu'un terme NLO à 3 corps.

SLyMR0 (interaction NLO à 2 corps, termes de contact à 3 et 4 corps)

La première tentative a été un travail exploratoire. Le pseudo-potentiel considéré a été choisi avec une forme relativement simple puisqu'il s'agit d'une interaction de Skyrme standard à 2 corps (2.1) sans terme dépendant de la densité complétée de deux termes de contact à 3 et 4 corps sans termes dérivatifs. Ce pseudo-potentiel a été nommé SLyMR0 [37]. Les intensités des contributions à 3 et 4 corps sont déterminées par deux constantes de couplage notées u_0 et v_0 .

Cette évolution a permis une légère augmentation de la masse effective comparée à une interaction à deux corps sans dépendance en densité, mais sa valeur ($m^*/m = 0,47$) reste bien trop petite [37]. La description des énergies de liaison à l'aide de SLyMR0 laisse aussi à désirer et la valeur du coefficient d'énergie de symétrie ($J = 23$ MeV) ne permet pas de faire des calculs pour des systèmes trop exotiques. Cette interaction permet cependant d'obtenir une intensité raisonnable pour les corrélations d'appariement tout en évitant les instabilités de taille finies. Finalement, elle permet de donner une description acceptable des déformations et des bandes rotationnelles dans la région des noyaux des couches (sd) et (fp) [104].

La construction de cette interaction étant un travail exploratoire, elle devait principalement servir de test pour donner une première direction et valider les outils de calcul avant l'élaboration d'une interaction plus complexe et plus satisfaisante. Il a vite été mis en évidence qu'une version plus raffinée de l'interaction était nécessaire si l'on veut une meilleure description des noyaux. Néanmoins, elle a permis de donner la voie permettant d'aller plus loin dans la construction d'une interaction permettant des calculs au-delà de l'approximation du champ moyen.

SLyMR1 (interaction NLO à 2 et 3 corps)

Le pseudo-potential SLyMR1 [36] a été construit à la suite de SLyMR0. Cette interaction est constituée d'une interaction de Skyrme standard à 2 corps et d'un terme à trois corps à l'ordre NLO (c'est à dire contenant des termes dérivatifs jusqu'à l'ordre 2). Les termes à 3 corps sont déterminés par 6 paramètres notés $u_0, u_1, u_2, y_1, y_{21}$ et y_{22} . Sa forme complète est détaillée dans [37].

Comme cela est discuté dans la thèse de R. Jodon, l'interaction SLyMR1 est moins performante que d'autres paramétrisations de Skyrme à l'approximation du champ moyen, mais elle a été conçue dans le but de faire des calculs au-delà de cette approximation sans apparition de pathologies. Bien que certaines améliorations aient été obtenues par rapport à SLyMR0 (concernant la valeur de J et les énergies de liaison des noyaux), il est apparu qu'il était extrêmement difficile (voire impossible) de satisfaire en même temps les trois contraintes suivantes : (*i*) avoir une interaction suffisamment attractive dans le canal d'appariement, (*ii*) éviter les instabilités de taille finie et (*iii*) obtenir une masse effective dans l'intervalle des valeurs empiriques $0,7 \lesssim m^*/m \lesssim 0,8$.

Développement du pseudo-potentiel

Dans ce chapitre nous allons expliquer le cheminement de pensée qui a permis de définir la forme du pseudo-potentiel à trois corps. Une fois sa structure établie, nous verrons comment dériver les équations permettant d'obtenir les différentes contributions à l'énergie dans le canal particule-trou et particule-particule. Pour finir nous donnerons la contribution du terme à trois corps aux différentes propriétés de la matière infinie.

Contents

7.1	Structure recherchée pour le pseudo-potentiel	85
7.2	Développement de l'interaction semi-régularisée	87
7.2.1	Construction du pseudo-potentiel	87
7.2.2	Densité d'énergie	87
7.3	Caractéristiques de la matière nucléaire infinie	89
7.3.1	Point de saturation	89
7.3.2	Paramètres de Landau	90

7.1 Structure recherchée pour le pseudo-potentiel

Comme nous l'avons vu dans le chapitre ??, la construction d'un pseudo-potentiel utilisable à l'approximation du champ moyen et au-delà et reproduisant correctement les propriétés empiriques de la matière nucléaire infinie nécessite l'utilisation d'un terme à 3 corps à minima. Comme le travail que nous présentons dans cette partie s'inscrit dans la continuité des travaux [5–8] concernant les pseudo-potentiels régularisés dont nous donnerons l'expression dans le chapitre suivant. Le choix le plus naturel est de considérer un trois corps de portée finie comme par exemple

$$t_3 e^{-\frac{(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)^2+(\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_1)^2+(\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_2)^2}{a_3^2}}, \quad (7.1)$$

avec t_3 un paramètre permettant d'ajuster l'intensité de l'interaction et a_3 la portée. Comme ce terme est de portée finie, il ne nécessite pas l'utilisation d'un *cut-off* permettant

de régulariser la divergence de l'énergie pour les noyaux à couche ouverte (cette divergence étant elle-même due à la divergence de la partie locale de la densité anormale [105]).

Un terme tel que celui de l'équation (7.1) pose évidemment plusieurs problèmes. Le premier est le temps de calcul. En effet, pour un calcul à trois dimensions, le calcul de l'énergie nécessite l'évaluation d'intégrales dans \mathbb{R}^9 , ce qui n'est pas envisageable actuellement, du moins pour des calculs de production. Un autre problème est l'implémentation de ce terme dans des systèmes de coordonnées autres que les coordonnées cartésiennes. Par exemple, en coordonnées sphériques, le facteur de forme de l'équation (7.1) dépend des trois coordonnées radiales r_1 , r_2 et r_3 mais également des trois angles relatifs entre les vecteurs \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 et \mathbf{r}_3 , ce qui rend le calcul de l'énergie (et celui du champ moyen) extrêmement non-trivial.

Les auteurs de [106] ont envisagé une forme alternative plus simple dite de « semi-contact » combinant une gaussienne g_{a_3} et un delta de Dirac. Cette interaction s'écrit :

$$t_3 g_{a_3}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta\left(\mathbf{r}_3 - \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right). \quad (7.2)$$

Ce terme est à priori plus intéressant car le fait d'utiliser un delta de Dirac permet de réduire les dimensions des intégrales à calculer et donc le temps de calcul. En outre, avec ce terme, l'énergie ne dépend pas de la densité anormale locale et ne diverge donc pas [107].

Dans l'article [106], les auteurs ont utilisé cette expression conjointement avec les termes à deux corps des interactions de Skyrme SLy5 et de Gogny D1M et ont effectué des calculs dans la matière nucléaire infinie. Ceci leur a permis de conclure que ce nouveau terme permet de donner des résultats très prometteurs. Cette interaction reste cependant très délicate à implémenter en trois dimensions ou en symétrie sphérique en raison de l'argument du delta de Dirac¹.

Dans cette thèse nous allons reprendre l'idée d'une interaction de semi-contact donnée par l'équation (7.2) mais en prenant une autre forme pour l'argument du delta de Dirac. Nous prendrons la structure suivante :

$$g_{a_3}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3). \quad (7.3)$$

Cette forme permet également de diminuer les dimensions des intégrales à calculer pour évaluer l'énergie. Il est facile de montrer qu'elle donnera dans la densité d'énergie des termes qui seront, au plus, des produits d'une densité locale et de deux densités non-locales, c'est à dire des termes qui auront la même structure que ceux obtenus avec l'interaction de Gogny D2. Cette interaction peut donc être utilisée pour des calculs en symétrie sphérique comme nous l'avons fait dans la partie précédente ou en symétrie axiale [109].

Nous allons montrer dans le paragraphe suivant qu'une interaction dont la dépendance vis-à-vis des coordonnées d'espace tel que de (7.3) peut être utilisée sans la nécessité d'introduire un *cut-off*.

1. L'implémentation en symétrie sphérique est cependant peut-être envisageable en utilisant les techniques proposées par T. Sawaguri et W. Tobocman [108]

7.2 Développement de l'interaction semi-régularisée

7.2.1 Construction du pseudo-potentiel

Comme énoncé, le pseudo-potentiel contient une gaussienne et un delta de Dirac. Pour en prendre la forme la plus simple, nous avons limité son expression à un terme sans échange de spin et un avec :

$$\hat{V} = W_3 \left(\hat{V}_1 + \hat{V}_2 \right), \quad (7.4)$$

avec W_3 l'intensité de l'interaction et les opérateurs \hat{V}_1 et \hat{V}_2 définis comme :

$$\hat{V}_1 = \hat{\mathbf{1}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{1}}_q \hat{\mathbf{1}}_{\sigma} g_{a_3}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3), \quad (7.5)$$

$$\hat{V}_2 = \hat{\mathbf{1}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{1}}_q \hat{\mathbb{P}}_{23}^{\sigma} g_{a_3}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3). \quad (7.6)$$

Entre des états propres des coordonnées généralisées $|x_i\rangle = |\mathbf{r}_i \sigma_i q_i\rangle$, les opérateurs \hat{V}_1 et \hat{V}_2 donnent :

$$\langle x_1 x_2 x_3 | \hat{V}_1 | x_4 x_5 x_6 \rangle = \delta_{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4} \delta_{\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_5} \delta_{\mathbf{r}_3 \mathbf{r}_6} \delta_{q_1 q_4} \delta_{q_2 q_5} \delta_{q_3 q_6} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_5} \delta_{\sigma_3 \sigma_6} g_a(r_{12}) \delta_{\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3}, \quad (7.7)$$

$$\langle x_1 x_2 x_3 | \hat{V}_2 | x_4 x_5 x_6 \rangle = \delta_{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4} \delta_{\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_5} \delta_{\mathbf{r}_3 \mathbf{r}_6} \delta_{q_1 q_4} \delta_{q_2 q_5} \delta_{q_3 q_6} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_6} \delta_{\sigma_3 \sigma_5} g_a(r_{12}) \delta_{\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3}, \quad (7.8)$$

où on a noté $\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \equiv \delta_{\mathbf{r}_i \mathbf{r}_j}$ et $r_{ij} = \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|$ pour alléger les notations. L'expression (7.4) ne peut cependant pas représenter une interaction entre particules indiscernables puisqu'une telle interaction doit être symétrique par rapport à l'échange des coordonnées des particules. Nous allons donc considérer la forme symétrisée contenant six termes :

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 x_3 | \bar{V}_i | x_4 x_5 x_6 \rangle = \frac{1}{6} \left(\langle x_1 x_2 x_3 | \hat{V}_i | x_4 x_5 x_6 \rangle + \langle x_1 x_3 x_2 | \hat{V}_i | x_4 x_6 x_5 \rangle \right. \\ \left. + \langle x_2 x_1 x_3 | \hat{V}_i | x_5 x_4 x_6 \rangle + \langle x_2 x_3 x_1 | \hat{V}_i | x_5 x_6 x_4 \rangle \right. \\ \left. + \langle x_3 x_1 x_2 | \hat{V}_i | x_6 x_4 x_5 \rangle + \langle x_3 x_2 x_1 | \hat{V}_i | x_6 x_5 x_4 \rangle \right). \quad (7.9) \end{aligned}$$

On peut montrer que certaines permutations des coordonnées sont équivalentes et que cette expression peut en fait être réécrite sous la forme :

$$\langle x_1 x_2 x_3 | \bar{V}_i | x_4 x_5 x_6 \rangle = \frac{1}{3} \left(\langle x_1 x_2 x_3 | \hat{V}_i | x_4 x_5 x_6 \rangle + \langle x_2 x_1 x_3 | \hat{V}_i | x_5 x_4 x_6 \rangle + \langle x_3 x_1 x_2 | \hat{V}_i | x_6 x_4 x_5 \rangle \right). \quad (7.10)$$

7.2.2 Densité d'énergie

Dans le canal particule-trou l'énergie s'exprimera de la manière suivante :

$$\begin{aligned} E_{\text{ph}} = \frac{W_3}{6} \sum_{\substack{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \\ \sigma_4 \sigma_5 \sigma_6}} \sum_{\substack{q_1 q_2 q_3 \\ q_4 q_5 q_6}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 d^3 r_4 d^3 r_5 d^3 r_6 \langle x_1 x_2 x_3 | \hat{V}_i | x_4 x_5 x_6 \rangle \\ \left[\rho(x_6, x_1) \rho(x_4, x_2) \rho(x_5, x_3) + \rho(x_4, x_1) \rho(x_5, x_2) \rho(x_6, x_3) \right. \\ \left. - \rho(x_6, x_1) \rho(x_5, x_2) \rho(x_4, x_3) - \rho(x_5, x_1) \rho(x_4, x_2) \rho(x_6, x_3) \right. \\ \left. + \rho(x_5, x_1) \rho(x_6, x_2) \rho(x_4, x_3) - \rho(x_4, x_1) \rho(x_6, x_2) \rho(x_5, x_3) \right]. \end{aligned}$$

Pour le canal particule-particule, nous allons utiliser la densité d'appariement que nous avons définie au chapitre 1 avec l'équation (1.12). Avec cette forme pour la densité d'appariement, l'énergie dans le canal particule-particule s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \tilde{E}_{\text{pp}} = & \frac{W_3}{6} \sum_{\substack{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \ q_1 q_2 q_3 \\ \sigma_4 \sigma_5 \sigma_6 \ q_4 q_5 q_6}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 d^3 r_4 d^3 r_5 d^3 r_6 \langle x_1 x_2 x_3 | \hat{V}_i | x_4 x_5 x_6 \rangle \\
 & \times \left[-4\sigma_2 \sigma_4 \tilde{\rho}^*(x_1, \bar{x}_2) \tilde{\rho}(x_5, \bar{x}_4) \rho(x_6, x_3) + 4\sigma_2 \sigma_4 \tilde{\rho}^*(x_1, \bar{x}_2) \tilde{\rho}(x_6, \bar{x}_4) \rho(x_5, x_3) \right. \\
 & - 4\sigma_2 \sigma_5 \tilde{\rho}^*(x_1, \bar{x}_2) \tilde{\rho}(x_6, \bar{x}_5) \rho(x_4, x_3) + 4\sigma_3 \sigma_4 \tilde{\rho}^*(x_1, \bar{x}_3) \tilde{\rho}(x_5, \bar{x}_4) \rho(x_6, x_2) \\
 & - 4\sigma_3 \sigma_4 \tilde{\rho}^*(x_1, \bar{x}_3) \tilde{\rho}(x_6, \bar{x}_4) \rho(x_5, x_2) + 4\sigma_3 \sigma_5 \tilde{\rho}^*(x_1, \bar{x}_3) \tilde{\rho}(x_6, \bar{x}_5) \rho(x_4, x_2) \\
 & - 4\sigma_3 \sigma_4 \tilde{\rho}^*(x_2, \bar{x}_3) \tilde{\rho}(x_5, \bar{x}_4) \rho(x_6, x_1) + 4\sigma_3 \sigma_4 \tilde{\rho}^*(x_2, \bar{x}_3) \tilde{\rho}(x_6, \bar{x}_4) \rho(x_5, x_1) \\
 & \left. - 4\sigma_3 \sigma_5 \tilde{\rho}^*(x_2, \bar{x}_3) \tilde{\rho}(x_6, \bar{x}_5) \rho(x_4, x_1) \right]. \quad (7.11)
 \end{aligned}$$

avec $\bar{x}_i \equiv (\mathbf{r}_i, -\sigma_i, q_i)$. Après avoir sommé sur les différentes projections du spin et de l'isospin et intégré sur \mathbf{r}_3 , on obtient :

$$\begin{aligned}
 E_{\text{ph}} = & \int d^3 r_1 d^3 r_2 g_{a_3}(r_{12}) \\
 & \times \left\{ A_3^{\rho_0} \rho_0(\mathbf{r}_1) \rho_0^2(\mathbf{r}_2) + A_3^{\rho_1} \rho_0(\mathbf{r}_1) \rho_1^2(\mathbf{r}_2) + A_3^{s_0} \rho_0(\mathbf{r}_1) \mathbf{s}_0^2(\mathbf{r}_2) + A_3^{s_1} \rho_0(\mathbf{r}_1) \mathbf{s}_1^2(\mathbf{r}_2) \right. \\
 & + \frac{1}{2} B_3^{\rho_1} [\rho_1(\mathbf{r}_1) + \rho_1(\mathbf{r}_2)] [\rho_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rho_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \mathbf{s}_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \\
 & + \frac{1}{2} B_3^{s_0} [\mathbf{s}_1(\mathbf{r}_1) + \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_2)] \cdot [\rho_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \mathbf{s}_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)] \\
 & + \frac{1}{2} B_3^{s_1} [\mathbf{s}_0(\mathbf{r}_1) + \mathbf{s}_0(\mathbf{r}_2)] \cdot [\mathbf{s}_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \rho_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)] \\
 & + \frac{1}{2} B_3^{\rho_0} [\rho_0(\mathbf{r}_1) + \rho_0(\mathbf{r}_2)] [\rho_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \rho_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \rho_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\
 & \left. + \mathbf{s}_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{s}_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \right\}, \quad (7.12)
 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 \tilde{E}_{\text{pp}} = & \sum_q \int d^3 r_1 d^3 r_2 g_{a_3}(r_{12}) \\
 & \times \left\{ C_3^\rho [\rho_{\bar{q}}(\mathbf{r}_1) + \rho_{\bar{q}}(\mathbf{r}_2)] [\tilde{\rho}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tilde{\rho}_q(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \tilde{\mathbf{s}}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \tilde{\mathbf{s}}_q(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \right. \\
 & \left. + C_3^s [\mathbf{s}_{\bar{q}}(\mathbf{r}_1) - \mathbf{s}_{\bar{q}}(\mathbf{r}_2)] \cdot [\tilde{\rho}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tilde{\mathbf{s}}_q(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \tilde{\mathbf{s}}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tilde{\rho}_q(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \right\}, \quad (7.13)
 \end{aligned}$$

où on a noté $\bar{q} = -q$. Les différentes constantes de couplage sont définies dans l'annexe A. Comme on peut le voir, l'énergie dans le canal d'appariement ne dépend pas de la densité anormale locale et aucun *cut-off* n'est donc nécessaire.

Dans un système pair par renversement du temps, les densités vectorielles locales vont

être nulles. La fonctionnelle va donc se simplifier et être réduite aux deux termes suivants

$$\begin{aligned}
 E_{\text{ph}} = \int d^3r_1 d^3r_2 g_{a_3}(r_{12}) & \left\{ A_3^{\rho_0} \rho_0(\mathbf{r}_1) \rho_0^2(\mathbf{r}_2) + A_3^{\rho_1} \rho_0(\mathbf{r}_1) \rho_1^2(\mathbf{r}_2) \right. \\
 & + \frac{1}{2} B_3^{\rho_1} [\rho_1(\mathbf{r}_1) + \rho_1(\mathbf{r}_2)] [\rho_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rho_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \mathbf{s}_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \\
 & + \frac{1}{2} B_3^{\rho_0} [\rho_0(\mathbf{r}_1) + \rho_0(\mathbf{r}_2)] [\rho_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \rho_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \rho_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\
 & \left. + \mathbf{s}_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{s}_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{s}_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \right\}. \quad (7.14)
 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 \tilde{E}_{\text{pp}} = \frac{1}{2} \sum_q \int d^3r_1 d^3r_2 g_{a_3}(r_{12}) \\
 \times C_3^{\tilde{\rho}} [\rho_{\tilde{q}}(\mathbf{r}_1) + \rho_{\tilde{q}}(\mathbf{r}_2)] [\tilde{\rho}_{\tilde{q}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tilde{\rho}_{\tilde{q}}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \tilde{\mathbf{s}}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \tilde{\mathbf{s}}_q(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)]. \quad (7.15)
 \end{aligned}$$

7.3 Caractéristiques de la matière nucléaire infinie

Maintenant que nous avons dérivé la forme de l'énergie pour le terme à trois corps, nous allons présenter sa contribution dans la matière infinie. Nous ne reviendrons pas sur les particularités de chaque état de matière infinie déjà détaillées dans la première partie 2.

7.3.1 Point de saturation

L'énergie dans la matière infinie symétrique non polarisée et sans appariement va prendre la forme suivante :

$$E = \frac{W_3}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 g_a(r_{12}) \left[\frac{1}{4} \rho_0(r_1) \rho_0^2(r_2) - \frac{1}{8} \rho_0(r_2) \rho_0(r_1, r_2) \rho_0(r_2, r_1) \right]. \quad (7.16)$$

On peut en tirer l'expression pour l'énergie par nucléons :

$$\frac{E}{A} = \frac{W_3}{8} \left[1 - \frac{1}{2} F_0(\varepsilon) \right] \rho_0^2, \quad (7.17)$$

où on a introduit $\varepsilon = a_3 k_F$. La fonction auxiliaire F_0 est définie à la fin de l'annexe C. La contribution à la pression dans la matière nucléaire est donnée par :

$$P = \frac{W_3}{8} \left[2 - F_0(\varepsilon) - \frac{\varepsilon}{6} F_0'(\varepsilon) \right] \rho_0^3. \quad (7.18)$$

Nous pouvons aussi exprimer le module d'incompressibilité :

$$K_\infty = \frac{9}{18} \left[2 - F_0(\varepsilon) - \frac{5}{9} \varepsilon F_0'(\varepsilon) - \frac{1}{18} \varepsilon^2 F_0''(\varepsilon) \right] \rho_0^2. \quad (7.19)$$

Et enfin, pour la matière symétrique nous aurons la masse effective isoscalaire $\frac{m^*}{m}$ donnée par :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{3\rho_{\text{sat}}^2}{16k_F^2} \frac{e^{-a^2 k_F^2}}{a^4 k_F^4} \left[2 \left(1 - e^{a^2 k_F^2} \right) + a^2 k_F^2 \left(1 + e^{a^2 k_F^2} \right) \right] = \frac{3\rho_{\text{sat}}^2}{16k_F^2} G_2(\varepsilon), \quad (7.20)$$

avec G_2 une autre fonction auxiliaire définie à la fin de l'annexe C.

7.3.2 Paramètres de Landau

Comme nous l'avons vu au cours de cette thèse, les paramètres de Landau sont des quantités nous permettant de vérifier la stabilité d'une interaction. Nous aurons donc besoin de connaître la contribution du terme à trois corps à ces paramètres.

