

# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>i</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>iii</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>vii</b>
<b>1 Systèmes de fermions en interaction forte</b>	<b>1</b>
1.1 Systèmes quantiques à N-corps : Éléments de formalisme . . . . .	2
1.2 Systèmes nucléaires : Particularités et singularités . . . . .	7
1.3 Conclusions . . . . .	25
1.4 Références . . . . .	25
<b>2 Traitement relativiste des corrélations quantiques</b>	<b>27</b>
2.1 Description relativistes du système . . . . .	29
2.2 Théorie Hartree-Fock . . . . .	34
2.3 Prise en compte des corrélations particules-trous dites de <i>bulk</i> . . . . .	35
2.4 Corrélations de type particules-particules . . . . .	46
2.5 Conclusions . . . . .	60
2.6 Références . . . . .	61
<b>3 Symétries brisées, phénomènes émergents et agrégation nucléaire</b>	<b>65</b>
3.1 Symétrie spatiales . . . . .	67
3.2 Réalisation pratique . . . . .	75
3.3 Champ-moyen sous contraintes multiples . . . . .	88
3.4 Agrégation nucléaire . . . . .	92
3.5 Transition de phases quantiques . . . . .	103
3.6 Références . . . . .	108



# Liste des figures

1.1	Illustration de l'approximation de particules indépendantes, on remplace les particules en interaction par un ensemble de particules indépendantes soumises à un champs moyen généré par l'ensemble des particules. . . . .	3
1.2	Représentation de la partie centrale du potentiel nucléon-nucléon, obtenu en utilisant le potentiel Reid93 . . . . .	4
1.3	Impacts de l'appariement : Les discontinuités entres systèmes pairs et impairs traduisent les effets de l'appariement sur l'énergie de liaison des noyaux. . . . .	6
1.4	Spectre d'excitation du $^{238}\text{Pu}$ , présentant une structure de bandes rotationnelles, signe de la déformation du système, les énergies (à gauche du spectre) sont donnée en keV . . . . .	7
1.5	Hiérarchie des contributions à l'interaction nucléaire dans le cadre d'une théorie effective chirale. (Les nucléons sont représentés en traits pleins, et les pions en pointillés) [MS16]. . . . .	11
1.6	Graphe de Feynman représentant l'échange au niveau arbre d'un pion entre nucléons . . . . .	12
1.7	Exemples de diagrammes irréductibles d'échanges de 2 pions corrélés, le baryon $\Delta$ est un état isobarique résonant virtuel . . . . .	12
1.8	Exemple d'un terme correspondant à l'échange de 3 pions corrélés (les pions sont représentés en pointillés) . . . . .	12
1.9	Équation d'état de la matière nucléaire pour différents schémas de troncation du lagrangien effectif (en haut). Comparaison à l'expérience des spectres d'excitations obtenues pour différentes interactions chirales pour quelques noyaux légers . . . . .	13
1.10	Graphe de Feynman représentant l'interaction entre nucléons dans le cadre de l'approximation OBE . . . . .	13
1.11	Potentiel central d'interaction nucléon-nucléon en terme d'échange de mésons . . . . .	14
1.12	Spectre des désintégrations en deux pions, en rouge une distribution Breit-Wigner matérialisant la présence d'une résonance ; le méson $\rho$ [DtSC12] . . . . .	14
1.13	Spectre obtenu suite à la diffusion de pions sur des noyaux de $^{12}\text{C}$ , $^{40}\text{Ca}$ , et $^{208}\text{Pb}$ on note la présence d'une résonance correspondant au $\sigma$ [ACSW99] . . . . .	15
1.14	Représentation schématique de l'équation de Bethe-Salpeter, en traits doubles le propagateur nucléonique exact . . . . .	17
1.15	Equation de Bethe-Salpeter dans le cadre où l'on ne considère que les contributions "en échelle" de l'interaction nue (zigzags), le propagateur exact est représenté traits doubles . . . . .	17
1.16	Représentation schématique de l'équation auto-cohérente de Dyson à deux points, la self-energy est notée $\Sigma$ . . . . .	18

1.17	Impact des corrélations à deux-corps sur une fonction d'onde à deux nucléons en fonction de leur distance relative, le potentiel nucléon-nucléon est représenté schématiquement. Figure tirée de [MP00] . . .	18
1.18	Saturation de la matière nucléaire symétrique pour des modèles relativistes (symboles pleins) et non-relativistes (symboles vides), le rectangle bleu indique la zone empirique de saturation. Figure issue de [Fuc04] . . . . .	19
1.19	Différentes paramétrisations de la force forte dans l'espace réel (à gauche) et représentation de cette interaction dans l'espace des moments (à droite) . . . . .	20
1.20	Évolution des éléments de matrices de l'interaction dans l'espace des moments, par souci de simplicité on introduit le paramètre $\lambda = s^{-1/4}$ quantifiant la suppression des éléments extras-diagonaux. Adapté de [BFS10]. . . . .	21
1.21	Représentation diagrammatique des contributions à la fonction de vertex dans le milieu $\Xi$ décrite par l'équation (1.42), les vertex d'interaction dans le vide sont matérialisé par des points les propagateurs mésoniques sont en pointillés et les propagateurs nucléoniques en traits pleins . . . . .	22
1.22	Dépendance en densité des constantes de couplages normalisés des mésons $\sigma$ (à gauche) et $\omega$ à droite, les symboles pleins correspondent à des résultats issus de Dirac-Brueckner, la paramétrisation (1.48) est tracée en trait plein, figure issue de [TW99] . . . . .	24
2.1	Exemple de diagrammes divergents de type polarisation du vide intervenant en prenant en compte la contribution de la mer de Dirac . . . . .	33
2.2	Comparaison des techniques de renormalisation NSET et de l'approximation no-sea issu de [Kar10] . . . . .	33
2.3	Diagramme représentant la correction du second ordre à l'énergie Hartree-Fock dans le cadre MBPT . . . . .	37
2.4	Exemple d'un graphe orienté à 4 sommets et 5 arcs . . . . .	38
2.5	Diagrammes de Hugenholtz contribuant à la correction à l'ordre 3 en perturbation de l'énergie. . . . .	39
2.6	Contribution directe (terme de Hartree) . . . . .	41
2.7	Contribution d'échange (terme de Fock) . . . . .	42
2.8	Comparaison de l'énergie de séparation à deux neutrons pour des isotopes du Magnésium. Avec terme d'échange (PKO2) et sans (DD-ME2), en noir les valeurs expérimentales. (Issu de [EKPN11]) . . . . .	43
2.9	Contributions directes à la self-énergie (S et V) . . . . .	44
2.10	Schéma de résolution dans le cadre d'approche d'un champ moyen relativiste auto-cohérent . . . . .	45
2.11	Spectres du $^{210}\text{Po}$ et du $^{210}\text{Bi}$ , l'état $0^+$ du Polonium est bien plus lié que dans le Bismuth . . . . .	46
2.12	Énergie de l'état $2+$ pour 15 isotopes de l'étain. On note la remarquable stabilité de l'énergie autour de $\simeq 2$ MeV . . . . .	46
2.13	Représentation en terme de graphe orienté de la matrice $A_3$ . . . . .	48
2.14	Graphe $\mathcal{G}_t$ après transformation, les sommets extrémaux sont fusionnés, le poids des boucles supplémentaires vaut 1 dans ce cas . . . . .	49
2.15	Représentation des bases intervenant dans la décomposition de Bloch-Messiah-Zumino de la transformation de Bogoliubov . . . . .	52

2.16	Énergies de séparation à deux neutrons pour des isotopes de l'étain. Les lignes brisées représentent l'interaction relativiste pure, les traits pleins l'approche hybride ; les points correspondent aux données expérimentales. Figure issue de [SR02] . . . . .	55
2.17	Principe de la brisure et restauration d'une symétrie, dans le cas d'un potentiel en "chapeau mexicain". En rouge à droite l'état conservant la symétrie, les états en bleus correspondent aux modes de Goldstone, dégénérés en énergie et brisant la symétrie. A droite on illustre la somme sur l'ensemble des modes de Goldstone à même de restaurer cette symétrie. . . . .	56
2.18	Les différents agencements possibles pour les paires nucléoniques. T indique l'isospin total, et S le spin total. . . . .	58
2.19	Figure récapitulative des théories et modèles présentés dans ce chapitre. Les hexagones grisés indiquent un formalisme. Les indications le long des flèches les techniques employées. . . . .	61
3.1	Représentation schématique de l'effet des modes collectifs sur la forme du noyau, à gauche une configuration de champ-moyen figée, à droite l'interaction résiduelle engendre des déformations dites <i>prolate</i> (en rouge) et <i>oblate</i> (en bleu). . . . .	68
3.2	Deux chemins de fission du $^{240}\text{Pu}$ , en trait plein les solutions axiales, en pointillés les solutions triaxiales. Les solutions d'énergie minimale sont celles de symétrie axiale. Figure issue de [BHR03] . . . . .	70
3.3	Représentation des dégénérescences (points bleus) associés à une symétrie continue du Hamiltonien. . . . .	73
3.4	Exemples d'action d'opérateurs multipolaires sur la distribution de matière au sein du noyau, les codes axiaux permettent d'obtenir des déformations quadripolaires, les codes brisant la parité permettent d'obtenir en plus des déformations octupolaires et enfin les codes triaxiaux permettent d'incorporer en plus les déformations hexadecapolaires et quadripolaires triaxiales. . . . .	74
3.5	Coupe de la densité de l'état fondamental de l'Uranium 234 dans le référentiel intrinsèque obtenue dans le cadre d'une approche relativiste	79
3.6	Énergie totale de l' $^{234}\text{U}$ vis-à-vis du moment quadripolaire $\beta_2$ . . . . .	80
3.7	Énergie totale de l' $^{224}\text{Ra}$ vis-à-vis du moment quadripolaire $\beta_2$ . . . . .	81
3.8	Représentation spatiale de la densité du Radium 224 dans le référentiel intrinsèque du noyau, la contribution octupolaire est responsable de la forme en "poire" de ce noyau. . . . .	82
3.9	PES du Radium 224 dans l'espace des moments quadripolaire $\beta_2$ et octupolaires $\beta_3$ . Le point rouge indique le minima obtenu en imposant une symétrie axiale, le point blanc indique le vrai minimum en énergie, présentant une déformation axiale et octupolaire. . . . .	82
3.10	Évolution de l'énergie de liaison totale du $^{190}\text{Pt}$ en fonction du moment quadripolaire $\beta_2$ . . . . .	85
3.11	PES du Platine 190 dans l'espace des moments quadripolaire $\beta_2$ et octupolaires $\beta_3$ . Le point rouge indique le minimum global de cette carte. . . . .	86
3.12	Énergies de liaison dans le plan $(\beta_2, \gamma)$ les contours indiquent les lignes isoénergétiques, le minimum global de cette surface est indiqué par le point rouge, figure issue de [NevacRV+10] . . . . .	86
3.13	Densité du $^{190}\text{Pt}$ dans le référentiel intrinsèque du noyau en vue de coupe selon les $Ozx$ (en haut à gauche) $Ozy$ (en haut à droite) et $Oyx$ (en bas) . . . . .	87

3.14	Densité du $^{190}\text{Pt}$ dans le référentiel intrinsèque du noyau en représentation tridimensionnelle . . . . .	87
3.15	Représentation schématique d'un algorithme génétique usuel. . . . .	89
3.16	Évolution de l'énergie de liaison rapportée au nombre de nucléons, pour plusieurs éléments légers. Les noyaux $N=Z$ sont plus liées que leurs isotopes respectifs . . . . .	93
3.17	Réponse en énergie du $^{20}\text{Ne}$ vis-à-vis d'une déformation axiale, l'état fondamental est indiqué par le segment noir. . . . .	94
3.18	Densité dans le référentiel intrinsèque du $^{20}\text{Ne}$ , on note l'apparition de deux agrégats de densité qui correspondent à des clusters. . . . .	95
3.19	Densité dans le référentiel intrinsèque du $^{20}\text{Ne}$ à droite, mesure de localisation associée au même élément à droite. . . . .	96
3.20	Énergie totale normalisée du système dans le plan $(\beta_2, \beta_3)$ le minimum global est indiqué par le point rouge. Figure issue de [MacEK+18] . . . . .	97
3.21	Densité dans le référentiel intrinsèque de l'état $J = 0^+$ du $^{20}\text{Ne}$ (à droite), mesure de localisation associée (à droite). Le cluster est localisé entre les traits en pointillés. . . . .	97
3.22	Densités dans le référentiel intrinsèque du $^{20}\text{Ne}$ , pour des paramétrisations relativistes et non-relativiste de portée nulle et de portée finie. . . . .	98
3.23	Représentation schématique des trois phases possibles dans le noyau caractérisé par le paramètre $\alpha_{\text{loc}}$ . . . . .	99
3.24	Dispersion radiale des fonctions d'ondes du $^{288}\text{Cf}$ modélisé par un oscillateur harmonique (symboles pleins). Dispersion minimales et maximales pour chaque $n$ dans le cadre des approximations (3.94) et (3.97) (symboles vides) . . . . .	100
3.25	Évolution des états neutroniques occupés des blocs de spin-parité du $^{20}\text{Ne}$ dans une approche RMF (traits pleins), dispersion de la fonction d'onde du dernier état occupé (trait bleu en pointillés). Le panel du bas présente les densités des neutrons de valences pour les déformations correspondants aux minima (a,b,c,d) et maxima (A,B,C,D) de la dispersion . . . . .	102
3.26	Représentation où les noyaux dont la dispersion des états de valence est faible (cercles rouges) sont superposés au noyaux expérimentalement connus dans le plan N-Z. La dispersion est calculée dans le cadre d'une approche RHB axiale ou l'on adopte la paramétrisation DD-ME2 ainsi qu'une interaction d'appariement de portée finie. . . . .	103
3.27	Représentation schématique du passage d'une forme sphérique correspondant au groupe de rotation $O(3)$ , au groupe ponctuel tétraédrique $T_d$ . . . . .	104
3.28	Symétrie miroir appliquée à la configuration tétraédrique . . . . .	104
3.29	Évolution de l'énergie totale de l' $^{16}\text{O}$ lorsque l'on augmente son rayon. Le trait noir indique l'état fondamental du système, le trait bleu indique la transition entre distribution continue et distribution tétraédrique. Trois approches sont présentés, un calcul sphérique sans appariement (en rouge) un calcul sphérique avec appariement(en vert) l'énergie d'appariement associée est représentée en gris, un calcul où l'on n'impose aucune symétrie (en jaune) . . . . .	105
3.30	Densité de l' $^{16}\text{O}$ dans le référentiel intrinsèque, à gauche densité de l'état fondamental à droite densité tétraédrique au point critique correspondant au rayon $R_{\text{rms}}^{(\text{Critique})} = 5.9$ . . . . .	106
3.31	Évolution du moment tétraédrique en fonction du rayon dans le cadre de l'approche RHB, la transition a lieu pour $R_{\text{rms}}^{(\text{Critique})} = 5.9$ . . . . .	107

# Liste des tableaux

2.1	Nombres de diagrammes de Hugenholtz dans le cadre du formalisme MBPT et temps d'exécution du programme ADG sur un ordinateur portable . . . . .	40
3.1	Tableau récapitulatif de l'impact des paramètres d'un algorithme génétique sur l'efficacité mesurée par le nombre d'itérations avant convergence . . . . .	91
3.2	Tableau récapitulatif de l'efficacité en terme de nombre d'itérations des algorithmes biomimétiques par rapport à l'approche classique. . .	92



# Chapitre 1

## Systèmes de fermions en interaction forte

*« The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble. »*

Paul Dirac

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Systèmes quantiques à N-corps : Éléments de formalisme . . .</b>	<b>2</b>
1.1.1	Hamiltonien à N-corps . . . . .	2
1.1.2	Approximation de particules indépendantes . . . . .	2
1.1.3	L'approximation Hartree-Fock . . . . .	3
1.1.4	Théorie de la fonctionnelle de la densité . . . . .	4
	Théorème de Kohn-Hohenberg . . . . .	4
	Schéma de Kohn-Sham . . . . .	5
	DFT en physique nucléaire : Méthodes EDF . . . . .	6
1.1.5	Brisures de symétries . . . . .	6
<b>1.2</b>	<b>Systèmes nucléaires : Particularités et singularités . . . . .</b>	<b>7</b>
1.2.1	Interaction forte . . . . .	7
	QCD : Chromodynamique quantique . . . . .	7
1.2.2	Théories effectives . . . . .	8
	Principe de construction . . . . .	8
	Symétrie chirale . . . . .	9
	Theorie effective chirale $\chi$ -EFT . . . . .	10
	Approximation OBE . . . . .	13
1.2.3	Interaction forte dans le milieu . . . . .	16
	Méthodes Dirac-Brueckner-Hartree-Fock . . . . .	16
	Méthodes de renormalisation . . . . .	19
1.2.4	Dépendance phénoménologique . . . . .	22
	Lagrangien phénoménologique . . . . .	23
	Formes des constantes de couplage . . . . .	23
<b>1.3</b>	<b>Conclusions . . . . .</b>	<b>25</b>
<b>1.4</b>	<b>Références . . . . .</b>	<b>25</b>