Les paramètres de Landau sont obtenus à partir de l'interaction résiduelle définie par l'équation (7.21). Cette équation donne l'interaction entre une particule et un trou au voisinage de la surface de Fermi avec des moments respectifs tels que $|k_1| = |k_2| = k_F$ échangeant un moment \mathbf{q} . Cette interaction résiduelle peut être développée sur les polynômes de Legendre de la manière suivante :

$$\begin{aligned} V_{\text{ph}}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) &= \frac{\delta^2 \mathcal{E}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_1) \delta \rho(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{q})} \\ &= N_0^{-1} \sum_{\ell} [F_{\ell} + F'_{\ell} \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j + G_{\ell} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j + G'_{\ell} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j] P_{\ell}(\cos \theta), \end{aligned} \quad (7.21)$$

avec $N_0 = \frac{2m_0^*}{\pi^2 \hbar^2} k_F$ le facteur de normalisation et θ l'angle entre les moments \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 . Les coefficients de ce développement sont les paramètres de Landau. Dans ce manuscrit nous utilisons la notation introduite par D. Gogny et R. Padjen [110] F_{ℓ}^{ST} :

$$F_{\ell} = F_{\ell}^{00}, \quad F'_{\ell} = F_{\ell}^{01}, \quad (7.22)$$

$$G_{\ell} = F_{\ell}^{10}, \quad G'_{\ell} = F_{\ell}^{11}. \quad (7.23)$$

La partie à 3 corps semi-régularisée de l'interaction va donner les contributions suivantes aux paramètres de Landau :

$$F_{\ell}^{00} = \frac{\rho_{\text{sat}}}{4} \left\{ [3 - G_3(\varepsilon)] \delta_{\ell 0} - \frac{1}{2} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2}} (2\ell + 1) i_{\ell} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} \right) \right\}, \quad (7.24)$$

$$F_{\ell}^{01} = \frac{\rho_{\text{sat}}}{4} \left\{ [1 + G_3(\varepsilon)] \delta_{\ell 0} - \frac{1}{2} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2}} (2\ell + 1) i_{\ell} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} \right) \right\}, \quad (7.25)$$

$$F_{\ell}^{10} = \frac{\rho_{\text{sat}}}{12} \left\{ [1 - G_3(\varepsilon)] \delta_{\ell 0} - \frac{3}{2} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2}} (2\ell + 1) i_{\ell} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} \right) \right\}, \quad (7.26)$$

$$F_{\ell}^{11} = \frac{\rho_{\text{sat}}}{12} \left\{ [-1 + G_3(\varepsilon)] \delta_{\ell 0} - \frac{3}{2} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2}} (2\ell + 1) i_{\ell} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} \right) \right\}. \quad (7.27)$$

Dans ces équations, les fonctions i_{ℓ} sont les fonctions de Bessel modifiées de première espèce [111]. De nouveau l'expression de la fonction auxiliaire G_3 est donnée en fin d'annexe C.

Maintenant que nous avons présenté la forme du terme à trois corps semi-régularisée et calculé la contribution de ces termes à l'énergie et à la matière infinie, nous allons discuter dans la partie suivante de la procédure qui a été employée pour ajuster les paramètres de cette interaction.

Protocole d'ajustement de la fonctionnelle

Nous avons, dans la partie précédente, dérivé la forme du pseudo-potentiel à trois corps semi-régularisé. Il va maintenant nous falloir développer une stratégie pour déterminer la forme complète de l'interaction avec les termes à deux et trois corps. Dans ce chapitre nous allons aborder les différentes possibilités envisagées puis discuter du protocole qui a été employé pour ajuster les différents paramètres. Nous verrons les difficultés qui ont été rencontrées et les solutions ayant permis la construction de la nouvelle interaction. Il est important de souligner que l'interaction obtenue ne doit pas être considérée comme un résultat final mais comme une première tentative d'ajustement et une démonstration des possibilités que peut offrir une telle interaction.

Contents

8.1	Forme complète de l'interaction	91
8.2	Ajustement des paramètres	93
8.2.1	Matière nucléaire infinie	94
8.2.2	Noyaux	94
8.2.3	Contraintes pour contrôler les instabilités	96

8.1 Forme complète de l'interaction

Comme nous l'avons discuté dans le chapitre 7, le développement de cette interaction à 3 corps semi-régularisée est un prolongement de travaux consacrés à la construction d'interactions régularisées à 2 corps [5–8]. La forme général d'un terme d'ordre n de l'interaction régularisée à deux corps est donnée par (on pourra consulter [7] pour une discussion plus détaillée, notamment en ce qui concerne les notations) :

$$\hat{V}(x_1, x_2; x_3, x_4) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4)g_a(r_{12})\hat{O}_j^{(n)}(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{k}_{34}) \\ \times \left\{ W_\nu^{(n)}\hat{1}_\sigma\hat{1}_\tau + B_\nu^{(n)}\hat{\mathbb{P}}_\sigma\hat{1}_\tau - H_\nu^{(n)}\hat{1}_\sigma\hat{\mathbb{P}}_\tau - M_\nu^{(n)}\hat{\mathbb{P}}_\sigma\hat{\mathbb{P}}_\tau \right\}, \quad (8.1)$$

avec la même définition pour les \mathbf{k}_{ij} que celle donnée par l'équation (2.8). L'opérateur différentiel $\hat{O}_j^{(n)}(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{k}_{34})$ est un scalaire d'ordre n construit à partir des opérateurs moments relatifs \mathbf{k}_{ij} . L'indice ν permet d'énumérer les différents opérateurs scalaires que l'on peut former à chaque ordre et les constantes de couplage associées. Dans cette étude, nous nous sommes limités à des interactions locales, c'est à dire pour lesquelles les opérateurs \mathbf{k}_{ij} commutent avec les distributions delta $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4)$ caractérisant la localité de l'interaction. Cette condition est toujours vérifiée à l'ordre 0. À l'ordre 1 elle correspond à

$$W_2^{(1)} = -W_1^{(1)}, \quad B_2^{(1)} = -B_1^{(1)}, \quad H_2^{(1)} = -H_1^{(1)}, \quad M_2^{(1)} = -M_1^{(1)}, \quad (8.2)$$

et pour les ordres supérieurs

$$W_2^{(n)} = -W_1^{(n)}, \quad B_2^{(n)} = -B_1^{(n)}, \quad H_2^{(n)} = -H_1^{(n)}, \quad M_2^{(n)} = -M_1^{(n)}, \quad (8.3)$$

et

$$W_\nu^{(n)} = B_\nu^{(n)} = H_\nu^{(n)} = M_\nu^{(n)} \text{ pour } \nu > 2. \quad (8.4)$$

Le fait d'utiliser une interaction locale limite la flexibilité de la fonctionnelle mais simplifie grandement son implémentation. En effet, comme les opérateurs moment relatifs commutent avec les delta de Dirac, ils peuvent être transférés sur le facteur de forme gaussien lorsqu'on calcule la valeur moyenne de l'énergie. Il suffit alors de calculer l'énergie et le champ moyen à l'ordre 0 et on obtient les termes d'ordres supérieurs en utilisant la relation

$$\frac{1}{2} \Delta g_a(\mathbf{r}) = \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial a} g_a(\mathbf{r}). \quad (8.5)$$

Pour parvenir à ajuster une interaction donnant des résultats satisfaisant, nous avons procédé par essais successifs.

La première tentative que nous avons considéré a consisté à prendre une interaction régularisée à 2 corps avec des termes $N^n\text{LO}$ ($n = 0, 1, 2$ et 3) en allant jusqu'à l'ordre 3 au plus ainsi que l'interaction à trois corps semi-régularisée, tous les termes ayant la même portée a . Les résultats obtenus pour la matière infinie n'étaient pas convaincants et des instabilités faisaient leurs apparitions dans les noyaux.

Pour la deuxième tentative, nous avons décidé de ne pas prendre les mêmes portées pour les termes à 2 et 3 corps. Ce changement n'a pas permis d'obtenir des résultats significativement meilleurs et ceci pour toutes les valeurs des portées a (pour le terme à 2 corps) et a_2 (pour le terme à 3 corps) que nous avons considérées.

Finalement, nous avons essayé de prendre 2 termes à deux corps d'ordre 0 (notés LO_a et $\text{LO}_{a'}$ avec des portées a et a' telles que $a' < a$) ainsi que le terme à 3 corps (avec une portée a_3). Après avoir obtenu des résultats plus encourageants, nous avons fait varier les différentes portées et constaté que le choix le plus judicieux semblait être $a_3 = a' < a$ (ce qui permet d'introduire seulement deux portées).

Nous avons enfin complété cette interaction avec des termes d'ordres supérieurs avec la portée a ou a' . Nous avons constaté que les résultats étaient plus satisfaisant en utilisant des termes d'ordres supérieurs de portée a (c'est-à-dire avec la plus grande des deux portées).

Cette série d'ajustements préliminaires nous a conduit à prendre les valeurs suivantes pour les portées

$$a' = 0,8 \text{ fm} \quad \text{et} \quad a = a_3 = 1,2 \text{ fm}. \quad (8.6)$$

Les interactions que nous avons ainsi construites contiennent donc 2 termes à deux corps d'ordre 0, un terme à 3 corps semi-régularisé et, éventuellement, des termes à 2 corps d'ordres supérieurs allant jusqu'à $n = 1, 2$ ou 3 . Ces interactions seront nommées RegMR(X) avec X l'ordre le plus élevé considéré dans l'interaction à 2 corps. Le tableau (8.1) donne un résumé des termes contenus dans chaque interaction. Chaque terme à 2 corps est caractérisé par 4 paramètres, le terme à 3 corps par 1 paramètre et le terme spin-orbite (de portée nulle dans ce travail exploratoire) 1 paramètre également. Le nombre total de paramètre à ajuster N est également donné dans le tableau.

Type d'interactions							
interaction	2bLO _a	2bLO _{a'}	2bNLO _a	2bN ² LO _a	2bN ³ LO _a	3bLO _{a'}	N
RegMR0	✓	✓	×	×	×	✓	10
RegMR1	✓	✓	✓	×	×	✓	14
RegMR2	✓	✓	✓	✓	×	✓	18
RegMR3	✓	✓	✓	✓	✓	✓	22

TABLE 8.1 – Noms des interactions ainsi que les termes intervenant dans chacune d'entre elles.

Après avoir choisi la forme des interactions, il reste à définir la fonction de pénalité qui va permettre d'ajuster les paramètres. Nous ne reviendrons pas sur l'ensemble des détails concernant la procédure de minimisation de cette fonction car ils ont déjà été traités dans la première partie de ce manuscrit. En revanche nous allons discuter et justifier les observables qui ont été prises en compte pour cet ajustement ainsi que les modifications sur le protocole qui ont été faites à mesure que des problèmes sont apparus.

8.2 Ajustement des paramètres

Au cours du processus d'ajustement des paramètres il arrive dans certains cas que nous ne recherchions pas à atteindre la valeur d'une observable, mais plutôt à en obtenir une borne supérieure ou inférieure. Pour cela en plus de ce qui a été utilisé dans la première partie nous utiliserons des contraintes asymétriques [112] de la forme :

$$\chi_i = \exp\left(\pm \frac{\mathcal{O}_i^{\text{th}}(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i^{(0)}}{\Delta\mathcal{O}_i}\right). \quad (8.7)$$

Dans cette expression, $\mathcal{O}_i^{(0)}$ est la valeur que l'on choisit comme maximum ou comme minimum. La quantité $\Delta\mathcal{O}_i$ n'est plus une tolérance mais un paramètre donnant l'intensité de la contrainte. On utilise un signe « + » pour avoir

$$\mathcal{O}_i^{\text{th}}(\mathbf{p}) < \mathcal{O}_i^{(0)} \quad (8.8)$$

et un signe « - » dans le cas contraire.

8.2.1 Matière nucléaire infinie

Les contraintes dans la matière infinie sont présentées dans le tableau (3.1). Nous avons tout d'abord considéré $\rho_{\text{sat}} = 0,160 \text{ fm}^{-3}$ mais nous avons ensuite constaté que $\rho_{\text{sat}} = 0,159 \text{ fm}^{-3}$ donnait de meilleurs résultats pour les rayons de charge des noyaux. Pour la masse effective isoscalaire, nous avons considéré des valeurs allant de 0,65 à 0,95 par pas de 0,05.

En plus des quantités caractérisant la matière infinie symétrique, nous avons ajouté une équation d'état de la matière de neutrons [113] avec des points allant de $0,03 \text{ fm}^{-3}$ à $1,5 \text{ fm}^{-3}$ avec une tolérance de 15 %. Afin de nous assurer qu'aucun état lié n'apparaissait dans la matière symétrique polarisée (ce qui est parfois le cas [8]), un point dans la matière polarisée [114] a également été pris en compte à la densité $0,1 \text{ fm}^{-3}$ avec une tolérance de 1,5 MeV.

Enfin, le paramètre de Landau $F_0^{11} = 0,60 \pm 0,05$ a aussi été ajouté. Cette valeur a été choisie car des calculs exploratoires [115] ont montré que cette valeur pouvait permettre une meilleure reproduction des moments magnétiques des noyaux.

ρ_{sat} [fm ⁻³]	E/A [MeV]	K_∞ [MeV]	J [MeV]	L [MeV]	m^*/m
0,1590	-16,0	230	32	45	0,650 à 0,950
$\pm 0,0005$	$\pm 0,2$	± 10	± 2	± 5	$\pm 0,001$

TABLE 8.2 – Contraintes concernant les caractéristiques de la matière nucléaire infinie appliquées lors de l'ajustement des paramètres.

8.2.2 Noyaux

Nous avons en partie repris les noyaux qui ont été utilisés dans le protocole de la première partie de cette thèse. Nous avons cependant ajouté quelques noyaux à la liste afin de mieux couvrir l'ensemble de la table de masse mais également pour mieux contraindre les paramètres qui sont en plus grand nombre que dans le cas d'une interaction de Skyrme standard.

Nous avons considéré 10 noyaux doublement magiques : ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{40}\text{Ca}$, ${}^{48}\text{Ca}$, ${}^{48}\text{Ni}$, ${}^{56}\text{Ni}$, ${}^{78}\text{Ni}$, ${}^{100}\text{Sn}$, ${}^{132}\text{Sn}$ et ${}^{208}\text{Pb}$. L'hélium 4 n'est pas, à priori, un bon candidat pour un calcul à l'approximation du champ moyen. Nous avons cependant remarqué qu'un important excès d'énergie de liaison pour ce noyau était un signe annonciateur de l'apparition d'une instabilité de taille finie dans le canal $(S, T) = (0, 1)$. Nous avons donc ajouté l'énergie de liaison de ce noyau à la fonction de pénalité en espérant réduire la probabilité de voir une instabilité apparaître.

À cette liste, nous avons ajouté 2 noyaux qui peuvent être en première approximation considérés comme doublement magiques : le ${}^{80}\text{Zr}$ et le ${}^{90}\text{Zr}$. Cette approximation est faite car les sous-couches $N, Z = 40$ peuvent être considérées comme fermées. La contribution de l'appariement sera soit nulle soit assez petite pour pouvoir être négligée. Nous avons également fait l'hypothèse que le ${}^{80}\text{Zr}$ pouvait être considéré comme sphérique ou, du

moins, que sa déformation ne donnait pas une trop grande contribution à son énergie de liaison.

Les énergies de liaison ont été tirées de la table de masse de Audi et Wang [116, 117] après avoir retiré la contribution des électrons.

Des contraintes ont aussi été prises en compte pour les rayons de charge des calciums ^{40}Ca et ^{48}Ca ainsi que de l'étain ^{132}Sn et du plomb ^{208}Pb . Les rayons de charge sont extrait de la table de Angeli [118].

Pour contraindre le terme spin-orbite, nous avons sélectionné une série de différence d'énergies individuelles tirée de [70]. Une tolérance de 250 keV a été ajouté en plus de l'incertitude expérimentale. L'ensemble des contraintes concernant les noyaux est résumé dans les tableaux (8.3) et (8.4).

Données	$\mathcal{O}_i^{\text{target}}$	$\Delta\mathcal{O}_i$	Unités
Énergies de liaison			
$E(^4\text{He})$	-28,296	1,0	MeV
$E(^{16}\text{O})$	-127,617	1,0	MeV
$E(^{40}\text{Ca})$	-342,034	1,0	MeV
$E(^{48}\text{Ca})$	-415,983	1,0	MeV
$E(^{48}\text{Ni})$	-347,286	1,0	MeV
$E(^{56}\text{Ni})$	-483,954	1,0	MeV
$E(^{78}\text{Ni})$	-642,522	2,0	MeV
$E(^{80}\text{Zr})$	-669,102	2,0	MeV
$E(^{90}\text{Zr})$	-783,799	2,0	MeV
$E(^{100}\text{Sn})$	-824,995	1,0	MeV
$E(^{132}\text{Sn})$	-1102,675	1,0	MeV
$E(^{208}\text{Pb})$	-1635,862	1,0	MeV
Rayons de charge			
$r_{\text{ch}}(^{40}\text{Ca})$	3,4776	0,01	fm ²
$r_{\text{ch}}(^{48}\text{Ca})$	3,4771	0,01	fm ²
$r_{\text{ch}}(^{132}\text{Sn})$	4,7093	0,01	fm ²
$r_{\text{ch}}(^{208}\text{Pb})$	5,5012	1,0	fm ²

TABLE 8.3 – Contraintes employées pour l'ajustement des paramètres des interactions.

Avec ces contraintes dans le protocole les problèmes suivants sont cependant apparus :

- De larges oscillations des densités isovectorielles se sont développées, signe d'une potentielle instabilité scalaire-isovectorielle.

Différences d'énergies de particules individuelles			
Neutrons	unité	Protons	unité
$1i_{13/2} - 3p_{1/2}$	MeV	$1g_{7/2} - 3d_{3/2}$	MeV
$3p_{3/2} - 3p_{1/2}$	MeV	$2d_{5/2} - 1h_{11/2}$	MeV
$2f_{5/2} - 3p_{1/2}$	MeV	$1h_{11/2} - 2d_{3/2}$	MeV
$2g_{9/2} - 1i_{11/2}$	MeV	$2d_{3/2} - 3s_{1/2}$	MeV
$2g_{9/2} - 1j_{15/2}$	MeV	$1h_{9/2} - 2f_{7/2}$	MeV
	MeV	$1h_{9/2} - 1i_{13/2}$	MeV

TABLE 8.4 – Contraintes sur les différences d'énergies de particules individuelles employées pour l'ajustement des paramètres des interactions.

- De grandes augmentations de la densité isoscalaire au centre de certains noyaux (notamment le ^{40}Ca) qui sont également des signes précurseurs de l'apparition d'instabilités.
- De très grandes valeurs (en valeur absolue) pour les paramètres de l'interaction donnant des compensations entre des termes très grands et de signes opposés dans le calcul des observables (nous avons constaté que ce phénomène était également annonciateurs d'instabilités même s'il n'est pas clair s'il s'agit d'instabilités de taille finie ou de problèmes numériques).
- De grandes valeurs pour les constantes de couplage des termes contenant des densités non locales de spin (normales ou anormales), c'est à dire les constantes déterminant le poids des termes de la fonctionnelle contenant

$$\mathbf{s}_t(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{s}_t(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad \text{pour } t = 0, 1 \quad (8.9)$$

ou

$$\tilde{\mathbf{s}}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \tilde{\mathbf{s}}_q(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad \text{pour } q = n, p. \quad (8.10)$$

Lorsque le poids de ces termes devient trop grand dans la fonctionnelle, on peut observer une transition de phase similaire à celle concernant les densités \mathbf{J}_t décrite dans [119].

- Un appariement trop intense à la surface des noyaux ce qui a pour conséquence une convergence très lente en fonction du nombre total d'ondes partielles utilisées pour développer les densités et une évolution non satisfaisante des gaps moyens avec la masse et l'asymétrie des noyaux.

8.2.3 Contraintes pour contrôler les instabilités

Pour pallier à tous ces problèmes d'autres contraintes ont dû être ajoutées au protocole. Pour éviter les instabilités, trois contraintes symétriques sur les densités de charge ont été prises en compte. Comme nous avons pu le voir dans la seconde partie, contraindre les densités peut être un moyen d'éviter les instabilités. Nous avons donc ajouté dans le

protocole des contraintes sur les densités de charge des ^{40}Ca , ^{48}Ca et ^{208}Pb avec

$$\chi_i^2 = \frac{1}{N_{\text{cut}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{cut}}} \left(\frac{\rho_{\text{ch}}^{\text{calc}}(r_j) - \rho_{\text{ch}}^{\text{exp}}(r_j)}{\Delta\rho_{\text{ch}}} \right)^2, \quad (8.11)$$

avec N_{cut} l'indice, sur le réseau d'intégration, du dernier point pour lequel la densité de charge est supérieure à $0,02 \text{ fm}^{-3}$ (afin de contraindre la densité de charge dans le volume du noyau, là où des instabilités peuvent se développer). La tolérance est de $\Delta\rho_{\text{ch}} = 0,00035 \text{ fm}^{-3}$

Nous avons cependant constaté que ces contraintes sur les densités de charge ne suffisaient pas à empêcher l'apparition d'instabilités.

Pour des noyaux très asymétriques, comme le ^{60}Ca , de larges amplitudes de la densité isovectorielle sont visibles au centre des noyaux lorsque des instabilités commencent à se développer. Une contrainte asymétrique sur $\rho_1(0)$ dans le ^{60}Ca a donc aussi été prise pour les éviter :

$$\chi_i = \exp\left(\frac{\rho_1^{\text{calc}}(0) - \rho_1^0}{\Delta\rho_1(0)}\right), \quad (8.12)$$

avec $\rho_1^0(0) = 0 \text{ fm}^{-3}$ et $\Delta\rho_1(0) = 0,0035 \text{ fm}^{-3}$ (ces valeurs ont été choisies empiriquement).

Une contrainte de même type pour la densité isoscalaire dans le ^{40}Ca a également été utilisée :

$$\chi_i = \exp\left(\frac{\rho_0^{\text{calc}}(0) - \rho_0^0}{\Delta\rho_0(0)}\right), \quad (8.13)$$

avec cette fois $\rho_0^0(0) = 0,190 \text{ fm}^{-3}$ et $\Delta\rho_0(0) = 0,0035 \text{ fm}^{-3}$ (la valeur obtenue avec D1S a été considérée comme une valeur maximale acceptable et la tolérance a été choisie empiriquement).

Les transitions de phases liées aux densités non locales de spin ont été contrôlées en choisissant (de manière empirique) des intervalles acceptables pour les constantes de couplage correspondantes. Nous avons utilisé dans la fonction de pénalité

$$\chi_i = \frac{B_n^{\text{ST}} - 0}{\Delta B_n^{\text{ST}}}, \quad (8.14)$$

pour $T = 0$ ou 1 (pour les densités isoscalaires ou isovectorielles) pour tous les termes venant de l'interaction à deux corps (ainsi que des contraintes similaires dans le canal d'appariement).

La dernière contrainte sert à contrôler l'interaction dans le canal d'appariement et en particulier sa répartition dans le noyau. Nous avons constaté qu'il était possible d'obtenir un appariement suffisamment intense dans le volume des noyaux sans être trop intense au niveau de leurs surfaces en contraignant les termes d'ordre 0 (c'est à dire LO_a , $\text{LO}_{a'}$ ainsi que le terme à 3 corps) qui donne l'essentiel des contributions. Nous avons déterminé de manière empirique des valeurs pour les constantes de couplage des termes LO_a et $\text{LO}_{a'}$ dans le canal d'appariement, ces valeurs sont :

$$C_0^{\tilde{\rho}} \approx -1000,5 \text{ MeV fm}^{-3}, \quad C_0^{\tilde{\rho}'} \approx 590 \text{ MeV fm}^{-5}. \quad (8.15)$$

Ces valeurs (contraintes avec des tolérances de $0,5 \text{ MeV fm}^{-3}$ et $0,5 \text{ MeV fm}^{-5}$) permettent d'obtenir une valeur du gap moyen pour les neutrons dans l'étain 120 voisine de celle

obtenue avec D1S. Afin d'obtenir un champ d'appariement approximativement similaire à tous les ordres, nous avons contraint les constantes de couplage des termes d'ordre $n > 0$ à valoir $0 \pm 2 \text{ MeV fm}^{-(3+2n)}$.

Dans cette partie nous avons détaillé l'ensemble des contraintes intervenant dans le protocole d'ajustement. Ceci a permis le développement d'une série d'interaction avec des masses effectives variant de 0,65 à 0,95 et avec des termes allant jusqu'à l'ordre N³LO dans chaque cas. À la suite de cette série d'ajustements, nous avons pu observer que pour les interactions RegMR0 seule une valeur de 0,7 de la masse effective permettait d'obtenir des résultats convergés pour l'ensemble des noyaux que nous avons testés.

Parmi l'ensemble de ces interactions, nous avons décidé de présenter celle qui semble la plus prometteuse à savoir une interaction RegMR3 avec une masse effective de 0,80. Dans la partie suivante nous allons donc faire une étude comparative des résultats obtenus avec cette nouvelle interaction et les paramétrisations de Gogny D1S et D2.

Nous allons exposer un ensemble de résultats obtenus avec l'interaction RegMR3 dont le protocole d'ajustement a été discuté dans le chapitre 8. Nous commencerons par étudier les propriétés de cette interaction dans la matière nucléaire infinie, ensuite nous commenterons les spectres de particules individuelles. Nous continuerons la discussion avec une étude sur les prédictions concernant les densités dans les noyaux et les calculs pour les gouttelettes de neutrons. Pour finir, nous présenterons les résultats pour les énergies de liaison d'un ensemble de noyaux sphériques ainsi que les rayons de charge et les gaps moyens d'appariement.

Comme pour la seconde partie, tous les calculs ont de nouveau été effectués avec la correction totale de la correction du mouvement du centre de masse. L'interaction coulombienne a été traitée de manière exacte en considérant les protons comme des charges ponctuelles.

Contents

9.1	Propriétés dans la matière nucléaire	99
9.2	Spectres de particules individuelles	101
9.3	Densités dans les noyaux	106
9.3.1	Gouttelettes de neutrons	107
9.4	Calculs pour des noyaux sphériques	110
9.4.1	Énergies de liaison et dérive isotopique	110
9.4.2	Rayons de charge	113
9.5	Conclusion	115

9.1 Propriétés dans la matière nucléaire

Nous allons ici étudier les résultats de la nouvelle paramétrisation RegMR3 dans la matière nucléaire infinie.

Sur le tableau (9.1) nous présentons les paramètres de Landau de RegMR3 ainsi que ceux obtenus avec D1S et D2 qui nous serviront d'éléments de comparaison. On peut

remarquer que, contrairement à ce qui est obtenu avec l'ensemble des paramétrisations de Gogny présentées dans le tableau (5.2), le paramètre F_0^{00} pour RegMR3 est positif. Ce résultat s'explique par la valeur relativement grande du module d'incompressibilité obtenue avec RegMR3, on a en effet [51]

$$F_0^{00} = \frac{1}{6} \frac{2m^*}{\hbar^2 k_F^2} K_\infty - 1. \quad (9.1)$$

Un module d'incompressibilité plus élevé conduit donc à une valeur supérieure de F_0^{00} et éventuellement positive.

Sur la figure (9.1), on voit que RegMR3 est stable dans les canaux $(S,T) = (0,0)$, $(1,0)$ et $(1,1)$. En revanche, on voit dans le canal $(S,T) = (0,1)$ que RegMR3 comme D1S devient instable à environ trois fois la densité de saturation. Malgré tout, cette densité étant bien plus grande que les densités rencontrées dans les systèmes étudiés nous pouvons nous permettre de considérer cette instabilité comme ne présentant aucun problème.

Paramètres de Landau pour $\ell = 0$ ($F_0^{ST} \geq -1$)				
	F_0^{00}	F_0^{01}	F_0^{10}	F_0^{11}
D2	-0,308 987	0,849 242	0,197 302	0,961 978
D1S	-0,369 032	0,742 754	0,466 101	0,631 028
RegMR3	0,041 937	1,097 959	0,837 803	0,403 847
Paramètres de Landau pour $\ell = 1$ ($F_1^{ST} \geq -3$)				
	F_1^{00}	F_1^{01}	F_1^{10}	F_1^{11}
D2	-0,784 699	0,696 080	0,069 482	0,639 014
D1S	-0,908 860	0,470 433	-0,184 390	0,610 333
RegMR3	-0,600 087	-0,537 675	0,421 006	0,515 593
Paramètres de Landau pour $\ell = 2$ ($F_2^{ST} \geq -5$)				
	F_2^{00}	F_2^{01}	F_2^{10}	F_2^{11}
D2	-0,828 976	0,557 270	0,285 508	-0,032 018
D1S	-0,557 772	0,342 395	0,244 971	-0,037 692
RegMR3	-2,441 345	0,389 635	0,122 768	0,041 90

TABLE 9.1 – Valeurs des paramètres de Landau pour $\ell = 0, 1$ et 2 obtenus avec les paramétrisations D1S, D2 et RegMR3.

Les valeurs obtenues pour les propriétés de la matière nucléaire infinie sont présentées dans le tableau (9.2). Comme nous l'avons mentionné maintes fois dans ce manuscrit, un point majeur de la nouvelle paramétrisation devait être l'augmentation de la valeur de la masse effective tout en conservant une interaction stable et avec des résultats au moins comparables à ceux obtenus avec les paramétrisations fréquemment utilisées à l'approximation du champ moyen. Nous avons donc contraint m^*/m à 0,8 à la densité de saturation. On voit l'évolution de cette quantité dans la matière nucléaire infinie symétrique sur la figure (9.2). On observe que la masse effective est une fonction décroissante de ρ_0 à haute densité comme c'est le cas pour la plupart des interactions standard. On voit cependant

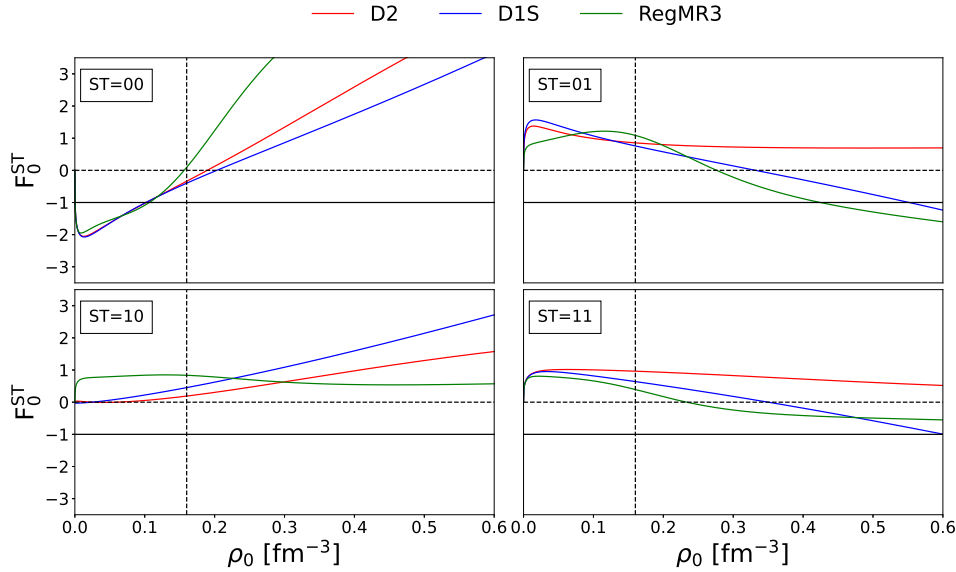


FIGURE 9.1 – Paramètres de Landau en fonction de la densité ρ_0 pour D1S, D2 et RegMR3.

que pour RegMR3, la masse effective n'est pas une fonction monotone de la densité sur l'intervalle $0 \leq \rho_0 \leq \rho_{\text{sat}}$, elle passe par un minimum légèrement inférieur à 0,7 pour une densité voisine de celle correspondant à la surface des noyaux. On peut s'attendre à ce que cette évolution inhabituelle de la masse effective avec la densité ait un impact sur les énergie de particules individuelles.

Comme nous l'avons dit précédemment, la valeur du module d'incompressibilité K_∞ est assez grande en comparaison aux autres paramétrisations. En ce qui concerne la pente de l'énergie de symétrie L , malgré une volonté de contraindre sa valeur à environ 45 ± 5 MeV, on voit que RegMR3 en donne une valeur extrêmement faible de 12,8 MeV encore plus petite que les paramétrisations standard de Gogny. Cependant, en regardant l'équation d'état de la matière de neutrons, représentée sur la figure (9.3), on voit que contrairement à D1S (et D1), la matière de neutrons ne s'effondre pas à grande densité. On semble plutôt obtenir, pour ρ_0 entre 0,2 et 0,3 fm^{-3} un plateau pour l'énergie par nucléons qui finit ensuite par augmenter de nouveau avec la densité. Nous verrons par la suite l'implication de cette structure de l'équation de la matière de neutrons.

9.2 Spectres de particules individuelles

Maintenant, nous allons voir les résultats de RegMR3 pour les spectres d'énergie de particules individuelles des noyaux utilisés dans le protocole d'ajustement.

Pour le ^{40}Ca , le spectre neutron et proton est légèrement plus dilaté que pour D1S et D2. On ne voit pas d'inversion d'état mais la déviation par rapport à l'expérience est bien plus grande pour RegMR3 que pour D1S et D2. En ce qui concerne le ^{48}Ca , on voit que les états $1d_{3/2}$ et $2s_{1/2}$ sont inversés et non dégénérés contrairement aux données

	ρ_{sat} [fm ⁻³]	E/A [MeV]	K_∞ [MeV]	J [MeV]	L [MeV]	m^*/m
D2	0,163	-16,000	209,251	31,110	44,831	0,738
D1S	0,163	-16,007	202,840	31,125	22,441	0,697
RegMR3	0,158	-16,237	285,654	31,954	12,798	0,800

TABLE 9.2 – Caractéristiques du voisinage du point de saturation de la matière nucléaire infinie pour les paramétrisation considérées ici.

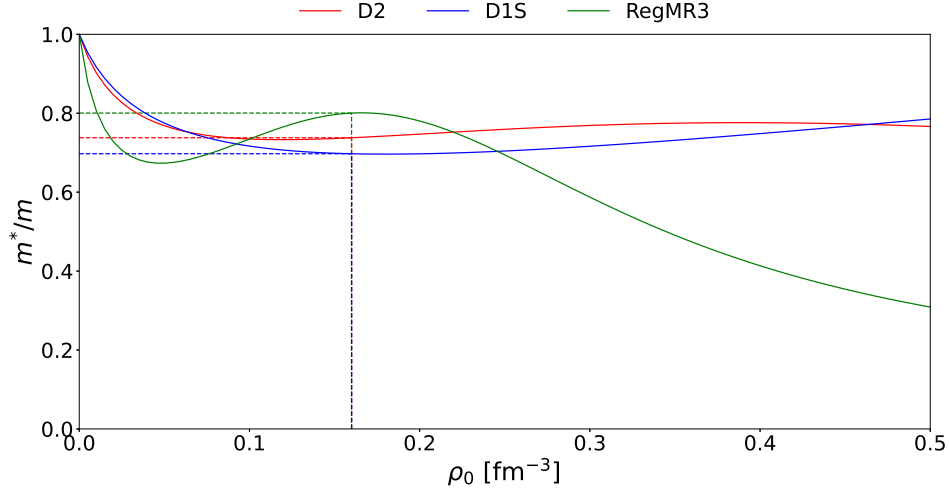


FIGURE 9.2 – Masse effective isoculaire en fonction de la densité ρ_0 dans la matière symétrique pour D2, D1S et RegMR3.

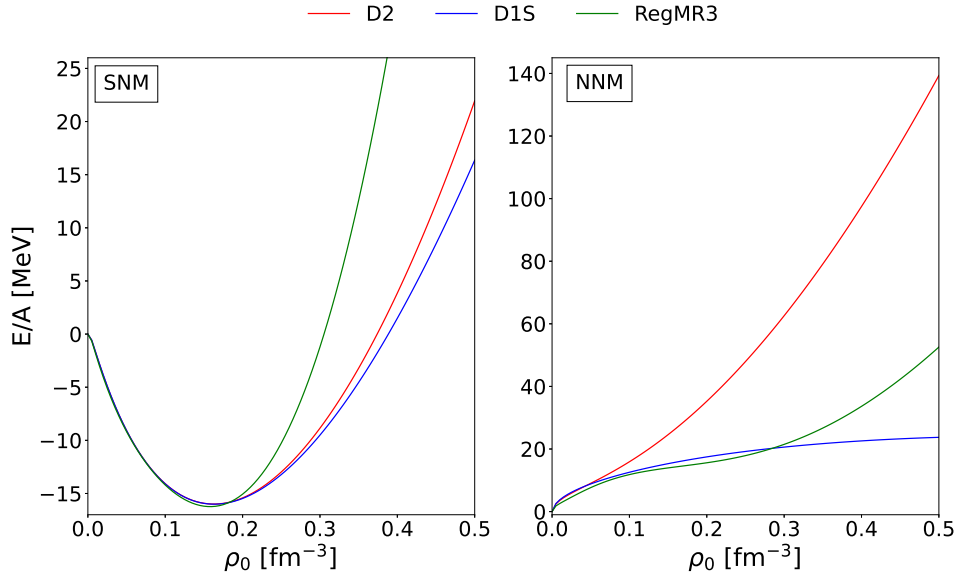


FIGURE 9.3 – Équation d'état de la matière symétrique à gauche et de la matière de neutrons à droite pour D2, D1S et RegMR3.

expérimentales pour les neutrons et les protons même si, pour ces derniers, l'effet est moins prononcé. Le même problème de (non) dégénérescence est observé dans le ^{56}Ni pour les mêmes couches, c'est aussi le cas avec D1S et D2 même si l'écart est moins accentué.

On note aussi que, contrairement à D2 qui donne une dégénérescence pour les états $1p_{1/2}$ et $1f_{5/2}$, l'interaction RegMR3 prédit une dégénérescence pour les états $1f_{5/2}$ et $3p_{3/2}$. Pour D1S les états $1p_{1/2}$ et $1f_{5/2}$ sont séparés mais inversés contrairement à ce que montre l'expérience.

Dans l'étain 120, RegMR3 donne une déviation plus petite que D1S pour les neutrons et meilleure que D1S et D2 pour les protons. Les états neutron $2d_{3/2}$, $1h_{11/2}$ et $3s_{1/2}$ sont inversés pour les trois paramétrisations. En revanche pour les protons seul RegMR3 est en mesure de reproduire la dégénérescence des états $2d_{3/2}$, $1h_{11/2}$. Pour finir, dans le plomb 208 (dont des énergies de particules individuelles ont été intégrées à la fonction de pénalité), on voit que RegMR3 donne de nouveau une déviation plus petite que les deux autres interactions que ce soit pour les neutrons ou les protons. L'ordre des états est aussi respecté.

Pour conclure cette partie, on peut dire que RegMR3 donne des résultats globalement moins bons que D1S et D2 mais qui restent tout de même acceptables pour un premier essai d'ajustement. On peut tout de même noter qu'avec RegMR3 les désaccords entre les valeurs calculées et les données concernent surtout les noyaux légers et que les résultats semblent meilleurs pour les noyaux plus lourds.

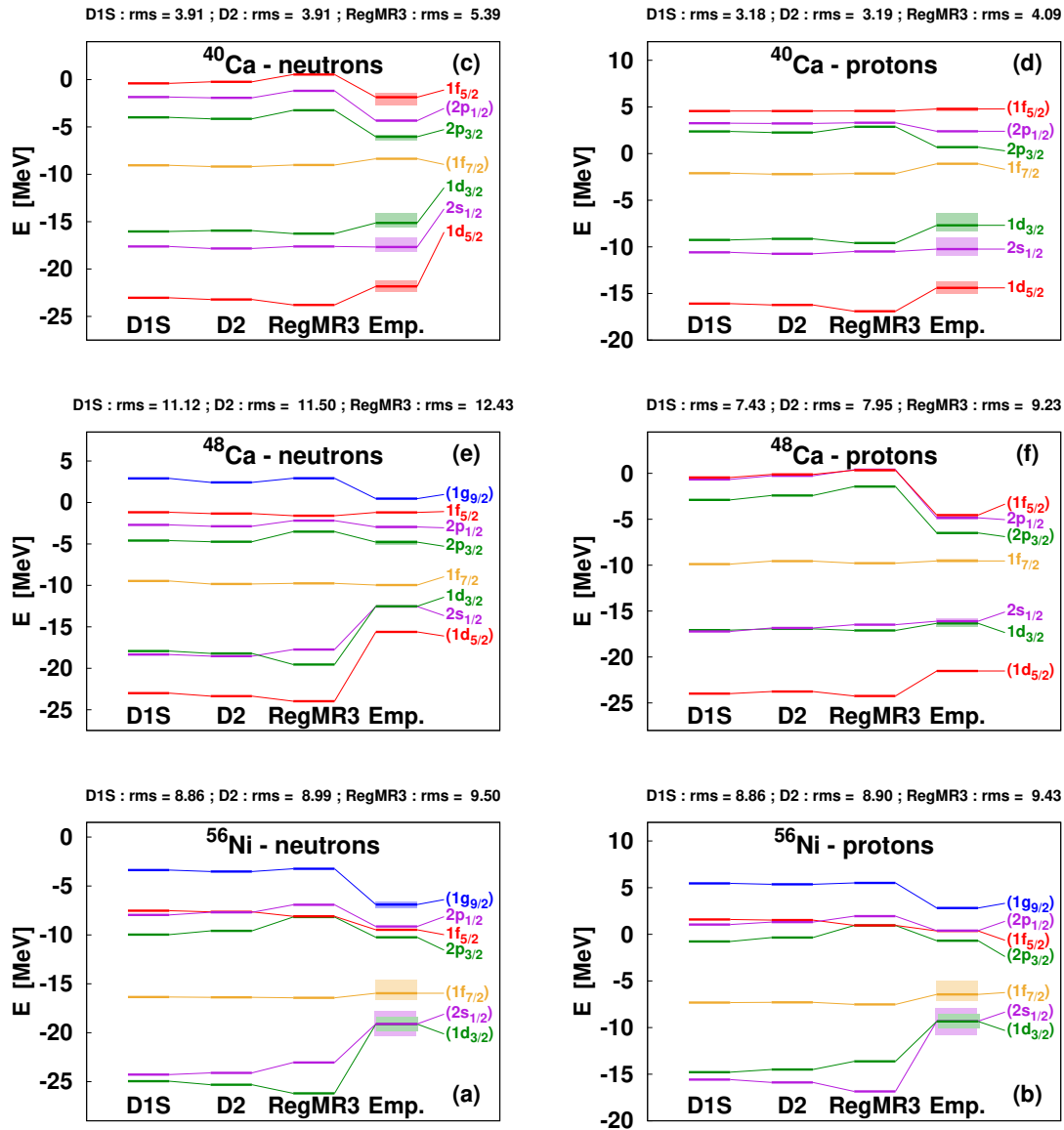


FIGURE 9.4 – Spectres d'énergies de particules individuelles des ^{40}Ca , ^{48}Ca et du ^{56}Ni pour les trois paramétrisations D2, D1S et RegMR3, à gauche pour les neutrons et à droite pour les protons.

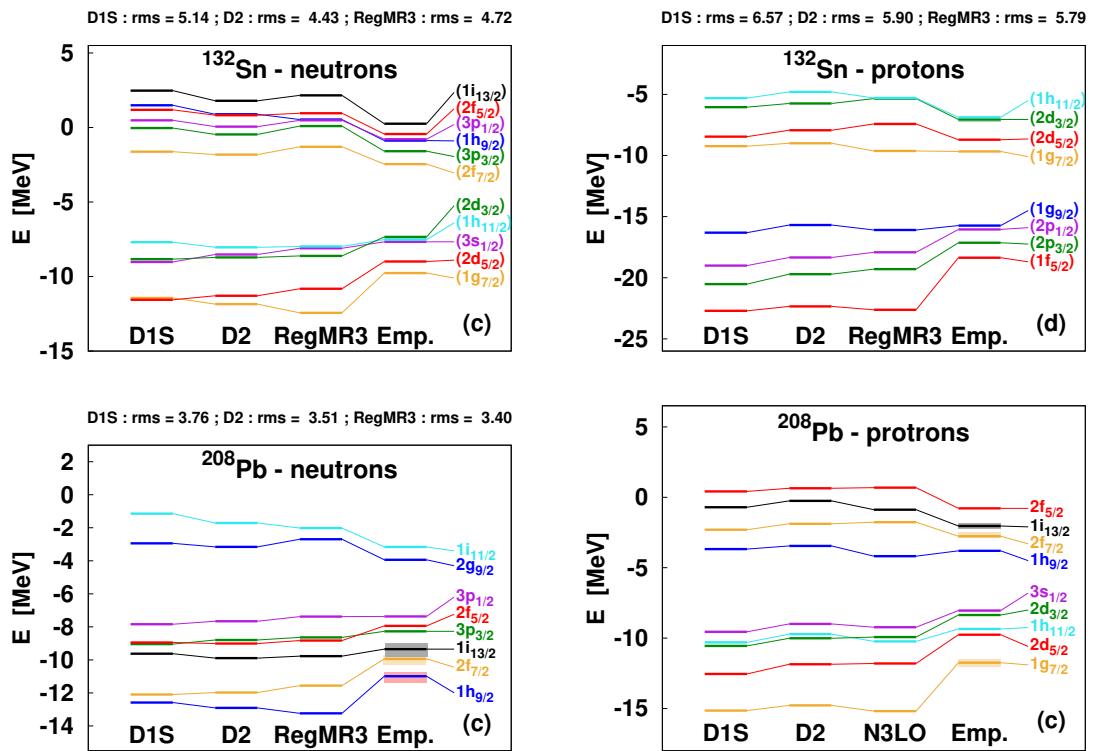


FIGURE 9.5 – Spectres d'énergies de particules individuelles du ^{132}Sn et du ^{208}Pb pour les trois paramétrisations D2, D1S et RegMR3, à gauche pour les neutrons et à droite pour les protons.

9.3 Densités dans les noyaux

Le protocole d'ajustement a été construit de sorte que RegMR3 ne présente pas d'instabilités scalaires-isovectorielles. Nous pouvons être relativement confiants sur ce point car nous n'avons pas rencontré de problèmes de convergence dans l'ensemble des calculs que nous avons faits. Comme nous avons émis l'hypothèse qu'il existait une corrélation entre la présence (ou la proximité) d'instabilités et l'allure des profils des densités, nous allons discuter de quelques profils de densité de charge. Cette fois, nous allons cependant nous limiter à des noyaux pour lesquels des données sont disponibles.

Pour le ^{40}Ca et le ^{48}Ca dont les densités sont représentées sur les figures 9.6 et 9.7, on constate que la densité de charge est légèrement mieux reproduite avec RegMR3 qu'avec D1S dans le ^{40}Ca et aussi bien qu'avec D2 dans le ^{48}Ca . Pour ce qui est des densités isovectorielles ρ_1 , on voit un comportement obtenu avec RegMR3 très différent de ceux obtenus avec D2 ou D1S dans le ^{48}Ca (la densité isovectorielle est pratiquement égale à 0 au centre du noyau avec RegMR3). Ceci s'explique probablement par la contrainte mise sur la densité isovectorielle du ^{60}Ca comme nous en avons discuté au chapitre précédent.