---

## 1.1 Systèmes quantiques à N-corps : Éléments de formalisme

### 1.1.1 Hamiltonien à N-corps

Le noyau atomique est défini comme un assemblage mésoscopique de nucléons les protons et neutrons, particules quantiques non-élémentaires de nature fermionique, confinées par une force effective issue de l'interaction forte résultant de la structure interne de ces nucléons. Cette force, la force forte, particulièrement complexe à décrire, est attractive pour des distances inter-nucléons supérieures à 1.2 fm et possède un cœur dur pour des distances inférieures. La nature et l'origine de cette force fera l'objet d'une étude détaillée dans une partie ultérieure. Aussi, comprendre la structure nucléaire revient à décrire la dynamique des nucléons, et par conséquent à proposer une méthode de résolution du problème quantique à N-corps. Décrire ce système revient à écrire l'Hamiltonien du système qui en toute généralité peut s'exprimer :

$$H^N = T + V = \sum_{i=1}^N t_i + \sum_{i < j, i < k, i < ..}^N V^{(N)}(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}_{ik}, ..) + V_{\text{ext}} \quad (1.1)$$

Ici,  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ ,  $t_i$  représente l'opérateur cinétique libre du système,  $V^{(N)}$  représente l'interaction nucléaire à N-corps,  $V_{\text{ext}}$  modélise une interaction extérieure. Dès que le nombre de particules dépasse quelques unités (typiquement 3 ou 4) ou que la complexité de l'interaction augmente on ne peut que très difficilement exhiber de solutions exactes aux équations d'Hamilton-Jacobi décrivant la dynamique du système qui permettrait d'obtenir l'expression de la fonction d'onde  $|\Phi\rangle$  du système. Pour être à même de décrire un système nucléaire il faut par conséquent proposer des méthodes de résolution approchées de ce problème.

### 1.1.2 Approximation de particules indépendantes

A priori, l'approximation la plus naïve permettant de résoudre les équations du mouvement d'un système à N-corps quantique, revient à remplacer le système initial, par un système fictif de particules indépendantes. Dans ce cadre toutes les observables peuvent se calculer grâce à la connaissance de la matrice-densité à un corps, quantité s'obtenant aisément. De prime abord ce remplacement semble incongru au vu de l'éminente complexité du problème nucléaire mais surtout de part l'existence du cœur dur répulsif de la force forte. Pourtant l'utilisation de cette approximation permet la compréhension de nombreux phénomènes dans le noyau. Ainsi la mise en évidence d'effets de couches par des expériences de diffusion Coulombienne d'électrons est cohérente avec un modèle de protons indépendants évoluant dans un potentiel central à un corps. D'autre part les profils de densité nucléaire, obtenus également par diffusion d'électrons (de plus faible énergie), correspondent également aux profils de la partie locale de la densité à un corps. Si ce modèle de particules indépendantes semble ne se justifier qu'a posteriori, on peut cependant émettre l'hypothèse qu'au sein du noyau la force ressentie par les nucléons est différente de l'interaction nue entre deux nucléons isolés. Autrement dit les nucléons du noyau agissent comme un écran vis-à-vis de l'interaction, le milieu renormalise le cœur dur répulsif. Ce phénomène peut être mis en avant en étudiant la diffusion de neutrons au sein du noyau. Nous discuterons plus précisément des manières de prendre en compte cette renormalisation au travers des méthodes de Brueckner ou des techniques du groupe de renormalisation de similarité SRG). Cet écrantage de l'interaction vient réduire la magnitude de l'interaction à courte portée ce qui augmente le libre parcours moyen

des nucléons au sein du noyau. Cette augmentation du libre parcours moyen peut se voir comme traduisant une plus grande indépendance de chaque nucléon au sein du noyau.

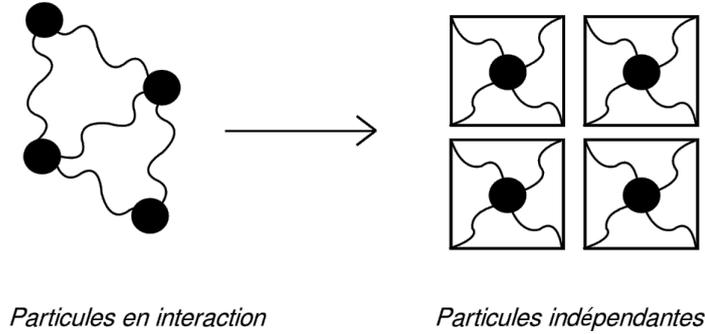


FIGURE 1.1 – Illustration de l’approximation de particules indépendantes, on remplace les particules en interaction par un ensemble de particules indépendantes soumises à un champ moyen généré par l’ensemble des particules.

### 1.1.3 L’approximation Hartree-Fock

Pour un système fermionique la méthode Hartree-Fock (HF) rend compte de l’approximation de particules indépendantes, elle consiste à remplacer la fonction d’onde totale du système par un déterminant de Slater rendant compte de la nature fermionique du système en assurant l’anti-symétrisation correcte du système.

$$\Psi_{\text{Slater}} = \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_2(1) & \dots & \psi_N(1) \\ \psi_1(2) & \psi_2(2) & \dots & \psi_N(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(N) & \psi_2(N) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix} \quad (1.2)$$

Où les  $\psi_i$  sont les fonctions d’ondes des particules indépendantes. En terme opératoire, cette fonction d’onde, s’écrit comme un état produit agissant sur le vide de particules indépendantes :

$$\Psi_{\text{Slater}} = \prod_i^N a_i^\dagger |0\rangle \quad (1.3)$$

La densité à un corps de ce système s’exprime

$$\rho_{ij} = \sum_k^N \psi_k(i) \psi_k^*(j) \quad (1.4)$$

Cette densité (1.4) encode toute l’information disponible sur le système. Comme cas particulier l’énergie dépendra donc uniquement de la matrice densité à 1-corps. Le formalisme adapté pour décrire le système est celui de la seconde quantification (@ALL Je détaille un peu espace de Fock etc ??), permettant d’écrire les opérateurs en termes de chaînes d’opérateurs création et annihilation  $\{a_k, a_k^\dagger\}$ , l’Hamiltonien à N-corps (1.1) s’exprime

$$H = \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \langle ij|\tilde{v}^{(2N)}|kl\rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l + \dots \quad (1.5)$$

Où les éléments de matrices de l’interaction sont correctement anti-symétrisés sont dénotés  $\tilde{v}$ , l’énergie du système  $E_{HF}$  devient une fonctionnelle de la densité à 1-corps

et est définie comme

$$E_{HF} = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ij,kl} \tilde{v}_{ij,kl} \rho_{ki} \rho_{lj} + \dots \quad (1.6)$$

Enfin l'état-fondamental dans l'approximation HF s'obtient en utilisant le principe variationnel de Rayleigh-Ritz sur les états de particules indépendantes

$$\delta [ \langle \Psi | H | \Psi \rangle - E \langle \Psi | \Psi \rangle ] = 0 \quad (1.7)$$

Cette approche bien que ne capturant pas toutes les corrélations nécessaire à la bonne description d'un système de particules en interaction remporte de nombreux succès en physique moléculaire ou en chimie quantique, malheureusement une application directe de l'approximation HF à la physique nucléaire n'est pas en mesure de donner des résultats. En effet la forme très particulière de l'interaction nucléaire (en particulier son cœur dur) représentée en figure (1.2) cause une divergence Ultraviolette aux faibles distances inter-nucléonique.

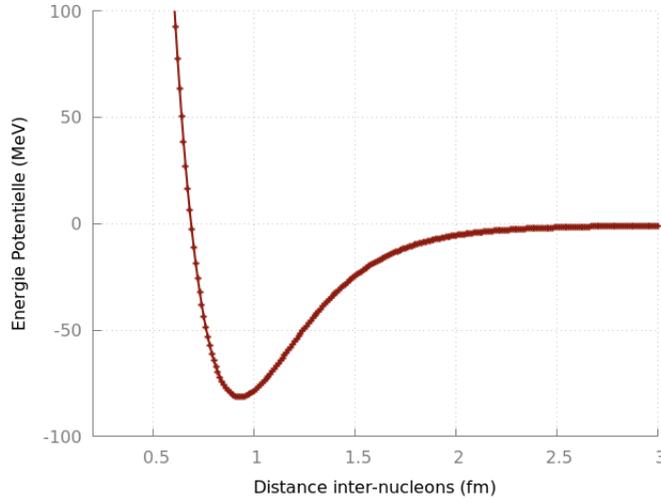


FIGURE 1.2 – Représentation de la partie centrale du potentiel nucléon-nucléon, obtenu en utilisant le potentiel Reid93

La contribution directe au potentiel HF s'exprimant en représentation coordonnées

$$E_{\text{Hartree}}(r) = \int d^3 \mathbf{r}' \tilde{v}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(r') \quad (1.8)$$

Il apparaît clairement qu'au centre du noyau, où le potentiel  $v(\mathbf{r}')$  tend vers l'infini, que l'intégrale ne peut converger qu'à la seule condition de densité nulle. Ce qui exclut dans ce cadre l'étude du noyau atomique en partant directement de l'Hamiltonien décrivant l'interaction nucléaire nue. Pour pallier à ce problème majeur, les physiciens nucléaires ont introduit le concept d'Énergie Fonctionnelle de la Densité (EDF), conceptuellement proche des méthodes fonctionnelles de la densité (Density Functional Theory – DFT) elle en diffère factuellement. Pour comprendre au mieux la philosophie motivant les techniques EDF il est nécessaire de présenter quelques éléments de formalisme de la DFT.

#### 1.1.4 Théorie de la fonctionnelle de la densité

##### Théorème de Kohn-Hohenberg

Une des méthodes les plus efficaces et élégantes pour résoudre le problème à N-corps quantique est l'utilisation d'une fonctionnelle de la densité. Cette approche

est extrêmement utilisée dans diverses branches de la physique ou de la chimie pour décrire des systèmes électroniques à N-corps (solides, molécules, atomes etc...). Le concept fondamental à l'origine de cette théorie est postulé dès 1964 par Hohenberg et Kohn [HK64], les observables de l'état fondamental du système peuvent être représentés par des fonctionnelles de la densité de ce même état fondamental. Il ne s'agit donc pas d'exprimer une fonction d'onde à N-corps solution approchée du problème mais d'exprimer l'énergie du système comme fonctionnelle de la densité du système. Ce premier théorème de Kohn-Hohenberg stipule l'existence d'une fonctionnelle  $F[\rho]$  définie par

$$E[\rho]_{V_{\text{ext}}} = \langle \Phi | H^N | \Phi \rangle = F[\rho] + \int d\mathbf{r} V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

Cette fonctionnelle a comme particularité majeure de définir une classe d'universalité à savoir de ne dépendre que de la partie interaction du Hamiltonien et est indépendante du potentiel extérieur. La densité de l'état fondamental et son énergie sont alors obtenus par minimisation de  $E[\rho]_{V_{\text{ext}}}$  en appliquant le principe variationnel à la densité  $\rho(\mathbf{r})$  sous contrainte de sa positivité et de sa normalisation au nombre de particules du système. En d'autres termes le théorème de Kohn-Hohenberg stipule qu'il existe une fonctionnelle admettant un minimum localisé à la densité de l'état fondamental du système dont la valeur donne l'énergie exacte de l'état fondamental du système. Une preuve des versions classiques et relativistes de ce théorème se trouve en annexe. Autrement dit, il est possible pour un système de fermions confinés par un potentiel externe, d'exhiber, sans approximation, une correspondance exacte entre le système en interaction initial et un système auxiliaire de particules indépendantes. Ainsi une fois ce théorème établi la détermination des observables de l'état fondamental revient à résoudre l'équation

$$\frac{\delta E[\rho]_{V_{\text{ext}}}}{\delta \rho} = \frac{F[\rho]}{\delta \rho} + V_{\text{ext}} = 0 \quad (1.10)$$

Néanmoins, ce théorème ne donne aucune indication sur la manière formelle de construire la fonctionnelle  $F[\rho]$ .

### Schéma de Kohn-Sham

Un schéma de construction systématique fut proposé par Kohn et Sham [KS65]. La première étape de cette méthode suppose que la densité d'un système fermionique en interaction peut être identique à celle d'un système fictif de particules indépendantes baignant dans un potentiel externe effectif  $v_{\text{eff}}$ . La fonction d'onde de ce système auxiliaire peut-être écrite sous la forme d'un déterminant de Slater et est solution de l'équation de Kohn-Sham à un corps :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_{\text{eff}}(\vec{r}) \right) \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (1.11)$$

Sous cette hypothèse la fonctionnelle de l'énergie totale (1.9) se sépare à présent en

$$F[\rho] = T[\rho] + E_{\text{Hartree}}[\rho] + E_{\text{EC}}[\rho] \quad (1.12)$$

$T[\rho]$  la fonctionnelle énergie cinétique du système auxiliaire,  $E_{\text{Hartree}}[\rho]$  est la fonctionnelle de Hartree dépendante du potentiel d'interaction à deux corps

$$E_{\text{Hartree}}[\rho] = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}') \quad (1.13)$$

Enfin le terme  $E_{\text{EC}}[\rho]$  prends en compte le terme d'échange et les corrélations supplémentaires non-prises en compte dans (1.13), si ce terme est négligé on retrouvera

l'approximation de Hartree. La difficulté principale dans l'établissement d'une fonctionnelle réside à présent dans la construction de la fonctionnelle échange-corrélations

$$E_{EC}[\rho] = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{E}_{EC} \quad (1.14)$$

dans le cadre de cette étude nous utiliserons l'approximation de la densité locale (LDA), approximation qui consiste à considérer que le terme  $\mathcal{E}_{EC}$  ne dépend que de la densité locale. Les méthodes de type Kohn-Sham couplés à la LDA ont permis de nombreuses avancées en chimie quantique ou en physique atomique son application à la description de système nucléaire présente toutefois des difficultés supplémentaire.

### DFT en physique nucléaire : Méthodes EDF

Les méthodes EDF furent introduites avec pour objectif spécifique la description d'un système de nucléons auto-confinés par force forte. Conceptuellement il s'agit à l'instar de la DFT, de remplacer l'étude du problème à N-corps en interaction par celle de l'énergie fonctionnelle de la densité (EDF). Cependant le théorème d'Hohenberg-Kohn dans sa version initiale ne s'applique qu'à des systèmes fermioniques formant un état lié sous l'influence d'un potentiel externe. Par conséquent les bases initiales des méthodes EDF sont empiriques et ne sont pas totalement justifiables mathématiquement. Il est important de noter que des efforts dans le but de formaliser l'analogie de (1.9) ont permis d'en proposer un équivalent tardif dans le référentiel intrinsèque du noyau [Mes11],[MBS09]. Pour autant les méthodes EDF présentent une autre particularité creusant la différence avec la DFT.

#### 1.1.5 Brisures de symétries

Pour décrire les propriétés nucléaires, il faut être à même de prendre en compte les corrélations d'appariement à l'œuvre au sein du noyau. Ces corrélations sont à l'origine [Bro73] d'un grand nombre de phénomènes dont les différences des masses et rayons entre les noyaux pairs et impairs [DMN<sup>+</sup>01], ou encore la superfluidité nucléaire au sein des étoiles à neutrons [MMS07]. Pareillement il faut être à même

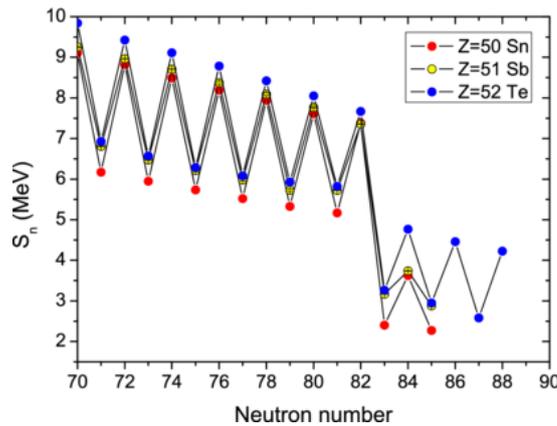


FIGURE 1.3 – Impacts de l'appariement : Les discontinuités entre systèmes pairs et impairs traduisent les effets de l'appariement sur l'énergie de liaison des noyaux.

de décrire la nature anisotrope des noyaux atomiques, cette anisotropie se traduisant par l'apparition de structure remarquable dans leur spectre d'excitation signant la déformation du noyau [CJTW70]. Le traitement des corrélations statiques, est intrinsèquement liée à la notion de brisure de symétrie de l'Hamiltonien initial. Dans le cas de l'appariement il s'agit de briser d'une symétrie unitaire représentée dans le cadre