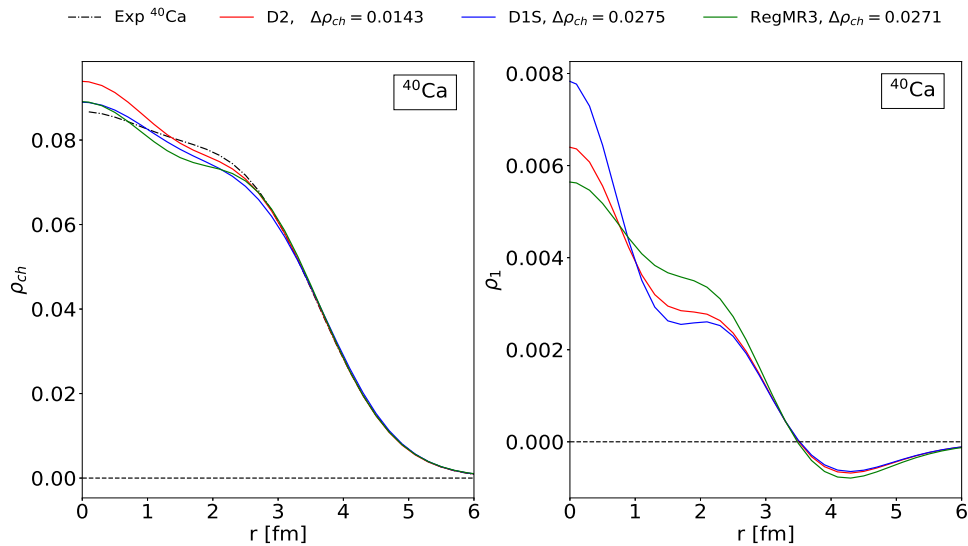


FIGURE 9.6 – Sur la figure de gauche est présenté le profil de la densité de charge pour le ^{40}Ca . La densité isovectorielle est représenté à droite.

La densité de charge dans le ^{60}Ni est à priori moins bien reproduite avec RegMR3 qu'avec D2 ou D1S, avec une déviation mesurée par $\Delta\rho_{ch}$ presque deux fois plus grande pour RegMR3 que pour D1S ou D2. Il faut cependant relativiser ce résultat. En effet, on constate que la densité prédite par RegMR3 dans le volume du noyau est en moyenne assez éloignée de la densité expérimentale mais, comme cette dernière, elle est relativement constante alors que D2 et D1S qui sont plus proche en moyenne donnent un maximum au centre et une assez forte oscillation. On peut également souligner une fois de plus que les données sont dépourvues de barres d'erreur. Pour ce qui est de la densité isovectorielle, on voit que son amplitude est bien plus faible pour RegMR3 que pour D2 ou D1S ce qui

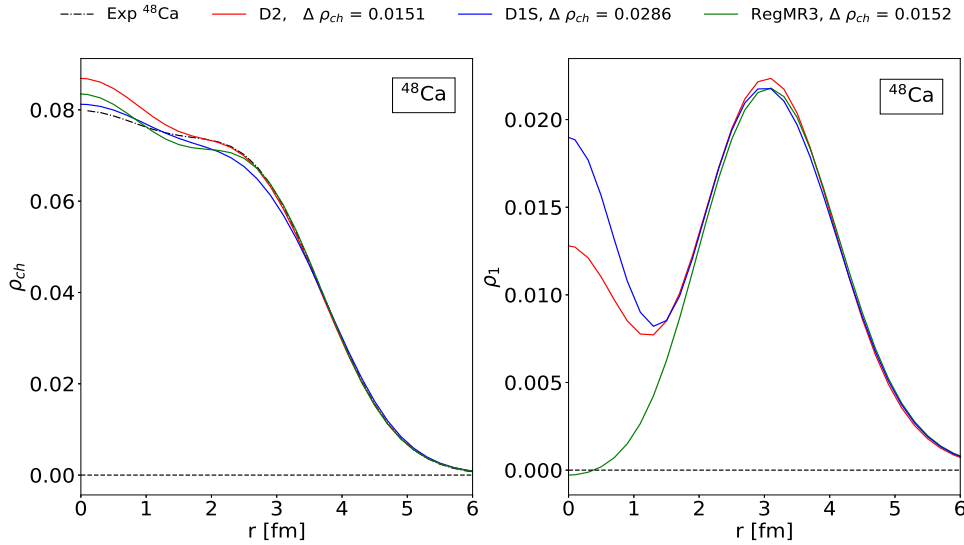


FIGURE 9.7 – Sur la figure de gauche est présenté le profil de la densité de charge pour le ^{48}Ca . La densité isovectorielle est représenté à droite.

est probablement le signe que les éventuelles instabilités isovectorielles sont bien contrôlées pour RegMR3.

La distribution de charge dans le noyau de ^{90}Zr est globalement aussi bien reproduite par RegMR3 que pour D2 ou D1S comme le montre la figure 9.9.

Finalement, les résultats pour le plomb 208, représentés sur la figure 9.10, sont globalement moins bons avec RegMR3 qu’avec D2 ou D1S (ce qui semble être dû à une légère déplétion juste avant la surface du noyau) mais on peut tout de même remarquer que RegMR3 et D2 ne donne pas un écart par rapport aux données aussi grand que D1S au centre du noyau. La partie droite de la figure montre que cet écart est corrélé à la valeur de la densité isovectorielle au centre.

Pour conclure ce paragraphe, on peut dire que les contraintes utilisées pour tenter d’éviter les instabilités isovectorielles avec RegMR3 donnent une interaction qui prédit des densités isovectorielles ayant des amplitudes plus faibles que celles obtenues avec D2 ou D1S.

9.3.1 Gouttelettes de neutrons

Comme dans le chapitre 5, nous allons utiliser cette nouvelle interaction pour calculer les propriétés de gouttelettes de neutrons. Cette partie présente un intérêt particulier et représente un test important puisque la valeur de la pente de l’énergie de symétrie L obtenue avec RegMR3 est trop faible mais l’équation d’état fournie par cette paramétrisation ne s’effondre pas à haute densité. Les résultats sont représentés sur la figure 9.11.

Pour commencer, on voit que tous les calculs pour des gouttelettes dans un potentiel avec $\hbar\omega = 5$ MeV ont convergé. Pour un potentiel avec $\hbar\omega = 10$ MeV, certains calculs n’ont par contre pas convergé.

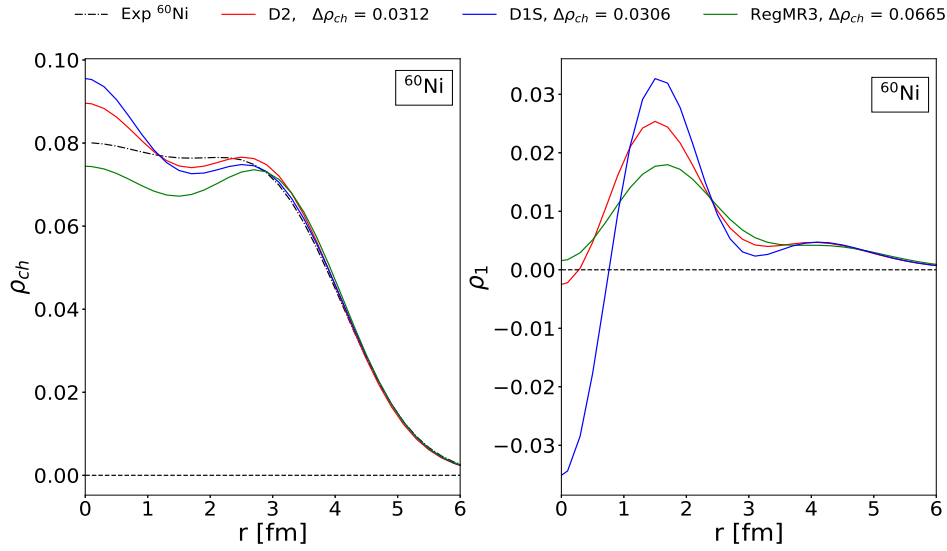


FIGURE 9.8 – Sur la figure de gauche est présenté le profil de la densité de charge pour le ^{60}Ni . La densité isovectorielle est représenté à droite.

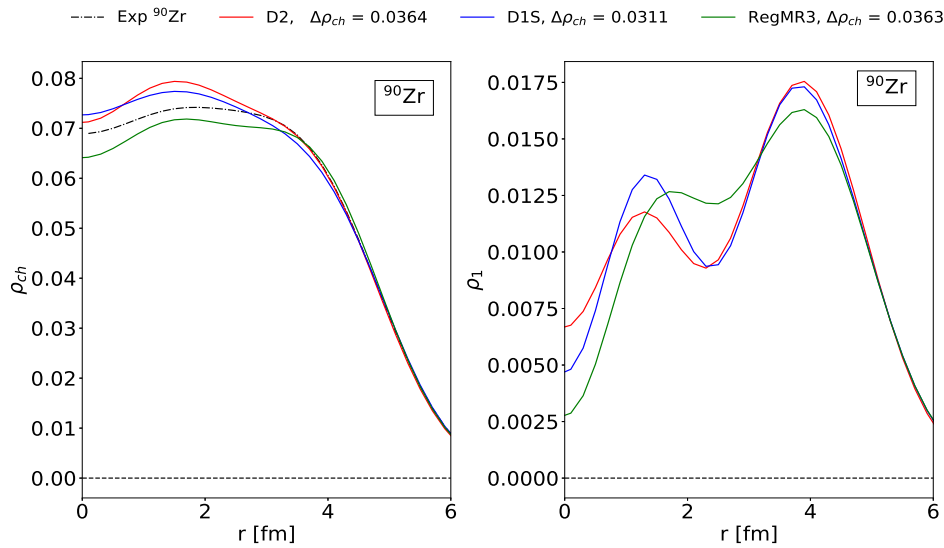


FIGURE 9.9 – Sur la figure de gauche est présenté le profil de la densité de charge pour le ^{90}Zr . La densité isovectorielle est représenté à droite.

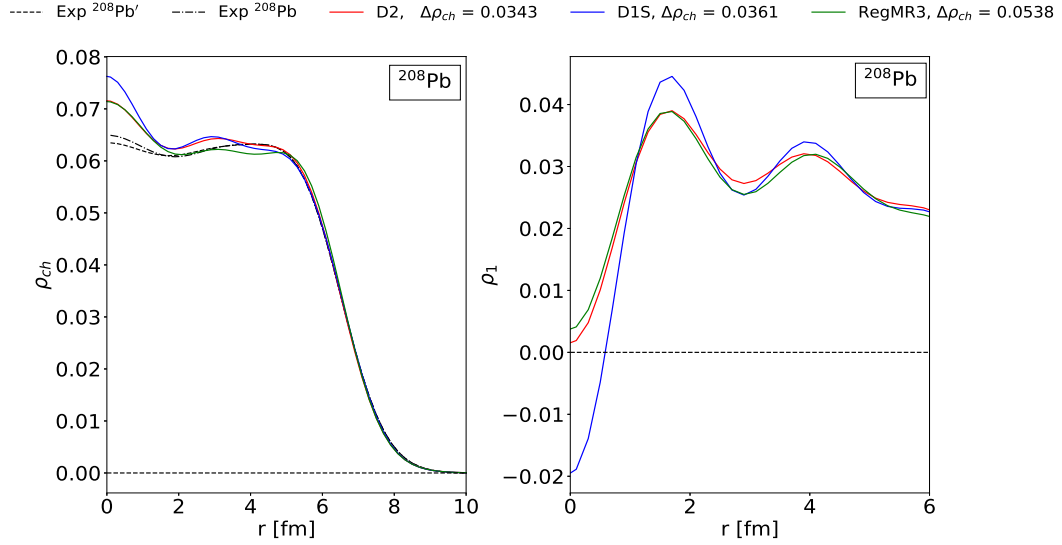


FIGURE 9.10 – Sur la figure de gauche est présenté le profil de la densité de charge pour le ^{208}Pb . La densité isovectorielle est représenté à droite.

On constate cependant, que ce soit avec $\hbar\omega = 5$ MeV ou 10 MeV, que les résultats ne sont absolument pas en accord avec les prédictions des calculs ab-initio et très loin de ce que D1S et D2 donnent dans les cas où ces interactions donnent des résultats qui convergent. On observe cependant, en particulier avec $\hbar\omega = 5$ MeV, que le désaccord est moins important lorsque le nombre de neutrons est égal à un nombre magique, c'est à dire lorsque l'appariement devient faible ou disparaît.

L'origine de ces désaccords très importants obtenus avec RegMR3 vient du fait que les gaps moyens neutrons sont beaucoup trop importants pour les gouttelettes (de l'ordre de 3 MeV environ avec D2 ou D1S et 9 MeV avec RegMR3). Pour comprendre le mécanisme qui donne de tels gaps moyens, on peut rappeler que, dans le cas des interactions de Gogny, la densité d'énergie dans le canal d'appariement ne contient que des termes quadratiques en densité anormale, c'est à dire des termes du type :

$$\tilde{\rho}_q(r, r')\tilde{\rho}_q(r', r), \quad (9.2)$$

(avec $q = n$ ou p). L'évolution de l'intensité de l'appariement avec l'isospin ne sera donc pas trop importante car essentiellement dominée par l'évolution du champ moyen de Hartree-Fock.

La densité d'énergie obtenue dans le canal d'appariement avec RegMR3 est par contre plus complexe. Elle contient des termes similaires à (9.2) mais également des contributions du terme à 3 corps qui sont répulsifs et de la forme :

$$\rho_{\bar{q}}(r)\tilde{\rho}_q(r, r')\tilde{\rho}_q(r', r), \quad (9.3)$$

avec $q = n$ et $\bar{q} = p$ ou l'inverse. Ces termes donnent une contribution repulsive maximale dans la matière symétrique mais disparaissent dans la matière de neutrons.

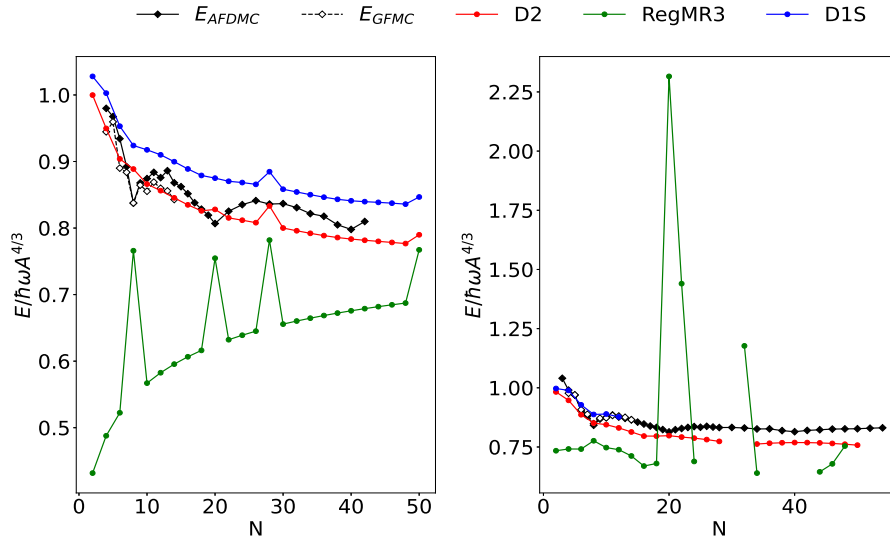


FIGURE 9.11 – Énergie des gouttelettes de neutrons piégées dans un potentiel harmonique de $\hbar\omega = 5$ MeV à gauche et 10 MeV à droite.

Comme l'appariement a été ajusté de manière à donner des gaps moyens raisonnables dans les noyaux, là où les deux contributions (9.2) et (9.3) sont présentes, il est inévitable qu'il soit beaucoup plus fort dans les gouttelettes là où la contribution répulsive (9.3) disparaît.

Nous évoquerons dans la conclusion de ce chapitre une piste envisageable pour corriger ce défaut.

9.4 Calculs pour des noyaux sphériques

9.4.1 Énergies de liaison et dérive isotopique

Comme dans la partie 1, nous avons calculé 214 noyaux supposés sphériques et comparé les résultats avec ceux obtenus avec D2 et D1S (il est important de rappeler que ces deux interactions ne sont pas censées être utilisées à l'approximation du champ moyen pour calculer des énergies de liaison totales de noyaux, même si ce type de calcul est fréquemment fait). Les résultats donnés sur la figure 9.12 sont plutôt encourageants puisque RegMR3 permet d'obtenir des prédictions significativement meilleures que celles données par D1S et D2 avec un écart moyen de 0,0016 MeV et une déviation standard de 2,438 MeV. On constate également que l'interaction D2 sous-estime plus les énergies totales des noyaux considérées par rapport à D1S ou RegMR3, les écarts moyens pour ces deux dernières interactions étant voisins de 0 MeV.

Nous avons aussi étudié la dérive isotopique des énergies de liaison. Il est connu que l'interaction D1S donne une assez forte dérive des résidus d'énergies de liaison avec l'augmentation de l'asymétrie des noyaux. La figure 9.13 représente les résidus d'énergies de liaison en fonction du paramètre d'asymétrie I pour l'ensemble des noyaux calculés. On

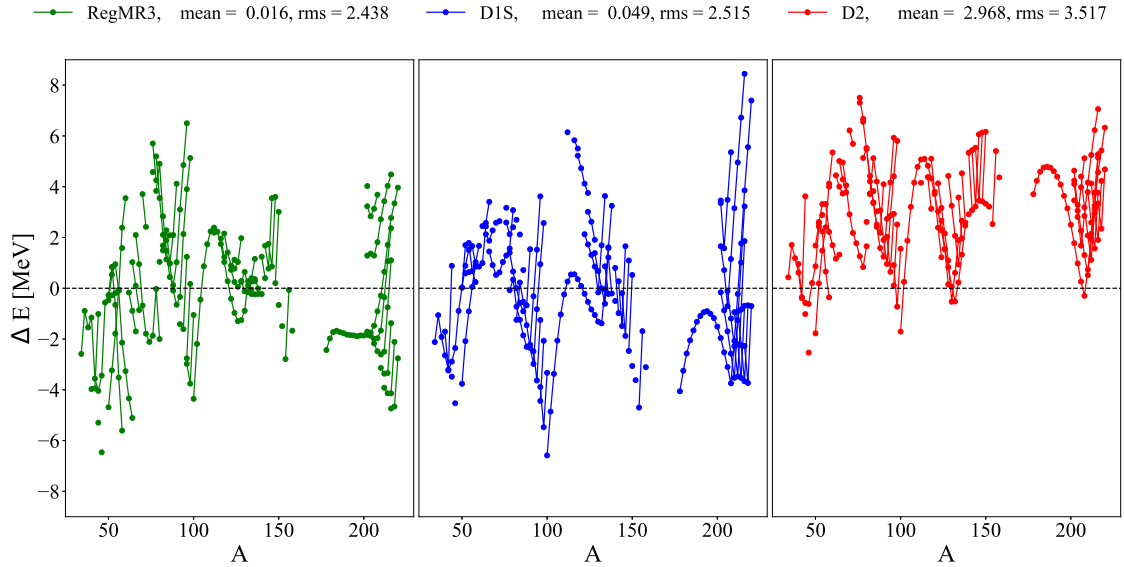


FIGURE 9.12 – Résidus des énergies de liaison de 214 noyaux sphériques en fonction de A . Les résultats sont donnés pour RegMR3, D1S et D2.

constate que RegMR3 donne une dérive avec l'asymétrie moins importante que celle obtenue avec D1S. L'interaction D2 semble, quant à elle, donner une évolution avec l'asymétrie qui ne dérive que très peu.

Sur la figure 9.14, nous avons spécifiquement représenté les résidus d'énergie de liaison pour les trois séries isotopique des calciums ${}^A\text{Ca}$, des étains ${}^A\text{Sn}$ et des plombs ${}^A\text{Pb}$ mais cette fois en fonction du nombre de neutrons N . En observant les distributions des résultats autour de 0, on constate que RegMR3 donne de meilleurs résultats que D2 ou D1S.

Dans les ${}^A\text{Ca}$ les trois paramétrisations donnent des comportements qui sont qualitativement assez semblables avec une diminution des résidus au voisinage de $N = 24$ sans doute dû au fait que l'appariement est assez intense dans la couche $1f_{7/2}$ puis une « arche » au-delà de $N = 28$. Les phénomènes d'arches ancrés sur les nombres magiques $N = 50, 82$ et 126 visibles dans les étains et dans les plombs avec D1S et D2 sont largement atténués avec RegMR3. Cette atténuation est sans doute due à l'appariement plus qui est plus intense pour les neutrons avec RegMR3 (comme nous le discuterons dans le paragraphe suivant) et à son augmentation avec l'asymétrie dans la direction des noyaux riches en neutrons.

Nous avons ensuite décidé de regarder plus en détail les résultats concernant la valeur moyenne des gaps pour les protons et les neutrons pour l'ensemble des noyaux considéré dans ce paragraphe. Nous rappelons que le gap moyen pour les nucléons d'une espèce q peu être estimé à partir du calcul HFB dans un noyau pair-pair par la formule

$$\langle \Delta \rangle_q = -\frac{1}{N_q} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' \tilde{h}_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') \rho_q(\mathbf{r}'\sigma', \mathbf{r}\sigma), \quad (9.4)$$

avec \tilde{h}_q le champ d'appariement et N_q le nombre de nucléons de l'espèce q .

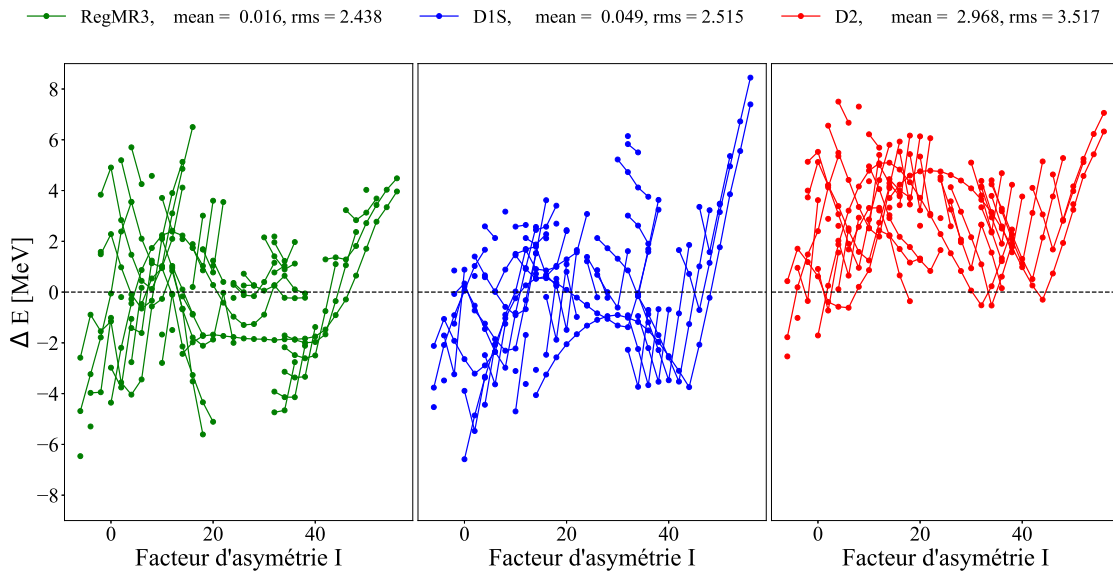


FIGURE 9.13 – Résidus des énergies de liaison pour les 214 noyaux sphériques en fonction du facteur d'asymétrie I .