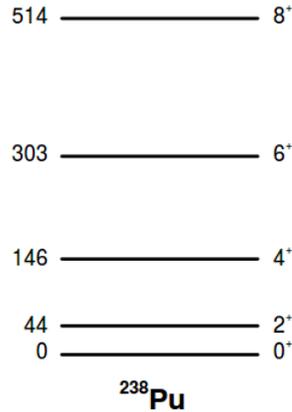


FIGURE 1.4 – Spectre d’excitation du  $^{238}\text{Pu}$ , présentant une structure de bandes rotationnelles, signe de la déformation du système, les énergies (à gauche du spectre) sont donnée en keV

de la théorie des groupes, par un groupe  $U(1)$  donc l’opérateur de Casimir correspond au nombre de particules  $\hat{N}$ . La déformation est associée au groupe  $SO(3)$  dont le Casimir correspond au carré de son moment angulaire  $\hat{J}^2$ . Cette brisure explicite de symétrie, permet de rendre compte des corrélations associées à des modes collectif comme l’appariement ou la déformation nucléaire. Elle s’effectue en construisant un vide de quasi-particules venant remplacer le vide de particule indépendante (1.3), ce nouveau vide de référence brise les symétries initiales du système. On parle dans ce cas d’énergie fonctionnelle de la densité associée à ce vide de référence SR-EDF (Single Reference EDF). Toutefois le théorème d’Hohenberg-Kohn et le schéma de Kohn-Sham, ne sont formulés que dans un cadre préservant les symétries initiales du problème, on ne peut par conséquent établir de lien formel direct entre SR-EDF et DFT. Néanmoins il est possible et nécessaire de restaurer les symétries brisées par des méthodes de mélanges des configurations SR-EDF, ce mélange donne naissance a un formalisme dit de multi références (MR-EDF) qui permet de ré-établir un lien avec la DFT. Le formalisme de ces brisures et restauration de symétries sera exposée dans un chapitre ultérieur.

## 1.2 Systèmes nucléaires : Particularités et singularités

### 1.2.1 Interaction forte

La tâche principale nécessaire à la construction d’une EDF, est l’élaboration d’une interaction effective rendant compte de l’effet de la force nucléaire forte dans le noyau. En toute rigueur pour comprendre la structure nucléaire il faudrait être à même de décrire la dynamique complète de ces nucléons et par conséquent de leurs constituants élémentaires les quarks et les gluons.

### QCD : Chromodynamique quantique

Le cadre formel décrivant les interactions entre quarks et gluons est une théorie quantique des champs spécifique, la chromodynamique quantique (QCD). Cette théorie puise sa source sur une symétrie de jauge non-abélienne locale basée sur le groupe  $SU(3)_{\text{Couleur}}$ , formellement la densité lagrangienne décrivant l’interaction

entre quarks et gluons s'exprime

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = \bar{\psi}_i (i(\gamma^\mu \mathcal{D}_\mu)_{ij} - m\delta_{ij}) \psi_j - \frac{1}{4} \mathcal{G}_{\mu\nu}^a \mathcal{G}_a^{\mu\nu} \quad (1.15)$$

Cette densité covariante est fonction

- Des champs quarkoniques  $\psi$  des  $N_s$  différentes saveurs, décrites dans le cadre du modèle standard par le groupe  $SU(3)_{\text{Saveur}}$ .
- $\gamma^\mu$  sont les matrices de Dirac connectant la représentation spinorielle à la représentation vectorielle de Lorentz.
- La dérivée covariante

$$\mathcal{D}_\mu = \delta_\mu - igA_\mu^a t_a \quad (1.16)$$

Traduisant la connexion affine connectant les champs gluoniques  $A_\mu^a$  dans la représentation adjointe de  $SU(3)_{\text{Couleur}}$  et les générateurs  $t^a$  de ce même groupe ; connexion dont l'intensité est dictée par le couplage  $g$ .

- Le tenseur gluonique  $\mathcal{G}_a^{\mu\nu}$  construit à partir des générateurs  $t^a$ , des constantes de structure de  $SU(3)_{\text{Couleur}}$  définies comme  $[t_a, t_b] = if_{abc}t_c$  et du couplage  $g$

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}^a = \delta_\mu A_\nu^a - \delta_\nu A_\mu^a + gf_{abc}A_\mu^b A_\nu^c \quad (1.17)$$

- Les  $N_s$  masses  $m$  des quarks des différentes saveurs.

En vertu des principes de la renormalisation, la constante de couplage  $g$  et les masses à considérer dépendent de l'échelle d'énergie du phénomène observé. Dans le cadre de la physique nucléaire l'échelle d'observation spatiale caractéristique est de l'ordre de quelques  $fm$  (ce qui correspond à une énergie de quelques MeV) aussi on peut ne prendre en compte que les quarks *up* et *down* (u et d) au vu de la séparation d'échelle entre d'une part, les masses ces deux quarks de l'ordre de quelques MeV et d'autre part celles des autres quarks dont la masse varie de quelques centaines de MeV pour le quark *strange* à quelques GeV pour les quarks lourds. Toutefois à l'échelle nucléaire, le couplage entre quarks et gluons est trop intense pour permettre un traitement perturbatif de la théorie. Dans ce régime la structure de la QCD devient particulièrement complexe, se caractérisant par un vide non-trivial et par le confinement de couleurs des quarks au sein de hadrons. La non-linéarité de cette théorie rend, dans l'état actuel des connaissances, impossible tout traitement analytique. Pour étudier des observables dans ce régime non perturbatif, une formulation discrétisée dans l'espace et le temps de la QCD [Wil74] [CR83] (Lattice QCD) permet de régulariser la théorie. Ce qui permet d'obtenir des résultats majeurs à l'échelle des nucléons [BDOS11], permettant d'obtenir leurs masses mais également aux échelles de la physique nucléaire avec l'obtention de potentiels nucléons-nucléons [IAH07]. Cependant les calculs de QCD sur réseau ont un coût numérique extrême et sont aujourd'hui très loin de permettre une description précise et satisfaisante de la phénoménologie nucléaire.

## 1.2.2 Théories effectives

### Principe de construction

Heureusement, pour calculer des observables nucléaires il n'est pas obligatoire de les obtenir directement depuis QCD, cette dérivation n'étant pas nécessaire dans le cadre d'une théorie des champs effective (EFT). Le principe d'une théorie effective est de ne conserver que les composantes principales pertinentes d'une théorie microscopique pour construire une théorie, plus simple et adaptée à l'échelle d'observation.

En cela les EFT réalisent une approximation de basse énergie d'une théorie microscopique fondamentale. Le mécanisme de troncation repose encore une fois sur le principe de séparation d'échelle ; les degrés de liberté d'une théorie effective ne seront plus confondus aux degrés microscopique mais correspondront à ceux nécessaires à la description d'observables à l'échelle spatiale d'observation. Plus la séparation en énergie entre degrés de liberté effectifs "utiles" et degrés de liberté rendant compte de phénomènes se manifestant à des énergies éloignées de l'échelle d'observations sera grande meilleure sera l'approximation. Dans le cadre de la physique nucléaire de basse énergie, les degrés de liberté naturels d'une théorie effective seraient les hadrons (baryons et mésons). Cette approche est justifiée d'une part par le phénomène des confinements de quarks, en structure hadronique et d'autre part par le fait que ces degrés de liberté sont ceux observés expérimentalement aux énergies considérées. Les modèles développés pour décrire le problème nucléaire en termes hadroniques comme l'hadrodynamique quantique (QHD *Quantum Hadrodhynamic*) n'avaient pas pour objet de s'inscrire formellement dans le cadre des théories effectives, mais peuvent aujourd'hui être formulés dans ce cadre. Il peut exister une infinité de représentation à basse énergie de QCD, toutefois certaines prescriptions se doivent d'être suivies pour construire une EFT chirale ( $\chi$ -EFT) [Wei95] cohérente. La première prescription consiste à imposer les symétries de la théorie microscopie à la théorie effective, dans notre cas les contraintes principales devront être :

- La symétrie de couleur respectée exactement.
- L'invariance de jauge électromagnétique
- L'invariance de Lorentz en imposant la covariance du formalisme.
- Invariant par changement d'Isospin
- La symétrie chirale

### Symétrie chirale

Revenons justement à présent sur la symétrie chirale qui joue un rôle primordial dans le cadre de QCD dans le cas où l'on ne considère que deux saveurs (les quarks u et d). Dans un premier temps dans la limite chirale, où l'on considère les quarks comme des particules de masse nulle<sup>1</sup> on peut réécrire la densité lagrangienne de QCD (1.15)

$$\mathcal{L} = \bar{\phi}_q i \not{D} \phi_q + \mathcal{L}_{\text{gluons}} \quad (1.18)$$

Où  $\phi_q = \begin{pmatrix} \phi_u \\ \phi_d \end{pmatrix}$  est un spineur de Dirac associé aux deux quarks, ici la notation de Feynman est adoptée  $\not{D} = \gamma^\mu D_\mu$  où  $D_\mu$  est la dérivée covariante introduite précédemment. On peut décomposer le spineur en ses composantes d'hélicité droite (D) et gauche (G).

$$\mathcal{L} = \bar{\phi}_q^{(D)} i \not{D} \phi_q^{(D)} + \bar{\phi}_q^{(G)} i \not{D} \phi_q^{(G)} + \mathcal{L}_{\text{gluons}} \quad (1.19)$$

Ici (1.19) est invariant sous toute transformation unitaire, ce qui traduit la symétrie dite chirale du lagrangien. Le groupe des transformations chirales  $U(2)_D \times U(2)_R$  peut se décomposer en partie chirale, vectorielle et axiale.

$$\underbrace{SU(2)_D \times SU(2)_G}_{\text{Chirale}} \times \underbrace{U_V(1)}_{\text{Vecteur}} \times \underbrace{U_A(1)}_{\text{Axial}} \quad (1.20)$$

La symétrie axiale est une anomalie, c'est à dire qu'il s'agit d'une symétrie présente au niveau classique mais absente au niveau quantique elle ne sera pas discutée dans

1. La masse des quarks, issue de la brisure de la symétrie électrofaible traduite par leurs couplages aux champ de Higgs, génère un terme massif  $m_q \bar{\phi}_q \phi_q$  brisant explicitement la symétrie chirale

notre étude. L'état fondamental de QCD respecte la symétrie  $U(1)_V$  qui entraîne la conservation du nombre baryonique, mais ne respecte pas la symétrie chirale, ce qui se traduit expérimentalement par le fait que les hadrons partenaires chiraux (de spin identique et de parité opposée) ne sont pas dégénérés, les énergies des résonances correspondantes étant différentes. La symétrie chirale est de fait brisée spontanément vers le sous groupe  $SU(2)_V$  qui entraîne à son tour la conservation de l'isospin. La brisure spontanée de cette symétrie génère l'apparition de trois modes de Goldstone de masse nulle, associée à la brisure des trois générateurs de  $SU(2)_V$ . Néanmoins dans un cadre réaliste les quarks possédant une masse, la symétrie chirale n'est qu'approximativement réalisée, est n'est plus qu'une pseudo-symétrie par conséquent les trois pseudo-Goldstone acquièrent à leur tour une masse, ce qui dans le cadre d'une théorie à deux saveurs, permet leur identification aux pions  $\{\pi^\pm, \pi^0\}$ . Par conséquent dans le cadre d'une théorie effective chirale ( $\chi$ -EFT) les degrés de liberté intervenant au sein de la densité lagrangienne seront les pions et les nucléons.

### Theorie effective chirale $\chi$ -EFT

Tout en respectant les autres symétries du problème on peut construire [EHM09] un lagrangien effectif

$$\mathcal{L}_{\chi\text{-EFT}} = \mathcal{L}_\pi + \mathcal{L}_{\text{NN}} + \mathcal{L}_{\text{N}\pi} \quad (1.21)$$

Où

- $\mathcal{L}_\pi$  décrit le pion et les interactions pions-pions et peut rendre compte des effets de la non-élémentarité de ce dernier tout en étant contraint par des observables inhérentes au pions libres (leur temps de désintégration notamment).
- $\mathcal{L}_{\text{NN}}$  décrit les interaction inter-nucléons et peut se caractériser par des constantes à basses énergies (LEC) pouvant être obtenues directement par des expériences de diffusion nucléons-nucléons
- $\mathcal{L}_{\text{N}\pi}$  décrit les interactions nucléons-pions et peut être développées en puissance des masses des quarks et des impulsions des pions et des nucléons.

Cette construction schématique permet de représenter l'interaction forte par un échange de pions entre nucléons dans l'espace libre. Cette théorie est développable en perturbation et permet d'introduire des forces à trois corps, quatre corps... qui s'avèrent nécessaires à la reproduction de certaines observables nucléaires [MS16]. On peut ainsi hiérarchiser les différentes contributions au lagrangien effectif comme présenté dans la figure 1.5.

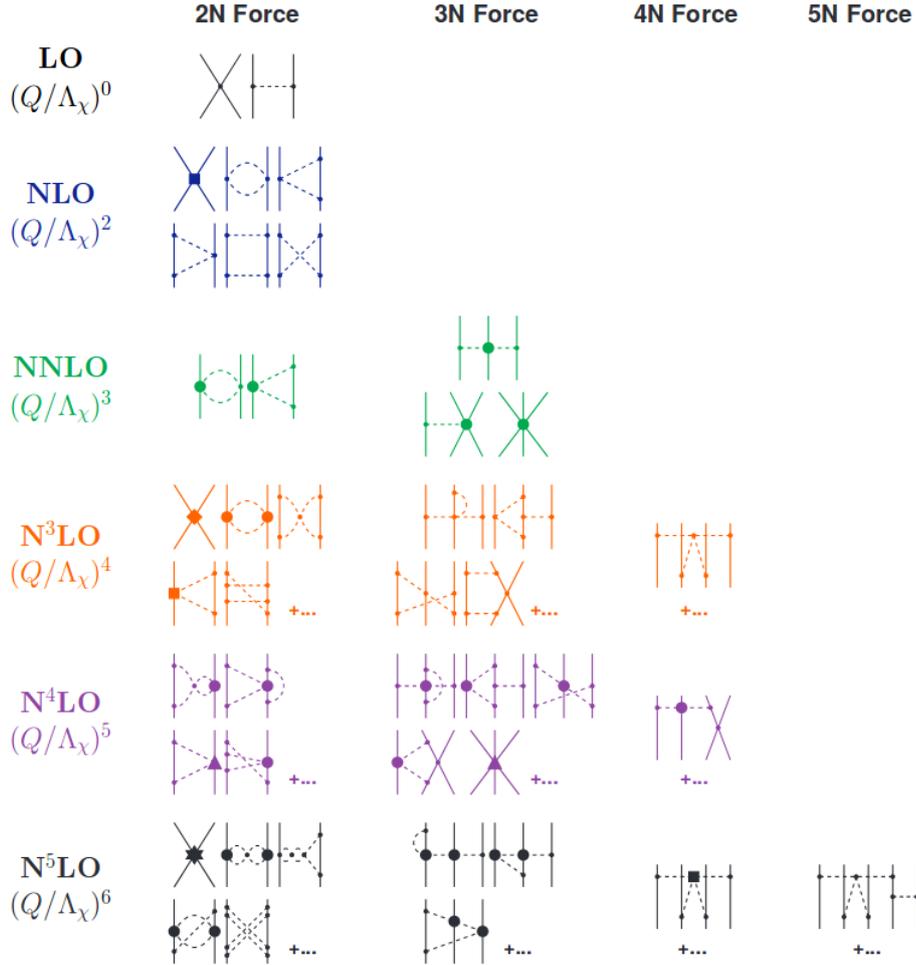


FIGURE 1.5 – Hiérarchie des contributions à l’interaction nucléaire dans le cadre d’une théorie effective chirale. (Les nucléons sont représentés en traits pleins, et les pions en pointillés) [MS16].

A titre d’exemple le lagrangien de Weinberg développé à l’ordre 2 du champ pionique [Wei68], rend compte de ces trois termes, et respecte toutes les symétries mentionnées précédemment

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_{\chi\text{-EFT}} = & \bar{\psi}[i\not{\partial} - M]\psi + \frac{1}{2}\partial_\mu\pi\partial^\mu\pi \\
 & + \frac{g_\pi}{2M}\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_5\tau\psi\partial^\mu\pi - \frac{1}{2}\bar{\psi}\gamma_\mu\tau\psi[\pi \times \partial^\mu\pi]
 \end{aligned}
 \tag{1.22}$$

Où  $\psi$  est le spineur représentant un nucléon,  $M$  la masse nucléonique,  $\pi$  le champ pionique et  $\tau$  une matrice qui paramétrise les transformations d’isospin. On peut séparer l’interaction effective en trois zones de différentes portées, plus le nombre de pions échangés augmente, plus leur masse invariante augmente et plus la portée de l’interaction résultante sera faible.