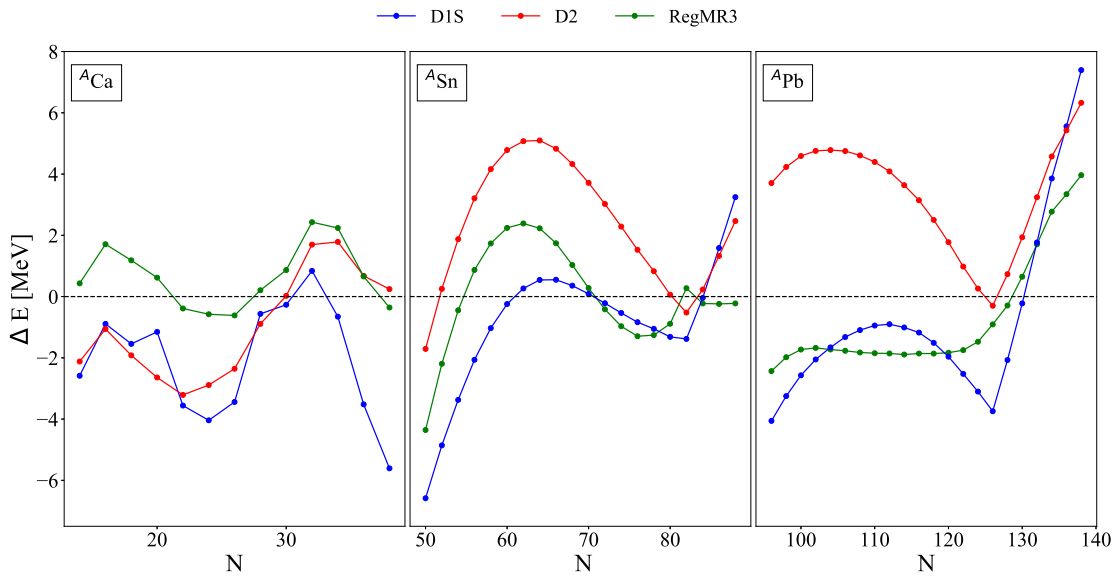


FIGURE 9.14 – Résidus des énergies de liaison pour les séries isotopiques des calcium, des étains et des plombs en fonction du nombre de neutrons N .

D'après [120], les gaps moyens suivent schématiquement une évolution selon une loi en $12/\sqrt{A}$. Les résultats obtenus avec RegMR3, D2 et D1S ainsi que cette loi sont représentés sur la figure 9.15. Les noyaux avec un nombre magique de neutrons ne sont pas représentés sur la partie gauche de la figure et ceux avec un nombre magique de proton ne le sont pas sur la partie droite. On voit que les interactions D1S et D2 suivent assez bien la loi en $12/\sqrt{A}$. La valeur moyenne des gaps tombant cependant parfois à 0 pour les protons pour des noyaux non magiques en protons. On peut rappeler que l'appariement a été ajusté de manière très schématique pour l'interaction RegMR3 (comme cela a été discuté dans le chapitre 8). On constate cependant que les gaps moyens obtenus et leur évolution avec A sont raisonnables, même si les gaps moyens pour les neutrons sont significativement plus grand que ceux prédits par les interactions de Gogny et la loi empirique, en particulier pour les noyaux légers. On constate que l'appariement ne disparaît pour aucun des noyaux calculés ici avec RegMR3.

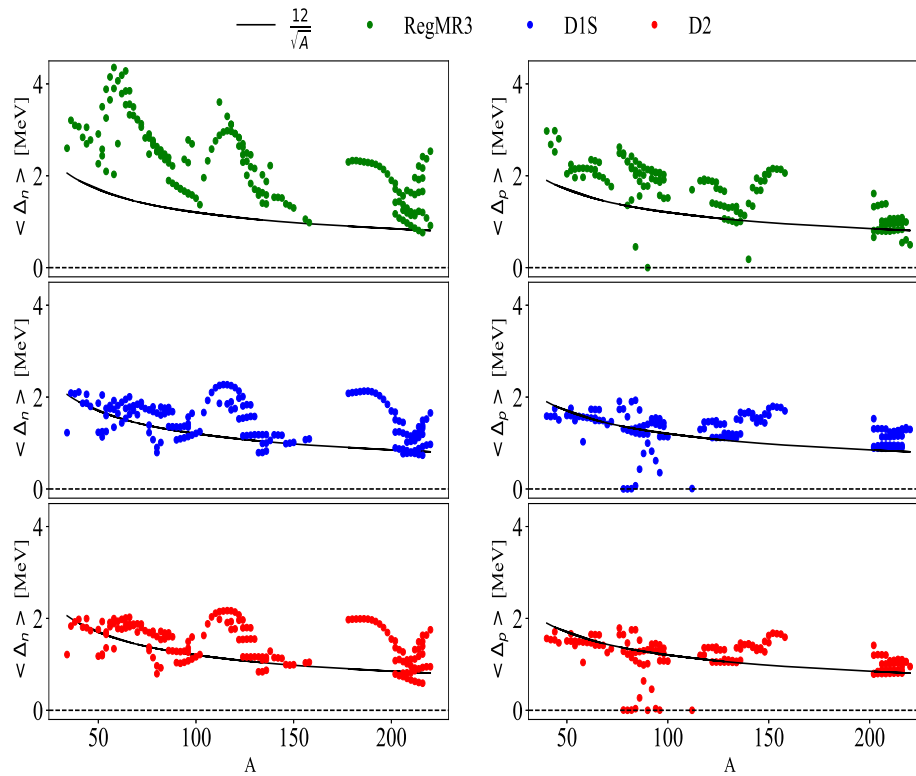


FIGURE 9.15 – Gaps moyens en fonction de A pour les neutrons à gauche et pour les protons à gauche pour les interactions RegMR3, D2 et D1S.

9.4.2 Rayons de charge

Pour finir, nous avons étudié les rayons de charge des séries isotopiques des calciums, des étains et des plombs, toujours avec les trois mêmes interactions. Les résultats représentés sur la figure 9.16 sont de nouveaux très encourageants puisque RegMR3 donne de meilleurs

prédictions que D2 et D1S pour les calciums et les plombs. En ce qui concerne les étains, RegMR3 donne des résultats qui sont meilleurs que ceux obtenus avec D1S et comparables à ceux obtenus avec D2.

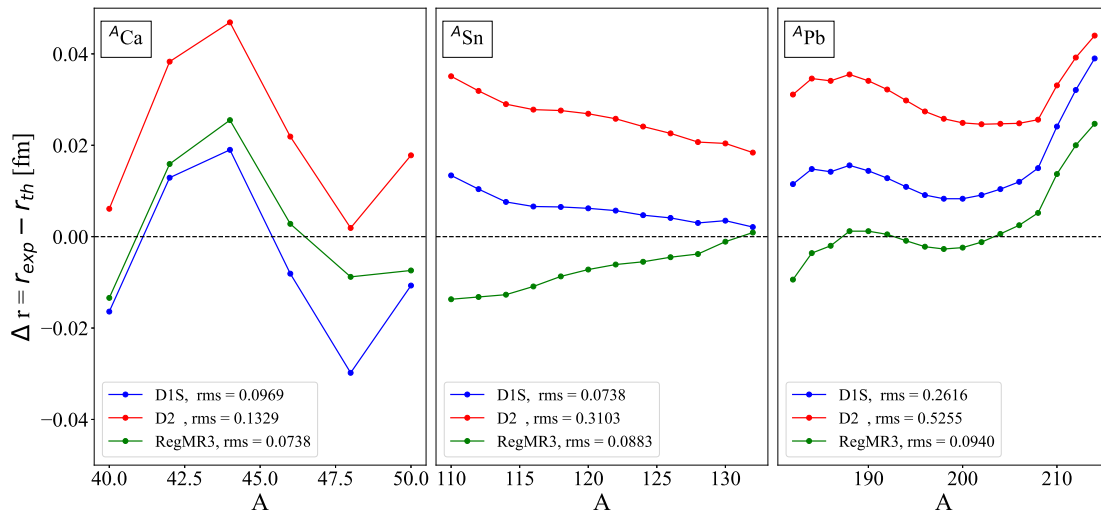


FIGURE 9.16 – Différences des rayons de charge dans les calciums, les étains et les plombs en fonction de A pour les interactions RegMR3, D2 et D1S.

9.5 Conclusion

Pour cette dernière partie nous avons montré des résultats concernant la matière infinie et des noyaux sphériques obtenus avec la première interaction, RegMR3, construite sans terme dépendant de la densité et contenant un terme à trois corps semi-régularisé. Cette interaction est utilisée de manière cohérente dans le canal particule-trou et le canal particule-particule. Nous avons obtenu des résultats à l'approximation du champ moyen globalement aussi bons que ceux obtenus avec D1S qui est une interaction effective couramment utilisée et que ceux obtenus avec D2 qui en est une amélioration avec un terme dépendant de la densité de portée finie.

L'absence d'instabilités de taille finie dans les canaux $S = 1$ n'a pas pu être vérifiée mais les calculs que nous avons faits semblent confirmer que cette interaction est stable dans les canaux $S = 0$.

Comme l'interaction RegMR3 ne contient pas de terme dépendant de la densité, elle peut être utilisée sans ambiguïtés pour tout type de calcul au-delà de l'approximation du champ moyen.

Il reste néanmoins des axes d'amélioration possible :

- (i) Cette interaction, à l'ordre N^3LO , contient un grand nombre de paramètres. L'utilisation d'une méthode d'analyse covariante [121] pourrait permettre de voir si certains paramètres correspondent à des directions qui ne sont pas pertinentes pour la fonction de mérite que nous avons construite. Une telle méthode permettrait également de calculer des barres d'erreur statistiques sur les paramètres et de les propager sur les observables calculées.
- (ii) L'ajustement des paramètres a été fait de manière assez grossière (en particulier en ce qui concerne le choix des portées, l'intensité de l'appariement et les différentes recettes utilisées pour tenter d'éviter les instabilités). Il serait intéressant de modifier le protocole d'ajustement afin d'améliorer certaines grandeurs caractéristiques de la matière infinie comme le module d'incompressibilité K_∞ , la pente de l'énergie de symétrie ou la masse effective à basse densité.
- (iii) L'appariement devrait être ajusté de manière plus fine. Ceci pourrait être fait en calculant et en contraignant l'équation du gap [122] dans la matière infinie durant l'ajustement des paramètres.
- (iv) Les gaps moyens gigantesques obtenus dans les gouttelettes de neutrons devront bien évidemment être corrigés. Une stratégie assez simple à mettre en œuvre pourrait consister à utiliser deux termes à trois corps semi-régularisés. Par exemple, un premier terme à l'ordre LO comme celui que nous avons utilisé dans ce travail et un second terme local et à l'ordre NLO qui pourrait être calculé simplement en utilisant la relation (8.5). Les deux termes à trois corps ainsi utilisés pourraient être contraints à se compenser (au moins partiellement) dans la matière symétrique ce qui permettrait d'avoir une interaction à deux corps moins attractive dans le canal d'appariement et ainsi de corriger les gaps moyens dans la matière et les gouttelettes de neutrons. La validité de cette méthode devra bien évidemment être vérifiée.
- (v) Nous n'avons pas envisagé l'utilisation d'un terme spin-orbite de portée finie (et éventuellement d'un terme tenseur, lui aussi de portée finie). Des calculs préliminaires

permettant d'implémenter ces termes dans nos programmes de calcul ont récemment été fait lors du stage de M2 de Kahina Kélaï et seront utilisés pour les prochaines version des interactions régularisées. Cette évolution permettra de prendre en compte l'interaction spin-orbite dans le canal d'appariement (sans introduire de *cut-off*) mais aussi (et surtout) de disposer d'un degré de liberté supplémentaire permettant d'ajuster l'évolution de la contribution de l'interaction spin-orbite au champ moyen en fonction de l'isospin.

Une difficulté importante que nous risquons de rencontrer sera également sans doute de convaincre nos collègues d'implémenter ce type d'interactions dans les codes dont ils disposent et qui permettent de faire des calculs en deux (ou trois) dimensions à l'approximation du champ moyen et au-delà...

Conclusion générale

Au cours de cette thèse nous avons exploré les différentes formes d'interaction effective non-relativiste à l'approximation du champ moyen. Nous avons commencé avec l'interaction de Skyrme pour étudier les propriétés des noyaux déformés. Ceci nous a permis de mettre en évidence le fait que la prise en compte de la correction du mouvement du centre de masse pouvait permettre d'obtenir une valeur de $a_{\text{surf}}^{\text{MTF}}$ compatible avec l'intervalle de valeurs permettant une bonne reproduction des barrières de fission. Il s'avère que le choix qui a souvent été fait consistant à ne prendre que la partie à un corps de la correction du mouvement du centre de masse est le moins pertinent.

Si aucune contrainte n'est mise sur la valeur du coefficient d'énergie de surface pour une interaction ajustée uniquement avec la partie à un corps, alors le coefficient d'énergie de surface devient trop grand. De ce fait, il vaut mieux traiter en intégralité la correction du mouvement du centre de masse puisque le terme à un corps, seul, n'apporte pas d'améliorations sur les prédictions d'observables. La solution consistant à totalement négliger la correction du mouvement du centre de masse n'est en fait pas un plus mauvais choix que de se limiter à la partie à un corps.

Cette étude nous a permis de construire la nouvelle paramétrisation SLy7s1 qui donne des résultats aussi bons si ce n'est meilleurs que SLy5s1 pour les déformations et qui permet des prédictions pour les énergies de liaison plus proches de l'expérience. Nous nous sommes aussi assurés que cette paramétrisation était utilisable pour des systèmes brisant la symétrie par renversement du temps (c'est à dire dans les canaux $S = 1$).

Dans la seconde partie de cette thèse nous avons étudié les interactions de Gogny et plus particulièrement l'interaction D2. Nous avons vu que plusieurs paramétrisations de l'interaction standard de Gogny menaient à des instabilités de taille finie scalaires-isovectorielles. Ces manifestations ont été mises en évidence par l'observation d'oscillations de forte amplitude de la densité isovectorielle dans les noyaux. Ceci est en accord avec les analyses qui ont été effectuées à l'aide d'un code de réponse linéaire pour identifier la position de la densité critique pour chaque paramétrisation. Il s'avère que ces instabilités sont souvent passées inaperçues à cause de l'utilisation d'une base d'oscillateur harmonique pour représenter les fonctions d'onde individuelles. Cette représentation est couramment utilisée car elle présente l'avantage de pouvoir réduire le temps de calcul par rapport à un calcul sur un réseau mais ceci a pour effet de masquer les divergences (en les « régularisant »). La petite valeur de la pente de l'énergie de symétrie L est un défaut des paramétrisations de Gogny souvent pointé du doigt. Lors de notre étude sur les gouttelettes de neutrons nous avons vu que les paramétrisations avec les plus grandes valeurs de L étaient celles le plus à même de reproduire ces systèmes. Or il s'avère que ce sont aussi celles qui présentent le plus d'instabilités.

Cependant avec le passage d'une dépendance en densité de portée nulle à une portée finie, il est possible d'obtenir une augmentation de la pente de l'énergie de symétrie tout en conservant une interaction stable comme le montre l'interaction D2 qui est au final la seule interaction de Gogny en mesure de reproduire à la fois des noyaux et des gouttelettes sans présenter d'instabilité.

Notre étude consacrée à l'interaction D2 a surtout eu pour but de nous donner la possibilité de nous familiariser avec la forme de sa fonctionnelle avant de passer à l'implémentation d'un terme à trois corps semi-régularisé. Les résultats concernant la nouvelle interaction RegMR3 sont très encourageants. Nous avons été en mesure de construire une

interaction au moins aussi prédictive (pour les systèmes étudiés) que D1S et D2 à l'approximation du champ moyen. Le point le plus important est que cette interaction n'a pas de dépendance en densité et aucune instabilité de taille finie n'a été observée dans les canaux $S = 0$.

Nous avons donc construit la première interaction contenant un terme à trois corps, reproduisant correctement les propriétés de la matière infinie (notamment la valeur de la masse effective), donnant un appariement suffisamment intense dans les noyaux et avec laquelle les calculs au-delà du champ moyen sont possibles sans ambiguïtés ou problèmes formels. Certaines propriétés de cette interaction doivent cependant être améliorées.

En effet, cette interaction présente beaucoup de paramètres (22) ce qui est peu satisfaisant. Une analyse covariante pourrait nous permettre d'identifier les paramètres dont la contribution à la fonction de mérite ne semble pas pertinente. Ceci pourrait nous donner la possibilité de réévaluer le protocole d'ajustement qui pourrait être éventuellement plus satisfaisant pour des ordres plus petits et donc contenant moins de paramètres. En outre, nous avons pu constater que les corrélations d'appariement étaient trop fortes pour permettre une description raisonnable de certaines propriétés de systèmes nucléaires comme les gouttelettes de neutrons. Ce problème semble pouvoir être résolu en ajoutant l'équation de gap dans la matière symétrique mais aussi en considérant une version NLO pour la partie à trois corps. Nous avons également obtenu une valeur pour la pente de l'énergie de symétrie L bien en dessous des valeurs estimées malgré une équation d'état qui ne s'effondre pas à haute densité.

Il reste encore du chemin à parcourir avant d'obtenir une interaction satisfaisante mais ce premier ajustement laisse à penser que cette direction peut nous mener à une interaction permettant un calcul complet et satisfaisant au-delà du champ moyen.

Annexes

Constantes de couplage de l'interaction RegMR3

Dans cette première annexe nous donnons l'expression des constantes de couplage de l'interaction RegMR3. Les constantes pour la partie à deux corps sont les suivantes :

$$A_k^{\rho_0} = \frac{1}{2}W_k + \frac{1}{4}B_k - \frac{1}{4}H_k - \frac{1}{8}M_k , \quad (\text{A.1})$$

$$A_k^{\rho_1} = -\frac{1}{4}H_k - \frac{1}{8}M_k , \quad (\text{A.2})$$

$$A_k^{\text{s}_0} = \frac{1}{4}B_k - \frac{1}{8}M_k , \quad (\text{A.3})$$

$$A_k^{\text{s}_1} = -\frac{1}{8}M_k , \quad (\text{A.4})$$

$$B_k^{\rho_0} = -\frac{1}{8}W_k - \frac{1}{4}B_k + \frac{1}{4}H_k + \frac{1}{2}M_k , \quad (\text{A.5})$$

$$B_k^{\rho_1} = -\frac{1}{8}W_k - \frac{1}{4}B_k , \quad (\text{A.6})$$

$$B_k^{\text{s}_0} = -\frac{1}{8}W_k + \frac{1}{4}H_k , \quad (\text{A.7})$$

$$B_k^{\text{s}_1} = -\frac{1}{8}W_k , \quad (\text{A.8})$$

$$C_k^{\tilde{\rho}} = \frac{1}{4}W_k - \frac{1}{4}B_k - \frac{1}{4}H_k + \frac{1}{4}M_k , \quad (\text{A.9})$$

$$B_k^{\tilde{\text{s}}} = \frac{1}{4}W_k + \frac{1}{4}B_k - \frac{1}{4}H_k - \frac{1}{4}M_k . \quad (\text{A.10})$$

Pour la partie à trois corps on a :

$$A_3^{\rho_0} = \frac{1}{8}W_3 , \quad (\text{A.11})$$

$$A_3^{\rho_1} = -\frac{1}{8}W_3 , \quad (\text{A.12})$$

$$A_3^{\text{s}0} = \frac{1}{24}W_3 , \quad (\text{A.13})$$

$$A_3^{\text{s}1} = -\frac{24}{8}W_3 , \quad (\text{A.14})$$

$$B_3^{\rho_0} = -\frac{1}{16}W_3 , \quad (\text{A.15})$$

$$B_3^{\rho_1} = \frac{1}{8}W_3 , \quad (\text{A.16})$$

$$B_3^{\text{s}0} = -\frac{1}{24}W_3 , \quad (\text{A.17})$$

$$B_3^{\text{s}1} = \frac{24}{8}W_3 , \quad (\text{A.18})$$

$$C_3^{\tilde{\rho}} = \frac{1}{4}W_3 , \quad (\text{A.19})$$

$$B_3^{\tilde{\text{s}}} = \frac{12}{8}W_3 . \quad (\text{A.20})$$

$$(\text{A.21})$$



Densités et transformations

Contents

B.1 Densités et propriétés de base	125
B.1.1 Densité normale	125
B.1.2 Densité anormale	127

B.1 Densités et propriétés de base

La plupart des calculs qui ont été effectués au cours de cette thèse concernaient des systèmes invariant sous la symétrie du renversement du temps. Dans cette annexe nous allons étudier comment la densité normale et la densité d'appariement se comportent sous cette symétrie.

B.1.1 Densité normale

Nous avons introduit au premier chapitre la densité à un corps (1.12) :

$$\begin{aligned}
\rho(r_1\sigma_1q_1, r_2\sigma_2q_2) &= \langle \phi | a^\dagger(r_2\sigma_2q_2) a(r_1\sigma_1q_1) | \phi \rangle \\
\rho^*(r_1\sigma_1q_1, r_2\sigma_2q_2) &= \langle \phi | a^\dagger(r_1\sigma_1q_1) a(r_2\sigma_2q_2) | \phi \rangle \\
\rho^*(r_1\sigma_1q_1, r_2\sigma_2q_2) &= \rho(r_2\sigma_2q_2, r_1\sigma_1q_1) .
\end{aligned}
\tag{B.1}$$

Renversement du temps

Commençons par définir comment se transforme les opérateurs de création et d'annihilation sous T :

$$T^\dagger a^\dagger(r\sigma) T = -2\sigma a^\dagger(r - \sigma) , \tag{B.2}$$

$$T^\dagger a(r\sigma) T = -2\sigma a(r - \sigma) . \tag{B.3}$$

Avec ces définitions, la densité normale va se transformer sous T comme ci-dessous :

$$\begin{aligned}
 \rho^T(r_1\sigma_1q_1, r_2\sigma_2q_2) &= \langle \phi | T^\dagger a^\dagger(r_2\sigma_2q_2) a(r_1\sigma_1q_1) T | \phi \rangle \\
 &= \langle \phi | T^\dagger a^\dagger(r_1\sigma_1q_1) T T^\dagger a(r_2\sigma_2q_2) T | \phi \rangle^* \\
 &= 4\sigma_1\sigma_2 \langle \phi | a^\dagger(r_1 - \sigma_1q_1) a(r_2 - \sigma_2q_2) | \phi \rangle^* , \tag{B.4}
 \end{aligned}$$

ce qui nous conduit à :

$$\begin{aligned}
 \rho^T(r_1\sigma_1q_1, r_2\sigma_2q_2) &= 4\sigma_1\sigma_2\rho^*(r_1 - \sigma_1q_1, r_2 - \sigma_2q_2) \\
 &= 4\sigma_1\sigma_2\rho(r_2 - \sigma_2q_2, r_1 - \sigma_1q_1) . \tag{B.5}
 \end{aligned}$$

Nous pouvons maintenant étudier comment les différentes parties de la densité normale vont être impactées par cette transformation :

Densité scalaire-isoscalaire :

$$\begin{aligned}
 \rho_0^T(r_1, r_2) &= \sum_{\sigma q} \rho^T(r_1\sigma q, r_2\sigma q) \\
 &= \sum_{\sigma q} 4\sigma\sigma\rho^*(r_1 - \sigma q, r_2 - \sigma q) \\
 &= \sum_{\sigma q} \rho^*(r_1 - \sigma q, r_2 - \sigma q) \\
 &= \sum_{\sigma q} \rho(r_2 - \sigma q, r_1 - \sigma q) \\
 \rho_0^T(r_1, r_2) &= \rho_0(r_2, r_1) \\
 \rho_0^T(r) &= \rho_0(r) . \tag{B.6}
 \end{aligned}$$

Densité scalaire-isovectorielle :

$$\begin{aligned}
 \rho_1^T(r_1, r_2) &= \sum_{\sigma q_1 q_2} \rho^T(r_1\sigma q_1, r_2\sigma q_2) \langle q_2 | \hat{\tau}_z | q_1 \rangle \\
 &= \sum_{\sigma q_1 q_2} 4\sigma\sigma\rho^*(r_1 - \sigma q, r_2 - \sigma q) \langle q_2 | \hat{\tau}_z | q_1 \rangle \\
 &= \sum_{\sigma q_1 q_2} \rho^*(r_1 - \sigma q, r_2 - \sigma q) \langle q_2 | \hat{\tau}_z | q_1 \rangle \\
 &= \sum_{\sigma q_1 q_2} \rho(r_2 - \sigma q, r_1 - \sigma q) \langle q_2 | \hat{\tau}_z | q_1 \rangle \tag{B.7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \rho_1^T(r_1, r_2) &= \rho_1(r_2, r_1) \\
 \rho_1^T(r) &= \rho_1(r) . \tag{B.8}
 \end{aligned}$$