- La partie longue portée de l’interaction correspond à l’échange d’un pion décorrélé à l’ordre le plus bas )

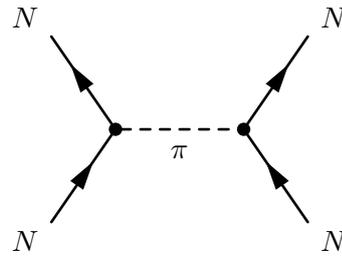


FIGURE 1.6 – Graphe de Feynman représentant l'échange au niveau arbre d'un pion entre nucléons

C'est ce terme qui donne naissance au potentiel attractif d'échange à un pion (OPEP One Pion Exchange Potential), responsable des termes spins-spins et tenseur c'est le terme dominant pour des distance supérieures à  $\simeq 2.5$  fm

- La partie à moyenne portée qui peut être décrite en termes d'échanges de 2-pions corrélés (ne pouvant être absorbés ou transformés en diagramme de la classe précédente).

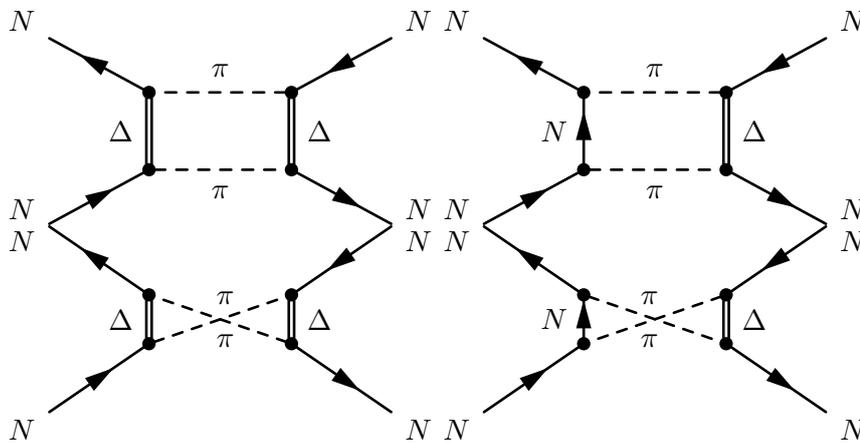


FIGURE 1.7 – Exemples de diagrammes irréductibles d'échanges de 2 pions corrélés, le baryon  $\Delta$  est un état isobarique résonant virtuel

- La partie à courte portée, le cœur dur de l'interaction, est la plus complexe et elle correspond à l'ensemble des échanges de 3 pions corrélés ou plus :

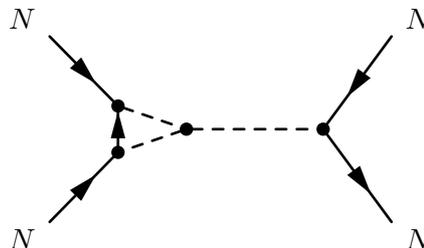


FIGURE 1.8 – Exemple d'un terme correspondant à l'échange de 3 pions corrélés (les pions sont représentés en pointillés)

A partir de cette interaction de remarquables résultats ont pu être obtenus et sont représentés en figure 1.9, à la fois dans le cadre d'étude de l'équation d'état de la matière nucléaire [HK17] et pour certains noyaux atomiques légers [NGV<sup>+</sup>07]

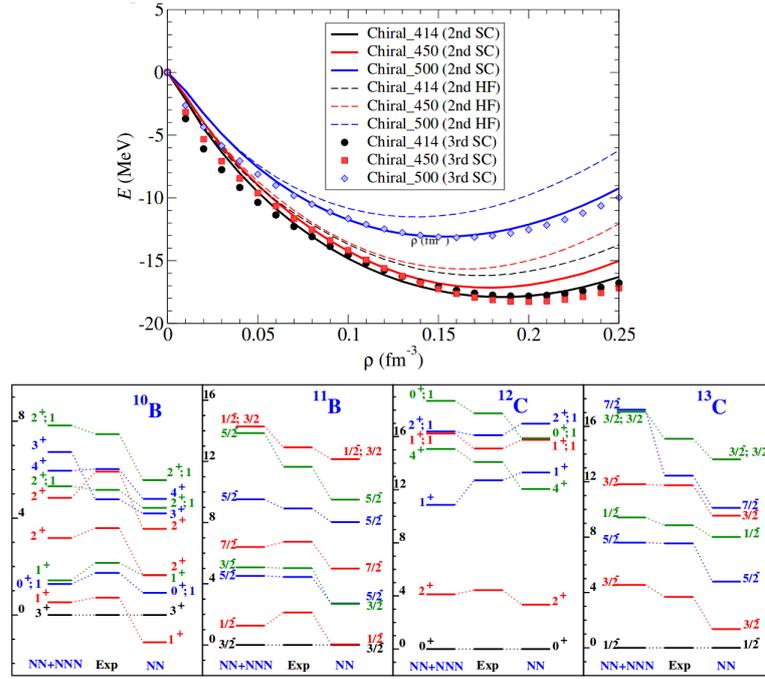


FIGURE 1.9 – Équation d'état de la matière nucléaire pour différents schémas de troncation du lagrangien effectif (en haut). Comparaison à l'expérience des spectres d'excitations obtenues pour différentes interactions chirales pour quelques noyaux légers

Malheureusement l'extension de ces calculs à l'ensemble de la carte des noyaux d'une part mais surtout la bonne reproduction de l'interaction à très courte portée nécessitant l'introduction systématique d'un nombre d'échanges de pions de plus en plus grand reste pour l'instant un objectif hors d'atteinte. Il existe toutefois une simplification permettant de conserver implicitement le lien avec QCD, il s'agit de reparamétriser les divers échanges de pions corrélés en termes d'échanges d'un unique méson, c'est l'approximation OBE (One Boson Exchange).

### Approximation OBE

Le remplacement des termes d'échanges pioniques par des différents champs mésoniques vient augmenter l'effectivité de la théorie, en venant intégrer les degrés et couplages non linéaires de la théorie effective chirale précédente. Schématiquement cela revient à remplacer les propagateurs des pions corrélés par les propagateurs de mésons supplémentaires ne contenant pas de quark étrange  $\{\rho, \pi, \omega, \sigma\}$  (figure 1.10) Chacun de ces mésons décrit une portée spécifique de l'interaction nucléon-

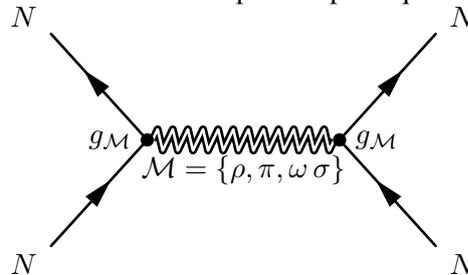


FIGURE 1.10 – Graphe de Feynman représentant l'interaction entre nucléons dans le cadre de l'approximation OBE

nucléon, plus la masse d'un méson est élevée plus la partie de l'interaction due à son échange est courte, on hiérarchise ainsi les différentes contributions à l'interaction nucléaire (figure 1.11)

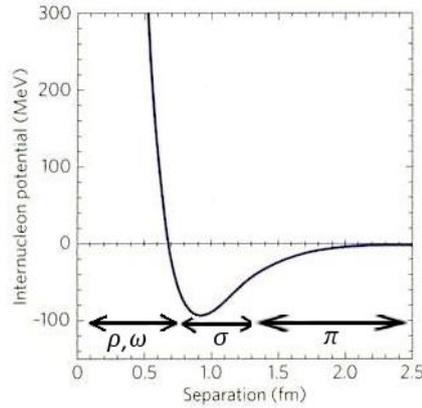
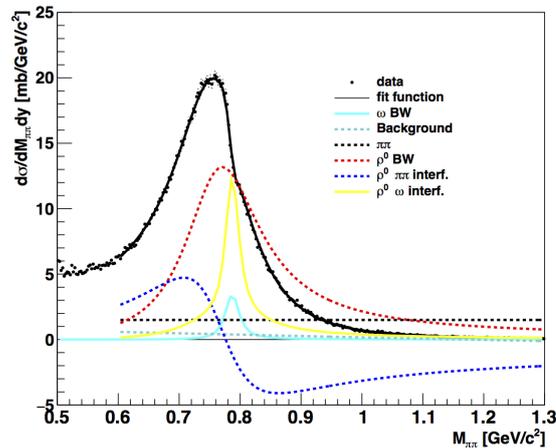


FIGURE 1.11 – Potentiel central d’interaction nucléon-nucléon en terme d’échange de mésons

Il est fondamental de comprendre, que les mésons introduits ne correspondent pas trivialement aux mésons observés dans l’espace libre. Toutefois le modèle OBE trouve de solides fondements dans l’étude détaillée des désintégrations en 2 et 3 pions. Les contributions principale dans le cadre d’un échange de deux pions proviennent des canaux vecteur-isovecteur et scalaire-isoscalaire. Dans le canal vecteur-isovecteur on note la présence d’une résonance possédant la masse et la largeur du méson  $\rho$  (figure 1.12) justifiant l’introduction *ad hoc* de ce méson.