Densités vectorielle-isoscalaire :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{s}_0^T(r_1, r_2) &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q} \rho^T(r_1 \sigma_1 q, r_2 \sigma_2 q) \langle \sigma_2 | \hat{\sigma} | \sigma_1 \rangle \\
 &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q} 4\sigma_1 \sigma_2 \rho^*(r_1 - \sigma_1 q, r_2 - \sigma_2 q) \langle \sigma_2 | \hat{\sigma} | \sigma_1 \rangle \\
 &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q} 4\sigma_1 \sigma_2 \rho^*(r_1 \sigma_1 q, r_2 \sigma_2 q) \langle -\sigma_2 | \hat{\sigma} | -\sigma_1 \rangle \\
 &= - \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q} \rho^*(r_1 \sigma_1 q, r_2 \sigma_2 q) \langle -\sigma_2 | \hat{\sigma} | -\sigma_1 \rangle^* \\
 &= - \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q} \{ \rho(r_1 \sigma_1 q, r_2 \sigma_2 q) \langle -\sigma_2 | \hat{\sigma} | -\sigma_1 \rangle \}^* \\
 \mathbf{s}_0^T(r_1, r_2) &= -\mathbf{s}_0(r_2, r_1) \\
 \mathbf{s}_0^T(r) &= -\mathbf{s}_0(r) = 0 .
 \end{aligned} \tag{B.9}$$

Ici nous avons utilisé la relation : $4\sigma\sigma' \langle \sigma' | \hat{\sigma} | \sigma \rangle^* = -\langle \sigma' | \hat{\sigma} | \sigma \rangle$

Densités vectorielle-isovectorielle :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{s}_1^T(r_1, r_2) &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q_1 q_2} \rho^T(r_1 \sigma_1 q_1, r_2 \sigma_2 q_2) \langle \sigma_2 | \hat{\sigma} | \sigma_1 \rangle \langle \tau_2 | \hat{\tau}_z | \tau_1 \rangle \\
 &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q_1 q_2} 4\sigma_1 \sigma_2 \rho^*(r_1 - \sigma_1 q_1, r_2 - \sigma_2 q_2) \langle \sigma_2 | \hat{\sigma} | \sigma_1 \rangle \\
 &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q_1 q_2} 4\sigma_1 \sigma_2 \rho^*(r_1 \sigma q, r_2 \sigma q) \langle -\sigma_2 | \hat{\sigma} | -\sigma_1 \rangle \\
 &= - \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q_1 q_2} \rho^*(r_1 \sigma_1 q_1, r_2 \sigma_2 q_2) \langle -\sigma_2 | \hat{\sigma} | -\sigma_1 \rangle^* \langle \tau_2 | \hat{\tau}_z | \tau_1 \rangle \\
 &= - \sum_{\sigma_1 \sigma_2 q_1 q_2} \{ \rho(r_1 \sigma_1 q_1, r_2 \sigma_2 q_2) \langle -\sigma_2 | \hat{\sigma} | -\sigma_1 \rangle \}^* \langle \tau_2 | \hat{\tau}_z | \tau_1 \rangle \\
 \mathbf{s}_1^T(r_1, r_2) &= -\mathbf{s}_1(r_2, r_1) \\
 \mathbf{s}_1^T(r) &= -\mathbf{s}_1(r) = 0 .
 \end{aligned} \tag{B.10}$$

Si on considère le système étudié comme étant invariant sous le renversement du temps ce qui correspond à $T|\psi\rangle = |\psi\rangle \longrightarrow \rho^T(r_1 \sigma_1 q_1, r_2 \sigma_2 q_2) = \rho(r_1 \sigma_1 q_1, r_2 \sigma_2 q_2)$ alors toutes les densités normales suivent les relations ci-dessous :

$$\rho_0(r_1, r_2) = \rho_0(r_2, r_1) , \quad \mathbf{s}_0(r_1, r_2) = -\mathbf{s}_0(r_2, r_1) , \quad \mathbf{s}_1(r_1, r_2) = -\mathbf{s}_1(r_2, r_1) , \tag{B.11}$$

$$\rho_1(r_1, r_2) = \rho_1(r_2, r_1) , \quad \mathbf{s}_0(r) = -\mathbf{s}_0(r) = 0 , \quad \mathbf{s}_1(r) = \mathbf{s}_1(r) = 0 . \tag{B.12}$$

B.1.2 Densité anormale

De même que pour la densité normale, nous allons étudier les transformations de la densité anormale d'appariement :

Nous repartons de la définition donnée par l'équation (1.12) et allons considérer la situation sans mélange entre les protons et les neutrons (1.14) :

$$\tilde{\rho}(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2) = -2\sigma_2 \langle \phi | a(r_2 - \sigma_2) a(r_1\sigma_1) | \phi \rangle \quad (\text{B.13})$$

$$-2\sigma_2 \tilde{\rho}(r_1\sigma_1, r_2 - \sigma_2) = \langle \phi | a(r_1\sigma_1) a(r_2\sigma_2) | \phi \rangle \quad (\text{B.14})$$

$$2\sigma_2 \tilde{\rho}^*(r_1\sigma_1, r_2 - \sigma_2) = \langle \phi | a^\dagger(r_1\sigma_1) a^\dagger(r_2\sigma_2) | \phi \rangle , \quad (\text{B.15})$$

$$\tilde{\rho}_q(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2) = 4\sigma_2\sigma_1 \tilde{\rho}_q(r_2 - \sigma_2, r_1 - \sigma_1) \quad (\text{B.16})$$

$$\tilde{\rho}_q(r_1\sigma_1, r_2 - \sigma_2) = -4\sigma_1\sigma_2 \tilde{\rho}_q(r_2\sigma_2, r_1 - \sigma_1) . \quad (\text{B.17})$$

Pour les densités anormales sans mélange nous aurons seulement les projections sur le spin :

$$\tilde{\rho}_q(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2) = \frac{1}{2} \{ \tilde{\rho}_q(r_1, r_2) \delta_{\sigma_1\sigma_2} + \tilde{\mathfrak{s}}_q(r_1, r_2) \langle \sigma_1 | \hat{\sigma} | \sigma_2 \rangle \} . \quad (\text{B.18})$$

Renversement du temps pour la densité anormale

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}^T(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2) &= -2\sigma_2 \langle \phi | T^\dagger(r_2 - \sigma_2) a(r_1\sigma_1) T | \phi \rangle \\ &= -2\sigma_2 \langle \phi | T^\dagger a(r_2 - \sigma_2) T T^\dagger a(r_1\sigma_1) T | \phi \rangle^* \\ &= 4\sigma_1\sigma_2 \langle \phi | a(r_2\sigma_2) a(r_1 - \sigma_1) | \phi \rangle^* , \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

ce qui est résumé par :

$$\tilde{\rho}^T(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2) = 4\sigma_1\sigma_2 \tilde{\rho}^*(r_1 - \sigma_1, r_2 - \sigma_2) = \tilde{\rho}^*(r_2\sigma_2, r_1\sigma_1) . \quad (\text{B.20})$$

Les différentes projections de la densité anormale sous le renversement du temps seront données par :

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_q^T(r_1, r_2) &= \sum_{\sigma} \tilde{\rho}_q^T(r_1\sigma, r_2\sigma) \\ &= \sum_{\sigma} 4\sigma \tilde{\rho}_q^*(r_1 - \sigma, r_2 - \sigma) \\ &= \sum_{\sigma} \tilde{\rho}_q^*(r_2\sigma, r_1\sigma) \\ \tilde{\rho}_q^T(r_1, r_2) &= \tilde{\rho}_q^*(r_2, r_1) , \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

$$\begin{aligned}
\tilde{s}_q^T(r_1, r_2) &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \tilde{\rho}_q^T(r_1 \sigma_1, r_2 \sigma_2) \langle \sigma_2 | \hat{\sigma} | \sigma_1 \rangle \\
&= \sum_{\sigma_1 \sigma_2} 4\sigma_1 \sigma_2 \tilde{\rho}_q^*(r_1 - \sigma_1, r_2 - \sigma_2) \langle \sigma_2 | \hat{\sigma} | \sigma_1 \rangle \\
&= \sum_{\sigma_1 \sigma_2} 4\sigma_1 \sigma_2 \tilde{\rho}_q^*(r_1 \sigma_1, r_2 \sigma_2) \langle -\sigma_2 | \hat{\sigma} | -\sigma_1 \rangle \\
&= - \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \tilde{\rho}_q^*(r_1 \sigma_1, r_2 \sigma_2) \langle \sigma_2 | \hat{\sigma} | \sigma_1 \rangle^* \\
&= - \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \{ \tilde{\rho}_q(r_1 \sigma_1, r_2 \sigma_2) \langle \sigma_2 | \hat{\sigma} | \sigma_1 \rangle \}^* \\
\tilde{s}_q^T(r_1, r_2) &= -\tilde{s}_q^*(r_1, r_2) = \tilde{s}_q^*(r_2, r_1) . \tag{B.22}
\end{aligned}$$

Comme pour la densité normale, la densité anormale dans un système invariant sous cette symétrie donne $\tilde{\rho}^T(r_1 \sigma_1 q_1, r_2 \sigma_2 q_2) = \tilde{\rho}(r_1 \sigma_1 q_1, r_2 \sigma_2 q_2)$. Il en découle les propriétés suivantes :

$$\tilde{\rho}_q(r_1, r_2) = \tilde{\rho}_q^*(r_2, r_1) = \tilde{\rho}_q^*(r_1, r_2) , \quad \tilde{s}_q(r_1, r_2) = \tilde{s}_q^*(r_2, r_1) = -\tilde{s}_q^*(r_1, r_2) , \tag{B.23}$$

$$\tilde{\rho}_q(r) = \tilde{\rho}_q^*(r) , \quad \tilde{s}_q(r) = -\tilde{s}_q(r) = 0 . \tag{B.24}$$



Calculs dans la matière nucléaire infinie

Contents

C.1	fonction d'onde et densité	131
C.2	Interaction de Skyrme	132
C.3	Interaction de Gogny D2	133
C.4	Fonction auxiliaires utilisées	134

C.1 fonction d'onde et densité

La matière nucléaire infinie est un système invariant par translation. Les fonctions d'onde vont alors prendre la forme d'onde plane :

$$\varphi_{\mathbf{k}m_s m_t}(\mathbf{r}\sigma q) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_{\sigma}^{m_s}(\sigma) \chi_{\tau}^{m_t}(q) , \tag{C.1}$$

avec $\chi_{\sigma}^{m_s}(\sigma) = \delta_{m_s,\sigma}$ et $\chi_{\tau}^{m_t}(q) = \delta_{m_t,q}$ les parties de spin et d'isospin de la fonction d'onde. Une fois que l'on a définie les fonctions d'onde des particules individuelles on peut construire les différentes densités relativement à l'état de la matière infinie.

- Matière symétrique non polarisée :

$$\rho_0(r_1, r_2) = \frac{2k_F^3}{\pi^2} \frac{j_1(k_F r_{12})}{k_F r_{12}} , \tag{C.2}$$

$$\rho_0(r) = \frac{2k_F^3}{3\pi^2} . \tag{C.3}$$

On introduit la fonction de Bessel sphérique :

$$j_1(x) = \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos(x)}{x} , \quad (\text{C.4})$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} j_1(x) = \frac{1}{3} . \quad (\text{C.5})$$

Les autres densités ρ_1 , \mathbf{s}_0 , et \mathbf{s}_1 sont nulles.

- Matière de neutrons :

$$\rho_0(r_1, r_2) = \rho_1(r_1, r_2) = \frac{k_F^3}{\pi^2} \frac{j_1(k_F r_{12})}{k_F r_{12}} , \quad (\text{C.6})$$

$$\rho_0(r) = \rho_1(r) = \frac{k_F^3}{3\pi^2} . \quad (\text{C.7})$$

- Matière symétrique polarisée :

$$\rho_0(r_1, r_2) = s_0(r_1, r_2) = \frac{k_F^3}{\pi^2} \frac{j_1(k_F r_{12})}{k_F r_{12}} , \quad (\text{C.8})$$

$$\rho_0(r) = s_0(r) = \frac{k_F^3}{3\pi^2} . \quad (\text{C.9})$$

- Matière de neutrons polarisée :

$$\rho_0(r_1, r_2) = \rho_1(r_1, r_2) = s_0(r_1, r_2) = s_1(r_1, r_2) = \frac{k_F^3}{\pi^2} \frac{j_1(k_F r_{12})}{k_F r_{12}} , \quad (\text{C.10})$$

$$\rho_0(r) = \rho_1(r) = s_0(r) = s_1(r) = \frac{k_F^3}{6\pi^2} . \quad (\text{C.11})$$

C.2 Interaction de Skyrme

Pour une interaction de Skyrme standard comme définie par l'équation (2.1) L'énergie par nucléons dans la matière symétrique est donnée par :

$$\frac{E}{A} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} c_s \rho_0^{2/3} + A_0^\rho \rho_0 + \frac{3}{5} c_s A_0^\tau \rho_0^{5/3} + \frac{1}{16} t_3 \rho_0^{\alpha+1} , \quad (\text{C.12})$$

avec le coefficient :

$$c_s = \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} .$$

La pression prendra la forme suivante :

$$P(\rho_{\text{sat}}) = \rho_0^2 \left. \frac{d\mathcal{E}/\rho_0}{d\rho_0} \right|_{\rho_0=\rho_{\text{sat}}} = 0 = \frac{2}{5} \frac{\hbar^2}{2m} c_s \rho_{\text{sat}}^{5/3} + A_0^\rho \rho_{\text{sat}}^2 + c_s A_0^\tau \rho_{\text{sat}}^{8/3} + \frac{1}{16} t_3 (\alpha + 1) \rho_{\text{sat}}^{\alpha+2} . \quad (\text{C.13})$$

Le module d'incompressibilité s'écrit :

$$K_\infty = 9\rho_0^2 \left. \frac{d^2 \mathcal{E}/\rho_0}{d\rho_0^2} \right|_{\rho_0=\rho_{\text{sat}}} = -\frac{6}{5} \frac{\hbar^2}{2m} c_s \rho_{\text{sat}}^{2/3} + 6c_s A_0^\tau \rho_{\text{sat}}^{5/3} + \frac{9}{16} \alpha(\alpha+1) t_3 \rho_{\text{sat}}^{\alpha+1} . \quad (\text{C.14})$$

La masse effective isoscalaire sera :

$$\left(\frac{m_0^*}{m} \right)^{-1} = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \tau_0} = 1 + \frac{2m}{\hbar^2} A_0^\tau \rho_{\text{sat}} . \quad (\text{C.15})$$

Dans la matière asymétrique l'équation d'état prend la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{E}}{\rho_0}(\rho_0, I) &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} c_s F_{5/3} \rho_0^{2/3} + A_0^\rho \rho_0 + A_1^\rho I^2 \rho_0 + \frac{3}{5} c_s A_0^\tau \rho_0^{5/3} \\ &+ \frac{1}{48} t_3 \rho_0^{\alpha+1} [2(2+x_3) - (1+2x_3)F_2(I)] , \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

avec la fonction :

$$F_m(I) = \frac{1}{2} [(1+I)^m + (1-I)^m] . \quad (\text{C.17})$$

À partir de l'équation d'état, on peut en déduire l'énergie de symétrie :

$$a_I \equiv J = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2}{dI^2} \frac{\mathcal{E}(I, \rho_0)}{A} \right|_{I=0} = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{2m} c_s \rho_0^{2/3} + A_1^\rho \rho_0 + \frac{1}{3} A_0^\tau c_s \rho_0^{5/3} + A_1^\tau c_s \rho_0^{5/3} , \quad (\text{C.18})$$

et enfin la pente de l'énergie de symétrie :

$$L = 3\rho_0 \left. \frac{\partial J}{\partial \rho} \right|_{I=0} = \frac{2}{3} \frac{\hbar^2}{2m} c_s \rho_0^{2/3} + 3A_1^\rho \rho_0 + \frac{5}{3} A_0^\tau c_s \rho_0^{5/3} + 5A_1^\tau c_s \rho_0^{5/3} . \quad (\text{C.19})$$

C.3 Interaction de Gogny D2

Dans cette partie nous donnerons les propriétés de la matière infinie pour l'interaction de Gogny D2 (5.3). L'énergie dans la matière symétrique est donnée par :

$$E = \int d^3r_1 d^3r_2 g_a(r_1 - r_2) \frac{\rho_0^\alpha(r_1) + \rho_0^\alpha(r_2)}{2} \left\{ A_3^{\rho_0} \rho_0(r_1) \rho_0(r_2) + B_3^{\rho_0} \rho_0(r_1, r_2) \rho_0(r_2, r_1) \right\} . \quad (\text{C.20})$$

Ce qui permet d'exprimer l'équation d'état comme :

$$\frac{E}{A} = [A_3^{\rho_0} + B_3^{\rho_0} F_0(\varepsilon)] \rho^{\alpha+1} . \quad (\text{C.21})$$

La pression :

$$P = \{[\alpha+1][A_3^{\rho_0} + B_3^{\rho_0} F_0(\varepsilon)] + \frac{1}{3} \varepsilon F_0'(\varepsilon) B_3^{\rho_0}\} \rho^{\alpha+2} . \quad (\text{C.22})$$

Le module d'incompressibilité :

$$K_\infty = 9 \left\{ \alpha[\alpha + 1][A_3^{\rho_0} + B_3^{\rho_0} F_0(\varepsilon)] + \frac{2}{3}[\alpha + \frac{2}{3}]\varepsilon F_0'(\varepsilon) B_3^{\rho_0} + \frac{1}{9}\varepsilon^2 F_0''(\varepsilon) B_3^{\rho_0} \right\} \rho^{\alpha+1} . \quad (C.23)$$

La masse effective :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = -\frac{1}{2} B_3^{\rho_0} \rho^{\alpha+1} a^2 G_0(\varepsilon) . \quad (C.24)$$

Pour la matière asymétrique l'énergie de symétrie est donnée par :

$$J = -\frac{1}{6} B_3^{\rho_0} \rho_0^{\alpha+1} \varepsilon^2 G_0(\varepsilon) + \rho_0^{\alpha+1} [A_1^\rho + B_3^{\rho_1} H_0(\varepsilon)] , \quad (C.25)$$

et enfin la pente de l'énergie de symétrie :

$$L = \rho^{\alpha+1} \left\{ -B_3^{\rho_0} \left[(3\alpha + 5) \frac{\varepsilon^2}{6} G_0(\varepsilon) + \frac{\varepsilon^3}{6} G_0'(\varepsilon) \right] \right. \quad (C.26)$$

$$\left. + 3(\alpha + 1) [A_3^{\rho_1} + B_3^{\rho_1} H_0(\varepsilon)] + B_3^{\rho_1} \varepsilon H_0'(\varepsilon) \right\} . \quad (C.27)$$

C.4 Fonction auxiliaires utilisées

Nous allons présenter ici les fonctions auxiliaires qui ont été utilisées au cours de cette thèse.

$$F_0(x) = \frac{12}{x^3} \left[\frac{1 - e^{-x^2}}{x^3} - \frac{3 - e^{-x^2}}{2x} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{Erf}(x) \right] . \quad (C.28)$$

avec

$$\lim_{x \rightarrow 0} F_0(x) = 1 , \quad (C.29)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} F_0'(x) = 0 , \quad (C.30)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} F_0''(x) = -\frac{3}{5} , \quad (C.31)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} F_0'''(x) = 0 . \quad (C.32)$$

$$H_0(x) = \frac{1 - e^{-x^2}}{x^2} . \quad (C.33)$$

$$G_0(x) = \frac{12}{x^6} (e^{-x^2} - 1) + \frac{6}{x^4} (e^{-x^2} + 1) . \quad (C.34)$$

$$G_2(x) = \frac{2(e^{-x^2} - 1) + x^2(x^{-2} + 1)}{x^4} , \quad (C.35)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} G_2(x) = 0 . \quad (C.36)$$

$$G_3(x) = \frac{6}{x^4} \left\{ e^{-x^2} - 1 + x \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{Erf}[x] \right\}, \quad (\text{C.37})$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} G_3(\varepsilon) = 1. \quad (\text{C.38})$$



Calcul dans un système à symétrie sphérique

Contents

D.1 Noyaux sphériques	137
D.1.1 Développement multipolaire de l'interaction	137
D.1.2 Développement multipolaire des densités dans un noyau sphérique	138
D.1.3 Champ moyen	142

D.1 Noyaux sphériques

D.1.1 Développement multipolaire de l'interaction

Nous allons commencer par développer le facteur de forme gaussien en onde partielle :

$$\begin{aligned}
g_a(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= \frac{e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{a^2}}}{(a\sqrt{\pi})^3} \\
&= \frac{e^{-\frac{r_1^2 + r_2^2}{a^2}} e^{\frac{2r_1 r_2}{a^2}}}{(a\sqrt{\pi})^3} \\
&= \sum_{LM} g_{aL}(r_1, r_2) Y_M^{*L}(\hat{r}_1) Y_M^L(\hat{r}_2) \tag{D.1}
\end{aligned}$$

$$= \sum_L \frac{2L+1}{4\pi} g_{aL}(r_1, r_2) P_L(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2), \tag{D.2}$$

avec :

$$g_{aL}(r_1, r_2) = \frac{4e^{-\frac{(r_1^2 - r_2^2)}{a^2}}}{a^3 \sqrt{\pi}} i_L \left(\frac{2r_1 r_2}{a^2} \right). \tag{D.3}$$

D.1.2 Développement multipolaire des densités dans un noyau sphérique

Dans un noyau à symétrie sphérique nous définirons les fonctions d'onde de la manière suivante :

$$V_{nljm}(r\sigma q) = \sum_{m_\ell} \frac{v_{qn\ell j}(r)}{r} \langle \ell m_\ell s \sigma | j m \rangle Y_m^{(\ell)}(\hat{r}) , \quad (D.4)$$

$$U_{nljm}(r\sigma q) = \frac{u_{qn\ell j}(r)}{r} \langle \ell m_\ell s \sigma | j m \rangle Y_m^{(\ell)}(\hat{r}) . \quad (D.5)$$

À partir de ces fonctions d'onde on peut construire la densité à un corps non-locale :

$$\begin{aligned} \rho_q(r_1, r_2) &= \sum_{nljm} V_{nljm}^*(r_2\sigma q) V_{nljm}(r_1\sigma q) \\ &= \sum_{nljm_\ell} \sum_{\sigma} \frac{v_{qn\ell j}(r_1) v_{qn\ell j}(r_2)}{r_1 r_2} \langle \ell m_\ell s \sigma | j m \rangle^2 Y_{m_\ell}^{*(\ell)}(\hat{r}_1) Y_{m_\ell}^{(\ell)}(\hat{r}_2) \\ &= \sum_{nljm_\ell} \frac{v_{qn\ell j}(r_1) v_{qn\ell j}(r_2)}{r_1 r_2} \frac{2j+1}{2\ell+1} Y_{m_\ell}^{*(\ell)}(\hat{r}_1) Y_{m_\ell}^{(\ell)}(\hat{r}_2) \end{aligned} \quad (D.6)$$

$$= \sum_{\ell j} \frac{2\ell+1}{4\pi} \rho_{q\ell j}(r_1, r_2) P_\ell(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2) . \quad (D.7)$$

Avec :

$$\rho_{q\ell j}(r_1, r_2) = \frac{2j+1}{2\ell+1} \sum_n \frac{v_{qn\ell j}(r_1) v_{qn\ell j}(r_2)}{r_1 r_2} . \quad (D.8)$$

Pour la densité local :

$$\begin{aligned} \rho_q(r) &= \sum_{nljm} V_{nljm}^*(r\sigma q) V_{nljm}(r\sigma q) \\ &= \sum_{nljm_\ell} \sum_{\sigma} \frac{v_{qn\ell j}^2(r)}{r^2} \langle \ell m_\ell s \sigma | j m \rangle^2 Y_{m_\ell}^{*(\ell)}(\hat{r}) Y_{m_\ell}^{(\ell)}(\hat{r}) \\ &= \sum_{nljm_\ell} \sum_{\sigma} \frac{v_{qn\ell j}^2(r)}{r^2} \frac{2j+1}{2\ell+1} \langle j-m_s \sigma | \ell-m_\ell \rangle^2 Y_{m_\ell}^{*(\ell)}(\hat{r}) Y_{m_\ell}^{(\ell)}(\hat{r}) \\ &= \sum_{nljm_\ell} \frac{v_{qn\ell j}^2(r)}{r^2} \frac{2j+1}{2\ell+1} Y_{m_\ell}^{*(\ell)}(\hat{r}) Y_{m_\ell}^{(\ell)}(\hat{r}) \\ &= \sum_{nlj} \frac{v_{qn\ell j}^2(r)}{r^2} \frac{2j+1}{2\ell+1} \frac{2\ell+1}{4\pi} \\ &= \sum_{\ell j} \frac{2\ell+1}{4\pi} \rho_{q\ell j}(r) . \end{aligned} \quad (D.9)$$

Pour la densité d'appariement le calcul est presque similaire :

$$\begin{aligned}
 \tilde{\rho}_q(r_1, r_2) &= - \sum_{nljm} U_{nljm}^*(r_2\sigma q) V_{nljm}(r_1\sigma q) \\
 &= - \sum_{nljm_\ell} \sum_{\frac{m}{\sigma}} \frac{u_{qnlj}(r_1)v_{qnlj}(r_2)}{r_1 r_2} \langle \ell m_\ell s \sigma | jm \rangle^2 Y_{m_\ell}^{*\ell}(\hat{r}_1) Y_{m_\ell}^\ell(\hat{r}_2) \\
 &= - \sum_{nljm_\ell} \frac{u_{qnlj}(r_1)v_{qnlj}(r_2)}{r_1 r_2} \frac{2j+1}{2\ell+1} Y_{m_\ell}^{*\ell}(\hat{r}_1) Y_{m_\ell}^\ell(\hat{r}_2) \quad (D.10)
 \end{aligned}$$

$$= \sum_{\ell j} \frac{2\ell+1}{4\pi} \tilde{\rho}_{q\ell j}(r_1, r_2) P_\ell(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2) . \quad (D.11)$$

$$\tilde{\rho}_{q\ell j}(r_1, r_2) = - \frac{2j+1}{2\ell+1} \sum_n \frac{u_{qnlj}(r_1)v_{qnlj}(r_2)}{r_1 r_2} . \quad (D.12)$$

Dans un noyau à symétrie sphérique la densité vectorielles prend la forme ci-dessous :

$$s_{q,\mu}(r_1, r_2) = \sum_{n \ell j m \sigma \sigma'} V_{nljm}^*(r_2\sigma' q) V_{nljm}(r_1\sigma q) \langle s\sigma' | \sigma_\mu | s\sigma \rangle . \quad (D.13)$$

En utilisant le théorème de Wigner-Eckart on peut exprimer $\langle s\sigma' | \sigma_\mu | s\sigma \rangle$ comme :

$$\langle s\sigma' | \sigma_\mu^{(1)} | s\sigma \rangle = (-1)^{s-\sigma'} \begin{pmatrix} s & 1 & s \\ -\sigma' & \mu & \sigma \end{pmatrix} \langle s || \sigma^{(1)} || s \rangle \quad (D.14)$$

$$= (-1)^{s-\sigma'} \begin{pmatrix} s & 1 & s \\ -\sigma' & \mu & \sigma \end{pmatrix} \sqrt{6} . \quad (D.15)$$

À l'aide de cette définition et des différentes relations entre les symboles 3j et 6j on peut réécrire la densité vectorielle :

$$\begin{aligned}
 s_{q,\mu}(r_1, r_2) &= \sum_{n\ell jm_1 m_2} \sum_{\substack{m \\ \sigma_1 \sigma_2}} \sqrt{6}(2j+1) \frac{v_{qnlj}(r_1)v_{qnlj}(r_2)}{r_1 r_2} (-1)^{2s-2\ell-2m+s-\sigma_2} \\
 &\times \begin{pmatrix} s & 1 & s \\ -\sigma_2 & \mu & \sigma_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & s & j \\ m_1 & \sigma_1 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & s & j \\ m_2 & \sigma_2 & -m \end{pmatrix} Y_{m_2}^{*(\ell)}(\hat{r}_2) Y_{m_1}^\ell(\hat{r}_1) \\
 &= \sum_{n\ell jm_1 m_2} \sqrt{6}(-1)^{-2\ell+s+j+m_1} (2j+1) \frac{v_{qnlj}(r_1)v_{qnlj}(r_2)}{r_1 r_2} Y_{m_2}^{*(\ell)}(\hat{r}_2) Y_{m_1}^\ell(\hat{r}_1) \\
 &\times \sum_{\substack{m \\ \sigma_1 \sigma_2}} (-1)^{2s+j+m+\sigma_1+\sigma_2} \begin{pmatrix} s & s & 1 \\ \sigma_1 & -\sigma_2 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & j & \ell \\ \sigma_2 & -m & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & s & \ell \\ m & -\sigma_1 & -m_1 \end{pmatrix} \\
 &= \sum_{n\ell jm_1 m_2} \sqrt{6}(-1)^{-2\ell+s+j+m_1} (2j+1) \frac{v_{qnlj}(r_1)v_{qnlj}(r_2)}{r_1 r_2} Y_{m_2}^{*(\ell)}(\hat{r}_2) Y_{m_1}^\ell(\hat{r}_1) \\
 &\times \begin{pmatrix} \ell & \ell & 1 \\ m_2 & -m_1 & \mu \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} \ell & \ell & 1 \\ s & s & j \end{matrix} \right\} \\
 &= \sum_{n\ell jm_1 m_2} \sqrt{6}(-1)^{-2\ell+s+j+m_1+\ell+s+j+1} (2j+1) \frac{v_{qnlj}(r_1)v_{qnlj}(r_2)}{r_1 r_2} Y_{m_2}^{*(\ell)}(\hat{r}_2) Y_{m_1}^\ell(\hat{r}_1) \\
 &\times \begin{pmatrix} \ell & \ell & 1 \\ m_2 & -m_1 & \mu \end{pmatrix} \frac{\alpha(\ell, j, s)}{2\sqrt{\ell(\ell+1)(2\ell+1)s(s+1)(2s+1)}} \\
 &= \sum_{\ell jm_1 m_2} \alpha(j, \ell, s) (-1)^{m_1+\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)}} \rho_{q\ell j}(r_1, r_2) Y_{m_2}^{*(\ell)}(\hat{r}_2) Y_{m_1}^\ell(\hat{r}_1) \begin{pmatrix} \ell & \ell & 1 \\ m_2 & -m_1 & \mu \end{pmatrix} .
 \end{aligned} \tag{D.16}$$

Nous allons poser les notations :

- $\alpha(j, \ell, s) = j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)$,
- $\gamma(\ell) = \sqrt{2\ell+1}$,
- $\beta(\ell) = \sqrt{\ell(\ell+1)}$.

Maintenant que nous avons une forme simplifié de la densité vectorielle nous allons déve-

opper les produits de densité pouvant intervenir dans les différents calculs :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) &= \sum_{\mu} (-1)^{\mu} s_{\mu}(r_1, r_2) s_{-\mu}(r_2, r_1) \\
 &= - \sum_{\substack{\ell \ell' \\ j j'}} \alpha(j, \ell, s) \alpha'(j', \ell', s) \frac{\gamma(\ell) \gamma(\ell')}{\beta(\ell) \beta(\ell')} \rho_{q\ell j}(r_1, r_2) \rho_{q'\ell' j'}(r_2, r_1) \\
 &\times \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ m_1' m_2' \\ \mu}} (-1)^{1+\ell+\ell'+\mu+m_1+m_2'} \begin{pmatrix} 1 & \ell & \ell \\ \mu & m_2 & -m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \ell' & \ell' \\ -\mu & m_1' & -m_2' \end{pmatrix} \\
 &\times Y_{m_2}^{*(\ell)}(\hat{r}_2) Y_{m_2'}^{(\ell')}(\hat{r}_2) Y_{m_1}^{(\ell)}(\hat{r}_1) Y_{m_1'}^{*(\ell')}(\hat{r}_1) \\
 &= - \sum_{\substack{\ell \ell' \\ j j'}} \sum_{\substack{LL' \\ MM'}} \sum_{m_2 m_2'} \alpha(j, \ell) \alpha'(j', \ell') \frac{\gamma^2(\ell) \gamma^2(\ell') \gamma(L) \gamma(L')}{\beta(\ell) \beta(\ell')} \frac{\rho_{q\ell j}(r_1, r_2) \rho_{q'\ell' j'}(r_2, r_1)}{4\pi} \\
 &\times \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L' \\ m_2 & m_2' & -M' \end{pmatrix} Y_{M'}^{*(L')}(\hat{r}_2) Y_M^{(L)}(\hat{r}_1) \\
 &\times \sum_{\substack{m_1 m_1' \\ \mu}} (-1)^{1+\ell+\ell'+\mu+m_1+m_1'} \\
 &\times \begin{pmatrix} 1 & \ell & \ell \\ \mu & m_2 & -m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \ell' & \ell' \\ -\mu & m_1' & -m_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ m_1 & m_1' & -M \end{pmatrix} \\
 &= - \sum_{\substack{\ell \ell' \\ j j'}} \sum_{\substack{LL' \\ MM'}} \alpha(j, \ell) \alpha'(j', \ell') \frac{\gamma^2(\ell) \gamma^2(\ell') \gamma(L) \gamma(L')}{\beta(\ell) \beta(\ell')} \frac{\rho_{q\ell j}(r_1, r_2) \rho_{q'\ell' j'}(r_2, r_1)}{4\pi} \\
 &\times \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \ell & \ell' & 1 \\ \ell' & \ell' & L \end{Bmatrix} Y_{M'}^{*(L')}(\hat{r}_2) Y_M^{(L)}(\hat{r}_1) \\
 &\times \sum_{m_2 m_2'} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L' \\ m_2 & m_2' & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' & \ell & L \\ -m_2' & m_2 & -M \end{pmatrix} \\
 &= - \sum_{\substack{\ell \ell' \\ j j'}} \sum_{\substack{LL' \\ MM'}} \alpha(j, \ell) \alpha(j', \ell') \alpha(L, \ell, \ell') \frac{\gamma^2(\ell) \gamma^2(\ell') \gamma(L) \gamma(L')}{\beta^2(\ell) \beta^2(\ell')} \\
 &\times \frac{\rho_{q\ell j}(r_1, r_2) \rho_{q'\ell' j'}(r_2, r_1)}{4\pi} Y_{M'}^{*(L')}(\hat{r}_2) Y_M^{(L)}(\hat{r}_1) \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 &\times \frac{\gamma^2(L)}{\gamma^2(L)} \sum_{m_2 m_2'} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L' \\ m_2 & m_2' & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' & \ell & L \\ -m_2' & m_2 & -M \end{pmatrix} \\
 &= - \sum_{\substack{\ell \ell' \\ j j'}} \sum_{LM} \alpha(j, \ell) \alpha(j', \ell') \alpha(L, \ell, \ell') \frac{\gamma^2(\ell) \gamma^2(\ell')}{\beta^2(\ell) \beta^2(\ell')} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \\
 &\times \frac{\rho_{q\ell j}(r_1, r_2) \rho_{q'\ell' j'}(r_2, r_1)}{4\pi} Y_M^{*(L)}(\hat{r}_2) Y_M^{(L)}(\hat{r}_1) . \tag{D.17}
 \end{aligned}$$

La forme final du produit de deux densités vectorielle en fonction des polynomes de

Legendre s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathbf{s}(r_1, r_2) \cdot \mathbf{s}(r_2, r_1) = & - \sum_{\substack{\ell \ell' \\ j j'}} \sum_L \alpha(j, \ell) \alpha(j', \ell') \alpha(L, \ell, \ell') \frac{\gamma^2(L) \gamma^2(\ell) \gamma^2(\ell')}{\beta^2(\ell) \beta^2(\ell')} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \\ & \times \frac{\rho_{q\ell j}(r_1, r_2) \rho_{q'\ell'j'}(r_2, r_1)}{(4\pi)^2} P_L(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_1). \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

D.1.3 Champ moyen

$$E_{\text{ph}}^D = \int dr_1 dr_2 4\pi r_1^2 r_2^2 g_0(r_{12}) \left\{ [A_3^{\rho_0} - A_3^{\rho_1}] \rho_0(r_1) \rho_0^2(r_2) + 2A_3^{\rho_1} \rho_0(r_1) \sum_q \rho_q^2(r_2) \right\} \quad (\text{D.19})$$

$$\begin{aligned} E_{\rho_0}^X = & B_3^{\rho_0} \sum_{\substack{\ell_1 \ell_2 \\ j_1 j_2}}^L \gamma(\ell_1)^2 \gamma(\ell_2)^2 \gamma(L)^2 \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left\{ 1 - \frac{\alpha(j_1, \ell_1) \alpha(j_2, \ell_2) \alpha(L, \ell_1, \ell_2)}{\beta^2(\ell_1) \beta^2(\ell_2)} \right\} \\ & \int dr_1 dr_2 4\pi r_1^2 r_2^2 \frac{g_{aL}(r_{12})}{(4\pi)^2} [\rho_0(r_1) + \rho_0(r_2)] \sum_q \rho_{q\ell_1 j_1}(r_1, r_2) \rho_{q\ell_2 j_2}(r_2, r_1) \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

$$\begin{aligned} E_{\rho_1}^X = & \frac{1}{2} B_3^{\rho_1} \sum_{\substack{\ell_1 \ell_2 \\ j_1 j_2}}^L \gamma(\ell_1)^2 \gamma(\ell_2)^2 \gamma(L)^2 \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[1 - \frac{\alpha(j_1, \ell_1) \alpha(j_2, \ell_2) \alpha(L, \ell_1, \ell_2)}{\beta^2(\ell_1) \beta^2(\ell_2)} \right] \\ & \int dr_1 dr_2 4\pi r_1^2 r_2^2 \frac{g_{aL}(r_{12})}{(4\pi)^2} \left\{ \sum_{q_1} [\rho_{q_1}(r_1) + \rho_{q_1}(r_2)] \rho_{q_1 \ell_1 j_1}(r_2, r_1) \rho_{0\ell_2 j_2}(r_1, r_2) \right. \\ & \left. - \frac{\rho_0(r_1) + \rho_0(r_2)}{2} \rho_{0\ell_1 j_1}(r_2, r_1) \rho_{0\ell_2 j_2}(r_1, r_2) \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{\text{pp}} = & \frac{1}{2} C_3^\rho \sum_{\substack{\ell_1 \ell_2 \\ j_1 j_2}}^L \gamma(\ell_1)^2 \gamma(\ell_2)^2 \gamma(L)^2 \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[1 - \frac{\alpha(j_1, \ell_1) \alpha(j_2, \ell_2) \alpha(L, \ell_1, \ell_2)}{\beta^2(\ell_1) \beta^2(\ell_2)} \right] \\ & \int dr_1 dr_2 4\pi r_1^2 r_2^2 \frac{g_{aL}(r_{12})}{(4\pi)^2} \left\{ \sum_q [\rho_{\bar{q}}(r_1) + \rho_{\bar{q}}(r_2)] \tilde{\rho}_{q\ell_1 j_1}(r_1, r_2) \tilde{\rho}_{q\ell_2 j_2}(r_2, r_1) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

$$\begin{aligned} h_{\text{tot}}^D = & 2\gamma(j)^2 \int dr_2 r_2^2 g_0(r_1, r_2) \left\{ [A_3^{\rho_0} - A_3^{\rho_1}] [\rho_0(r_2) + 2\rho_0(r_1)] \rho_0(r_2) \right. \\ & \left. + 2A_3^{\rho_1} \left[\sum_{q'} \rho_{q'}^2(r_2) + 2\rho_0(r_2) \rho_q(r_1) \right] \right\} v_{q\ell j}(r_1) \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

$$\begin{aligned}
 h_{\rho_0}^X &= 4\gamma^2(j)B_3^{\rho_0} \sum_{\ell_1 j_1 \ell_2 j_2}^L \gamma^2(L)\gamma^2(\ell_2)\gamma^2(\ell_1) \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[1 - \frac{\alpha(L, \ell_1, \ell_2)\alpha(j_2, \ell_2)\alpha(j_1, \ell_1)}{\beta^2(\ell_1)\beta^2(\ell_2)}\right] \\
 &\times \left\{ \int dr_2 r_2^2 \frac{g_{aL}(r_1, r_2)}{(4\pi)^2} \sum_{q'} \rho_{q'\ell_1 j_1}(r_1, r_2) \rho_{q'\ell_2 j_2}(r_2, r_1) \right\} v_{q\ell j}(r_1) \\
 &+ 4\gamma^2(j)B_3^{\rho_0} \sum_{\ell_2 j_2}^L \gamma^2(L)\gamma^2(\ell_2) \begin{pmatrix} \ell_2 & \ell & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[1 - \frac{\alpha(L, \ell_2, \ell)\alpha(j_2, \ell_2)\alpha(j, \ell)}{\beta^2(\ell)\beta^2(\ell_2)}\right] \\
 &\times \left\{ \int dr_2 r_1 r_2 \frac{g_{aL}(r_1, r_2)}{(4\pi)^2} [\rho_0(r_1) + \rho_0(r_2)] \rho_{q\ell_2 j_2}(r_1, r_2) v_{q\ell j}(r_2) \right\} \quad (D.24)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 h_{\rho_1}^X &= 2\gamma^2(j)B_3^{\rho_1} \sum_{\ell_1 j_1 \ell_2 j_2}^L \gamma^2(L)\gamma^2(\ell_2)\gamma^2(\ell_1) \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[1 - \frac{\alpha(L, \ell_1, \ell_2)\alpha(j_2, \ell_2)\alpha(j_1, \ell_1)}{\beta^2(\ell_1)\beta^2(\ell_2)}\right] \\
 &\times \left\{ \int dr_2 r_2^2 \frac{g_{aL}(r_1, r_2)}{(4\pi)^2} [\rho_{q\ell_1 j_1}(r_2, r_1) \rho_{0\ell_2 j_2}(r_1, r_2) - \frac{1}{2} \rho_{0\ell_1 j_1}(r_2, r_1) \rho_{0\ell_2 j_2}(r_1, r_2)] \right\} v_{q\ell j}(r_1) \\
 &+ B_3^{\rho_1} \sum_{\ell_2 j_2}^L \gamma^2(L)\gamma^2(\ell_2)\gamma^2(j) \begin{pmatrix} \ell_2 & \ell & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[1 - \frac{\alpha(L, \ell_2, \ell)\alpha(j_2, \ell_2)\alpha(j, \ell)}{\beta^2(\ell)\beta^2(\ell_2)}\right] \int dr_2 r_1 r_2 \frac{g_{aL}(r_1, r_2)}{4\pi} \\
 &\times \left\{ [\rho_q(r_1) + \rho_q(r_2)] \rho_{0\ell_2 j_2}(r_1, r_2) + \sum_{q'} [\rho_{q'}(r_1) + \rho_{q'}(r_2)] \rho_{q'\ell_2 j_2}(r_2, r_1) \right. \\
 &\left. - [\rho_0(r_1) + \rho_0(r_2)] \rho_{0\ell_2 j_2}(r_1, r_2) \right\} v_{q\ell j}(r_2) \quad (D.25)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{h}^D &= 2\gamma(j)^2 C_3^\rho \sum_{\substack{\ell_1 \ell_2 \\ j_1 j_2}}^L \gamma(\ell_1)^2 \gamma(\ell_2)^2 \gamma(L)^2 \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[1 - \frac{\alpha(j_1, \ell_1)\alpha(j_2, \ell_2)\alpha(L, \ell_1, \ell_2)}{\beta^2(\ell_1)\beta^2(\ell_2)}\right] \\
 &\left\{ \int dr_2 r_2^2 \frac{g_{aL}(r_1, r_2)}{(4\pi)^2} \tilde{\rho}_{\bar{q}\ell_1 j_1}(r_1, r_2) \tilde{\rho}_{\bar{q}\ell_2 j_2}(r_2, r_1) \right\} v_{q\ell j}(r_1) \quad (D.26)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{h}^X &= -C_3^\rho \sum_{\ell_2 j_2}^L \gamma^2(L)\gamma^2(\ell_2)\gamma^2(j) \begin{pmatrix} \ell_2 & \ell & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[1 - \frac{\alpha(L, \ell_2, \ell)\alpha(j_2, \ell_2)\alpha(j, \ell)}{\beta^2(\ell)\beta^2(\ell_2)}\right] \\
 &\times \int dr_2 r_1 r_2 \frac{g_{aL}(r_1, r_2)}{4\pi} [\rho_{\bar{q}}(r_1) + \rho_{\bar{q}}(r_2)] \tilde{\rho}_{q\ell_2 j_2}(r_2, r_1) u_{q\ell j}(r_2) \quad (D.27)
 \end{aligned}$$



Valeurs des paramètres des interactions

Contents

E.1 Skyrme SLy7s(X)	145
E.2 Interaction semi-régularisée RegMR3	146

E.1 Skyrme SLy7s(X)

	1F2F(0.70)	1T2F(0.70)	1T2T(0.70)
t_0	-2468.19232	-2492.20327	-2482.01791
x_0	0.73901192	0.66548036	0.70880764
t_1	407.403624	488.947227	449.121591
x_1	-0.0203348	0.0191680	0.00134578
t_2	-324.038823	-392.603927	-375.678254
x_2	-0.99266563	-0.88183244	-0.94475262
t_3	13676.2537	13843.8484	13772.7553
x_3	1.10829912	0.96032479	1.05033970
W_{so}	118.877268	131.849204	127.004391

	1F2F(0.80)	1T2F(0.80)	1T2T(0.80)
t_0	-2662.21727	-2686.06097	-2676.13238
x_0	0.62618396	0.51864075	0.57471304
t_1	421.249500	381.547873	310.651142
x_1	0.00134578	-0.01097828	0.04002872
t_2	-414.996723	-432.402764	-438.549084
x_2	-0.95014318	-0.81905903	-0.89299585
t_3	15962.3839	15893.0830	16668.6021
x_3	0.85677506	0.65718133	0.76473564
W_{so}	124.361746	119.182854	106.479498

	1F2F(0.85)	1T2T(0.85)	1T2T(0.85)
t_0	-2742.08508	-2765.35122	-2755.97168
x_0	0.57857518	0.46054935	0.51843108
t_1	310.651142	392.625848	353.862596
x_1	-0.00078207	0.06009614	0.02878070
t_2	-446.701427	-442.683837	-457.372125
x_2	-0.93321552	-0.79145805	-0.86974799
t_3	16668.6021	16830.9981	16765.5296
x_3	0.76131848	0.54715920	0.65611850
W_{so}	106.479498	120.924395	115.999019

E.2 Interaction semi-régularisée RegMR3

RegMR3	
LO	
W_0	-83.4255420
B_0	-167.974874
H_0	22.72042469
M_0	-479.5436580
LO'	
W'_0	560.361240
B'_0	363.715626
H'_0	105.512261
M'_0	736.986542
NLO	
W_1	65.9291683
B_1	-36.4015637
H_1	21.9073903
M_1	-79.6674345
N ² LO	
W_2	32.3250459
B_2	-111.079059
H_2	28.6023259
M_2	-113.368628
N ³ LO	
W_3	31.7172802
B_3	-5.68874128
H_3	3.21525144
M_3	-29.7316007
W_{3c}	8877.03982
W_{so}	139.931582

Bibliographie

- [1] P. E. R. F.R.S., “The scattering of and particles by matter and the structure of the atom,” *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 21, no. 125, pp. 669–688, 1911.
- [2] C. von Weizsäcker, “Zur theorie des kernmassen,” *Z. Phys.*, vol. 96, p. 431, 1935.
- [3] T. H. R. Skyrme, “The effective nuclear potential,” *Nucl. Phys.*, vol. 9, no. 4, pp. 615 – 634, 1958.
- [4] J. Dechargé and D. Gogny, “Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the *D1* effective interaction on spherical nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 21, pp. 1568–1593, Apr 1980.
- [5] J. Dobaczewski, K. Bennaceur, and F. Raimondi, “Effective theory for low-energy nuclear energy density functionals,” *J. Phys. G*, vol. 39, p. 125103, 2012.
- [6] K. Bennaceur, J. Dobaczewski, and F. Raimondi, “New density-independent interactions for nuclear structure calculations,” *EPJ Web of Conferences*, vol. 66, p. 02031, 2014.
- [7] K. Bennaceur, A. Idini, J. Dobaczewski, P. Dobaczewski, M. Kortelainen, and F. Raimondi, “Nonlocal energy density functionals for pairing and beyond-mean-field calculations,” *J. Phys. G*, vol. 44, no. 4, p. 045106, 2017.
- [8] K. Bennaceur, J. Dobaczewski, T. Haverinen, and M. Kortelainen, “Regularized pseudopotential for mean-field calculations,” 2019.
- [9] N. Tajima, H. Flocard, P. Bonche, J. Dobaczewski, and P.-H. Heenen, “Generator coordinate kernels between zero- and two-quasiparticle BCS states,” *Nuclear Physics A*, vol. 542, no. 3, pp. 355 – 367, 1992.
- [10] F. Döna, *Phys. Rev. C* **58**, 872 (1998).
- [11] M. Bender, T. Duguet, and D. Lacroix, “Particle-number restoration within the energy density functional formalism,” *Phys. Rev. C*, vol. 79, p. 044319, Apr 2009.
- [12] J. Dobaczewski, M.V. Stoitsov, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard, *Phys. Rev. C* **76**, 054315 (2007).

-
- [13] T. Duguet, M. Bender, K. Bennaceur, D. Lacroix, and T. Lesinski, *Phys. Rev. C* **79**, 044320 (2009).
- [14] R. Jodon, M. Bender, K. Bennaceur, and J. Meyer, “Constraining the surface properties of effective Skyrme interactions,” *Phys. Rev. C*, vol. 94, p. 024335, Aug 2016.
- [15] W. Ryssens, M. Bender, K. Bennaceur, P.-H. Heenen, and J. Meyer, “Impact of the surface energy coefficient on the deformation properties of atomic nuclei as predicted by skyrme energy density functionals,” *Phys. Rev. C*, vol. 99, p. 044315, Apr 2019.
- [16] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer, 2000.
- [17] M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard, “Self-consistent mean-field models for nuclear structure,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 75, p. 121, 2003.
- [18] D. Vautherin and D. M. Brink, “Hartree-fock calculations with skyrme’s interaction. i. spherical nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 5, p. 626, 1972.
- [19] J. Dobaczewski, H. Flocard, and J. Treiner, “Hartree-Fock-Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line,” *Nucl. Phys. A*, vol. 422, no. 1, p. 103, 1984.
- [20] E. Perlińska, S. G. Rohoziński, J. Dobaczewski, and W. Nazarewicz, “Local density approximation for proton-neutron pairing correlations : Formalism,” *Phys. Rev. C*, vol. 69, p. 014316, Jan 2004.
- [21] A. Bohr, B. R. Mottelson, and D. Pines, “Possible analogy between the excitation spectra of nuclei and those of the superconducting metallic state,” *Phys. Rev.*, vol. 110, pp. 936–938, May 1958.
- [22] J. Dudek, “Nuclear superdeformation at high spins,” *Progress in Particle and Nuclear Physics*, vol. 28, pp. 131–185, 1992.
- [23] J. J. Griffin, “Nuclear superfluidity and statistical effects in nuclear fission,” *Phys. Rev.*, vol. 132, pp. 2204–2211, Dec 1963.
- [24] J. Dobaczewski, H. Flocard, and J. Treiner, *Nucl. Phys. A* **422**, 103 (1984).
- [25] W. Ryssens, *Symmetry breaking in nuclear mean-field models, PhD. thesis*. Theses, Université Libre de Bruxelles, Sept. 2016.
- [26] J. Meyer, P. Bonche, M. Weiss, J. Dobaczewski, H. Flocard, and P.-H. Heenen, “Quadrupole and octupole correlations in normal, superdeformed and hyperdeformed states of 194pb,” *Nuclear Physics A*, vol. 588, no. 3, pp. 597–622, 1995.
- [27] D. L. Hill and J. A. Wheeler, “Nuclear constitution and the interpretation of fission phenomena,” *Phys. Rev.*, vol. 89, pp. 1102–1145, Mar 1953.
- [28] J. J. Griffin and J. A. Wheeler, “Collective motions in nuclei by the method of generator coordinates,” *Phys. Rev.*, vol. 108, p. 311, 1957.
- [29] D. Davesne, J. Navarro, J. Meyer, K. Bennaceur, and A. Pastore, “Two-body contributions to the effective mass in nuclear effective interactions,” *Phys. Rev. C*, vol. 97, p. 044304, Apr 2018.
- [30] T. H. R. Skyrme, “The effective nuclear potential,” *Nucl. Phys.*, vol. 9, no. 4, p. 615, 1959.
- [31] T. Skyrme, “The spin-orbit interaction in nuclei,” *Nuclear Physics*, vol. 9, no. 4, pp. 635–640, 1958.

BIBLIOGRAPHIE

- [32] 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, no. 1, p. 014312, 2007.
- [33] T. Lesinski, *Microscopic and Beyond-Mean-Field Constraints for a New Generation of Nuclear Energy Density Functionals*. Theses, Université Claude Bernard - Lyon I, Sept. 2008.
- [34] F. Tondeur, S. Goriely, J. M. Pearson, and M. Onsi, “Towards a Hartree-Fock mass formula,” *Phys. Rev. C*, vol. 62, no. 2, p. 024308, 2000.
- [35] 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. 054311, 2011.
- [36] R. Jodon, *Ajustements de fonctionnelles de Skyrme généralisées*. Theses, Université Claude Bernard - Lyon I, Sept. 2014.
- [37] J. Sadoudi, M. Bender, K. Bennaceur, D. Davesne, R. Jodon, and T. Duguet, “Skyrme pseudo-potential-based EDF parametrization for spuriousity-free MR EDF calculations,” *Physica Scripta*, vol. T154, p. 014013, may 2013.
- [38] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer, “A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities,” *Nuclear Physics A*, vol. 627, no. 4, pp. 710 – 746, 1997.
- [39] J. Bartel, , and K. Bencheikh, “Nuclear mean fields through self-consistent semiclassical calculations,” *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, vol. 14, no. 2, p. 179, 2002.
- [40] R. Jodon, M. Bender, K. Bennaceur, and J. Meyer, “Constraining the surface properties of effective Skyrme interactions,” *Phys. Rev. C*, vol. 94, p. 024335, Aug 2016.
- [41] S. Sels, “Shape staggering of midshell mercury isotopes from in-source laser spectroscopy compared with density-functional-theory and monte carlo shell-model calculations,” *Phys. Rev. C*, vol. 99, p. 044306, Apr 2019.
- [42] W. J. Swiatecki, “The nuclear surface energy,” *Proceedings of the Physical Society. Section A*, vol. 64, pp. 226–238, mar 1951.
- [43] P.-G. Reinhard, M. Bender, W. Nazarewicz, and T. Vertse, “From finite nuclei to the nuclear liquid drop : Leptodermous expansion based on self-consistent mean-field theory,” *Phys. Rev. C*, vol. 73, p. 014309, Jan 2006.
- [44] J. Côté and J. Pearson, “Hartree-Fock calculations of semi-infinite nuclear matter with complete forces (finite-range and spin-orbit term),” *Nuclear Physics A*, vol. 304, no. 1, pp. 104 – 126, 1978.
- [45] P. Danielewicz and J. Lee, “Symmetry energy i : Semi-infinite matter,” *Nucl. Phys. A*, vol. 818, p. 36, 2009.
- [46] J. G. Kirkwood, “Quantum statistics of almost classical assemblies,” *Phys. Rev.*, vol. 44, pp. 31–37, Jul 1933.
- [47] M. Brack, C. Guet, and H.-B. Håkansson, “Selfconsistent semiclassical description of average nuclear properties – a link between microscopic and macroscopic models,” *Physics Reports*, vol. 123, no. 5, pp. 275 – 364, 1985.

-
- [48] H. Krivine and J. Treiner, “A simple approximation to the nuclear kinetic energy density,” *Physics Letters B*, vol. 88, no. 3, pp. 212 – 215, 1979.
- [49] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, and J.A. Maruhn, *Eur. Phys. Jour.* **A7**, 467 (2000).
- [50] W. Ryssens, V. Hellemans, M. Bender, and P. H. Heenen, “Solution of the Skyrme–HF+BCS equation on a 3D mesh, II : A new version of the Ev8 code,” *Comput. Phys. Comm.*, vol. 187, p. 175, 2015.
- [51] Meyer, J., “Interactions effectives, théories de champ moyen, masses et rayons nucléaires *,” *Ann. Phys. Fr.*, vol. 28, no. 3, pp. 1–113, 2003.
- [52] T. Lesinski, K. Bennaceur, T. Duguet, and J. Meyer, “Isovector splitting of nucleon effective masses, ab initio benchmarks and extended stability criteria for Skyrme energy functionals,” *Phys. Rev. C*, vol. 74, p. 044315, Oct 2006.
- [53] V. Hellemans, A. Pastore, T. Duguet, K. Bennaceur, D. Davesne, J. Meyer, M. Bender, and P.-H. Heenen, “Spurious finite-size instabilities in nuclear energy density functionals,” *Phys. Rev. C*, vol. 88, p. 064323, Dec 2013.
- [54] K. Hara and Y. Sun, “Linear response in infinite nuclear matter as a tool to reveal finite size instabilities,” *International Journal of Modern Physics E*, vol. 21, no. 05, 2012.
- [55] A. D. Pace and M. Martini, “Nuclear response functions with finite-range gogny force : Tensor terms and instabilities,” *Physical Review C*, vol. 94, aug 2016.
- [56] A. Pastore, D. Davesne, K. Bennaceur, J. Meyer, and V. Hellemans, “Fitting Skyrme functionals using linear response theory,” *Physica Scripta*, vol. T154, p. 014014, may 2013.
- [57] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer, “A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities,” *Nucl. Phys. A*, vol. 627, no. 4, p. 710, 1997.
- [58] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer, “A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities,” *Nucl. Phys. A*, vol. 635, no. 1, p. 231, 1998.
- [59] V. Hellemans, P.-H. Heenen, and M. Bender, “Tensor part of the Skyrme energy density functional. III. Time-odd terms at high spin,” *Phys. Rev. C*, vol. 85, p. 014326, Jan 2012.
- [60] K. Bennaceur, 2020. *et al*, code FINRES₄, to be submitted to *Comput. Phys. Commun.*
- [61] 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.
- [62] P. Bonche, H. Flocard, and P. H. Heenen, “Solution of the Skyrme HF + BCS equation on a 3D mesh,” *Comput. Phys. Comm.*, vol. 171, no. 1, p. 49, 2005.
- [63] G. Gall, B. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, and P.-H. Heenen, “Superdeformed rotational bands in the mercury region. A cranked Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov study,” *Z. Phys. A*, vol. 348, p. 183, 1994.

BIBLIOGRAPHIE

- [64] J. Terasaki, P.-H. Heenen, P. Bonche, J. Dobaczewski, and H. Flocard, “Superdeformed rotational bands with density dependent pairing interactions,” *Nuclear Physics A*, vol. 593, no. 1, pp. 1–20, 1995.
- [65] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard, *Nucl. Phys.* **A693**, 361 (2001).
- [66] J. Dechargé and D. Gogny, “Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the D1 effective interaction on spherical nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 21, no. 4, p. 1568, 1980.
- [67] N. Nikolov, N. Schunck, W. Nazarewicz, M. Bender, and J. Pei, “Surface symmetry energy of nuclear energy density functionals,” *Phys. Rev. C*, vol. 83, no. 3, p. 034305, 2011.
- [68] C. E. Bemis, F. K. McGowan, J. L. C. Ford, W. T. Milner, P. H. Stelson, and R. L. Robinson, “ $e2$ and $e4$ transition moments and equilibrium deformations in the actinide nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 8, pp. 1466–1480, Oct 1973.
- [69] M. Veselský, A. N. Andreyev, S. Antalic, M. Huyse, P. Möller, K. Nishio, A. J. Sierk, P. Van Duppen, and M. Venhart, “Fission-barrier heights of neutron-deficient mercury nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 86, p. 024308, Aug 2012.
- [70] K. Bennaceur, J. Dobaczewski, T. Haverinen, and M. Kortelainen, “Properties of spherical and deformed nuclei using regularized pseudopotentials in nuclear dft,” *arXiv :2003.10990*, 2020.
- [71] J. D. Zumbro, E. B. Shera, Y. Tanaka, C. E. Bemis, R. A. Naumann, M. V. Hoehn, W. Reuter, and R. M. Steffen, “ $e2$ and $e4$ deformations in $^{233,234,235,238}\text{U}$,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 53, pp. 1888–1892, Nov 1984.
- [72] B. Singh, R. Zywina, and R. B. Firestone, “Table of superdeformed nuclear bands and fission isomers : (october 2002),” *Nucl. Data Sheets*, vol. 97, no. 2, p. 241, 2002.
- [73] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, and J. Maruhn, “Pairing gaps from nuclear mean-field models,” *Eur. Phys. J. A*, vol. 8, p. 59, 2000.
- [74] P.-G. Reinhard, W. Nazarewicz, M. Bender, and J. A. Maruhn, “Lipkin-Nogami pairing scheme in self-consistent nuclear structure calculations,” *Phys. Rev. C*, vol. 53, no. 6, p. 2776, 1996.
- [75] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet, and H.-B. Håkansson, “Towards a better parametrisation of Skyrme-like effective forces : A critical study of the SkM force,” *Nuclear Physics A*, vol. 386, no. 1, pp. 79 – 100, 1982.
- [76] J.-F. Berger, M. Girod, and D. Gogny, *Comput. Phys. Comm.* **63**, 365 (1991).
- [77] F. Chappert, N. Pillet, M. Girod, and J.-F. Berger, “Gogny force with a finite-range density dependence,” *Phys. Rev. C*, vol. 91, p. 034312, Mar 2015.
- [78] J. Dechargé and D. Gogny, “Hartree-fock-bogolyubov calculations with the $d1$ effective interaction on spherical nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 21, pp. 1568–1593, Apr 1980.
- [79] J. Berger, M. Girod, and D. Gogny, “Time-dependent quantum collective dynamics applied to nuclear fission,” *Computer Physics Communications*, vol. 63, no. 1, pp. 365 – 374, 1991.

-
- [80] F. Chappert, M. Girod, and S. Hilaire, “Towards a new Gogny force parameterization : Impact of the neutron matter equation of state,” *Phys. Lett. B*, vol. 668, no. 5, p. 420, 2008.
- [81] M. Martini, A. De Pace, and K. Bennaceur, “Spurious finite-size instabilities with Gogny-type interactions,” *Eur. Phys. J. A*, vol. 55, p. 150, 2019.
- [82] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru, “First Gogny-Hartree-Fock-Bogoliubov Nuclear Mass Model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, no. 24, p. 242501, 2009.
- [83] C. Gonzalez-Boquera, M. Centelles, X. Viñas, and L. Robledo, “New Gogny interaction suitable for astrophysical applications,” *Physics Letters B*, vol. 779, pp. 195 – 200, 2018.
- [84] P. Möller, W. D. Myers, H. Sagawa, and S. Yoshida, “New finite-range droplet mass model and equation-of-state parameters,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 052501, 2012.
- [85] H. Sotani, K. Nakazato, K. Iida, and K. Oyamatsu, “Probing the equation of state of nuclear matter via neutron star asteroseismology,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 201101, May 2012.
- [86] E. Bauge and P. Dossantos-Uzarralde, “Spin-orbit interaction in hartree-fock calculations,” *II Nuovo Cimento A*, vol. 112, pp. 1117–1132, 1999.
- [87] F. Chappert, *Nouvelles paramétrisations de l’interaction nucléaire effective de Gogny*. Theses, Université Paris Sud - Paris XI, June 2007.
- [88] D. Davesne, A. Pastore, and J. Navarro, “Linear response theory with finite-range interactions,” *Progress in Particle and Nuclear Physics*, vol. 120, p. 103870, 2021.
- [89] A. Migdal, *Theory of Finite Fermi Systems And Applications to Atomic Nuclei*. Interscience monographs and texts in physics and astronomy, v. 19, Interscience Publishers, 1967.
- [90] D. Davesne, A. Pastore, and J. Navarro, “Linear response theory in asymmetric nuclear matter for skyrme functionals including spin-orbit and tensor terms,” *Physical Review C*, vol. 89, apr 2014.
- [91] H. De Vries, C. De Jager, and C. De Vries, “Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering,” *Atomic data and nuclear data tables*, vol. 36, no. 3, pp. 495–536, 1987.
- [92] S. Gandolfi, J. Carlson, and S. C. Pieper, “Cold Neutrons Trapped in External Fields,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, no. 1, p. 012501, 2011.
- [93] S. C. Pieper, R. B. Wiringa, and J. Carlson, “Quantum monte carlo calculations of excited states in $a = 6 - 8$ nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 70, p. 054325, Nov 2004.
- [94] K. Schmidt and S. Fantoni, “A quantum monte carlo method for nucleon systems,” *Physics Letters B*, vol. 446, no. 2, pp. 99–103, 1999.
- [95] V. F. Weisskopf, “The problem of an effective mass in nuclear matter,” *Nuclear Physics*, vol. 3, no. 3, pp. 423–432, 1957.
- [96] M. Beiner, H. Flocard, N. Van Giai, and P. Quentin, “Nuclear ground-state properties and self-consistent calculations with the skyrme interaction :(I). Spherical description,” *Nucl. Phys. A*, vol. 238, no. 1, p. 29, 1975.

BIBLIOGRAPHIE

- [97] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and T. R. Werner, “Isospin-breaking corrections to superallowed Fermi β decay in isospin- and angular-momentum-projected nuclear density functional theory,” *Phys. Rev. C*, vol. 86, p. 054316, Nov 2012.
- [98] D. Brink and E. Boeker, “Effective interactions for hartree-fock calculations,” *Nuclear Physics A*, vol. 91, no. 1, pp. 1 – 26, 1967.
- [99] G. Colò, N. and Van Giai, J. Meyer, K. Bennaceur, P. Bonche, *Phys. Rev. C* **70**, 024307 (2004).
- [100] D. Lacroix, T. Duguet, and M. Bender, *Phys. Rev. C* **79**, 044318 (2009).
- [101] G. Hupin, D. Lacroix, and M. Bender, “Formulation of functional theory for pairing with particle number restoration,” *Phys. Rev. C*, vol. 84, no. 1, p. 014309, 2011.
- [102] W. Satuła and J. Dobaczewski, “Simple regularization scheme for multireference density functional theories,” *Phys. Rev. C*, vol. 90, p. 054303, 2014.
- [103] J. Sadoudi, *Contraintes sur la fonctionnelle de la densité d’énergie nucléaire et nouvelles formes analytiques possibles*. Theses, Université Paris Sud - Paris XI, Sept. 2011.
- [104] B. Bally, B. Avez, M. Bender, and P.-H. Heenen, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 162501 (2014).
- [105] A. Bulgac and Yongle Yu, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 042504.
- [106] D. Lacroix and K. Bennaceur, “Semicontact three-body interaction for nuclear density functional theory,” *Physical Review C*, vol. 91, no. 1, p. 011302, 2015.
- [107] A. Bulgac, “Local density approximation for systems with pairing correlations,” *Phys. Rev. C*, vol. 65, no. 5, p. 051305, 2002.
- [108] T. Sawaguri and W. Tobocman, “"finite-range effects in distorted-wave born-approximation calculations of nucleon transfer reactions",” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 8, no. 11, pp. 2223–2230, 1967.
- [109] F. Chappert, M. Girod, and S. Hilaire, “Towards a new Gogny force parameterization : Impact of the neutron matter equation of state,” *Physics Letters B*, vol. 668, no. 5, pp. 420 – 424, 2008.
- [110] D. Gogny and R. Padjen, “The propagation and damping of the collective modes in nuclear matter,” *Nuclear Physics A*, vol. 293, no. 3, pp. 365 – 378, 1977.
- [111] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1970).
- [112] K. Bennaceur, A. Idini, J. Dobaczewski, P. Dobaczewski, M. Kortelainen, and F. Raimondi, “Nonlocal energy density functionals for pairing and beyond-mean-field calculations,” *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, vol. 44, p. 045106, mar 2017.
- [113] 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.
- [114] G. H. Bordbar and M. Bigdeli, “Lowest order constrained variational calculation of polarized nuclear matter with the modern AV_{18} potential,” *Phys. Rev. C*, vol. 76, p. 035803, Sep 2007.
- [115] J. Dobaczewski, P. Sarrarini, private communication.

-
- [116] G. Audi, M. Wang, A. Wapstra, F. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer, “The ame2012 atomic mass evaluation,” *Chinese Physics C*, vol. 36, pp. 1287–1602, dec 2012.
- [117] M. Wang, G. Audi, A. H. Wapstra, F. G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer, “The ame2012 atomic mass evaluation (ii). tables, graphs and references,” *Chin. Phys. C*, vol. 36, no. 12, pp. 1603–2014, 2012.
- [118] I. Angeli and K. Marinova, “Table of experimental nuclear ground state charge radii : An update,” *At. Data Nucl. Data Tables*, vol. 99, no. 1, pp. 69–95, 2013.
- [119] T. Lesinski, M. Bender, K. Bennaceur, T. Duguet, and J. Meyer, “Tensor part of the Skyrme energy density functional : Spherical nuclei,” *Physical Review C*, vol. 76, no. 1, p. 014312, 2007.
- [120] S. Hilaire, J.-F. Berger, M. Girod, W. Satuła, and P. Schuck, “Mass number dependence of nuclear pairing,” *Phys. Lett. B*, vol. 531, no. 1–2, p. 61, 2002.
- [121] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard, “Error estimates of theoretical models : a guide,” *J. Phys. G*, vol. 41, p. 074001, 2014.
- [122] S. Takahara, N. Onishi, and N. Tajima, “Pairing correlation in nuclear matter from Skyrme force,” *Physics Letters B*, vol. 331, no. 3, pp. 261 – 265, 1994.