 FIGURE 1.12 – Spectre des désintégrations en deux pions, en rouge une distribution Breit-Wigner matérialisant la présence d’une résonance ; le méson  $\rho$  [DtSC12]

A contrario, la contribution provenant du secteur scalaire-isoscalaire n’est pas matérialisée par une résonance dans le vide, ce qui traduit la virtualité du méson  $\sigma$ , introduit pour rendre compte de l’interaction dans ce canal. Néanmoins, des études plus récentes de diffusion de pions dans le milieu ont permis de montrer l’existence d’une résonance qui correspond à ce dernier méson.

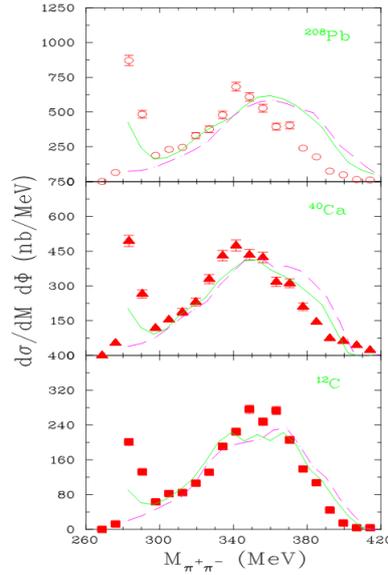


FIGURE 1.13 – Spectre obtenu suite à la diffusion de pions sur des noyaux de  $^{12}\text{C}$ ,  $^{40}\text{Ca}$ , et  $^{208}\text{Pb}$  on note la présence d'une résonance correspondant au  $\sigma$  [ACSW99]

En adoptant une approche constructiviste on peut écrire le lagrangien effectif dans l'approximation OBE sans perte de généralité.

$$\mathcal{L}_{\text{OBE}} = \underbrace{\mathcal{L}_{\text{N}}}_{\text{Nucléons libres}} + \underbrace{\mathcal{L}_{\text{m}}}_{\text{Mésons libres}} + \underbrace{\mathcal{L}_{\text{int}}}_{\text{Interaction nucléon-méson}} \quad (1.23)$$

Plus précisément

- En tant que degrés de liberté fondamentaux de la théorie les nucléons peuvent directement être considérés à cette échelle d'énergie comme des particules ponctuelles représentés par un spineur de Dirac  $\psi$ . Le Lagrangien libre du secteur nucléonique s'écrit

$$\mathcal{L}_{\text{N}} = \bar{\psi}(i\partial - M)\psi \quad (1.24)$$

Où  $M$  correspond à la masse nue et au repos d'un nucléon.

- Les bosons vecteurs des différentes portée de l'interaction se distinguent par leurs masses, leur spin parité et leur isospin notés  $(J^\pi, T)$ . Dans un souci de naturalité et de simplicité on introduit un minimum de champs effectifs.
  - Le 4-potential électromagnétique  $A_\mu$ , permettant de prendre en compte les échanges de photons responsables de l'interaction coulombienne
  - Un méson vecteur-isovecteur  $\vec{\rho}^\mu$  ( $1, 1^+$ ) de masse  $m_\rho$
  - Le méson vecteur-isoscalaire  $\omega^\mu$  ( $1^+, 0$ ) de masse  $m_\omega$
  - Un méson scalaire-isoscalaire  $\sigma$  ( $0^+, 0$ ) de masse  $m_\sigma$
  - Un méson pseudo scalaire-isovecteur,  $\vec{\pi}$  ( $0^-, 1$ ) de masse  $m_\pi$

En outre on introduit les tenseurs associés au photon  $\mathcal{F}^{\mu\nu}$ , et aux mésons  $\rho$  et  $\omega$  ( $\vec{P}^{\mu\nu}, \Omega^{\mu\nu}$ ) d'expression

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{\mu\nu} &= \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \\ \Omega^{\mu\nu} &= \partial^\mu \omega^\nu - \partial^\nu \omega^\mu \\ \vec{P}^{\mu\nu} &= \partial^\mu \vec{\rho}^\nu - \partial^\nu \vec{\rho}^\mu \end{aligned} \quad (1.25)$$

Les vecteurs distingués par des flèches se réfèrent à l'espace d'isospin. Dans ce cadre le Lagrangien décrivant l'évolution mésonique  $\mathcal{L}_m$  prend la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_m = & \frac{1}{2} [(\partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - m_\sigma^2 \sigma^2) + (\partial_\mu \vec{\pi} \partial^\mu \vec{\pi} - m_\pi^2 \vec{\pi}^2) \\ & - (\Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} - m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu) - (\mathcal{F}^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu}) - (\vec{P}_{\mu\nu} \vec{P}^{\mu\nu} - m_\rho^2 \vec{\rho}_\mu \vec{\rho}^\mu)] \end{aligned} \quad (1.26)$$

- Enfin la partie interaction mésons-nucléons se construit en imposant que la densité Lagrangienne reste invariante sous les transformation du groupe de Lorentz, autrement dit  $\mathcal{L}_{\text{int}}$  se doit d'être un scalaire de Lorentz. De plus le Lagrangien doit également être isoscalaire. Il faut donc former les combinaisons à la fois scalaire et isoscalaire les plus simples. On construit ainsi à partir des champs mésoniques, des spineurs nucléoniques les formes bilinéaires qui s'expriment sans perte de généralités sous la forme

$$\bar{\psi} \Gamma_i O_{\tau_i} \psi \quad (1.27)$$

Avec  $O_{\tau_i} \in \{1, \tau_i\}$  où les  $\tau_i$  sont les matrices de Pauli dans l'espace d'isospin et  $\Gamma_i \in \{1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_5 \gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}\}$  où les  $\gamma_i$  sont les matrices de Dirac et  $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu]$  Ainsi on peut construire l'ensemble des combinaisons satisfaisant les contraintes précédemment discutées, la densité lagrangienne s'exprime

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{int}} = & -g_\sigma \bar{\psi} \sigma \psi - \underbrace{g_\pi^{PV} \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \partial^\mu \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} \psi}_{\text{Pseudo Vecteur}} \\ & - i \underbrace{g_\pi^{PS} \bar{\psi} \gamma_5 \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} \psi}_{\text{Pseudo Scalaire}} - g_\omega \bar{\psi} \gamma_\mu \omega^\mu \psi \\ & - g_\rho \bar{\psi} \gamma_\mu \vec{\rho}^\mu \cdot \vec{\tau} \psi - e \bar{\psi} \gamma_\mu \mathcal{A}^\mu \psi \end{aligned} \quad (1.28)$$

A noter que Le couplage pionique compte deux termes issues d'une combinaison pseudo-scalaire (PS) et d'une combinaison pseudo-vecteur (PV).

Par la suite on ajuste les constantes de couplages de (1.28) de manière à ce que les déphasages des amplitudes de diffusion nucléons-nucléons reproduisent correctement l'expérience. Toutefois la simplification inhérente à l'approximation OBE ne vas pas sans contrepartie, on perd en effet toute information sur la hiérarchie des contributions provenant de  $\chi$ -EFT, ce qui se traduit par une altération du lien établi avec QCD. Le potentiel de Bonn[Mac01] est un exemple de paramétrisation obtenue dans le cadre de l'approximation OBE.

### 1.2.3 Interaction forte dans le milieu

Une fois une méthode systématique de construction de l'interaction nucléon-nucléon dans le vide mise en place, il faut être à même de décrire les propriétés de systèmes composés d'un grand nombre de nucléons. Ces méthodes permettant d'obtenir des observables nucléaires à partir de l'interaction nue, sont dite *ab initio*, nous présenterons brièvement ici l'approche usuelle Dirac-Brueckner-Hartree-Fock (DBHF) ainsi que les techniques plus générales du groupe de renormalisation *Similarity Renormalisation Group* (SRG)

#### Méthodes Dirac-Brueckner-Hartree-Fock

Pour obtenir une représentation de l'état fondamental des systèmes nucléaires il faut prendre en compte les effets du milieu sur l'interaction nue. Dans le cadre des

méthodes Dirac-Brueckner, les nucléons sont vus comme des particules habillés par les interactions à deux corps entre le nucléons étudié et les particules l'entourant. La prise en compte de ces interaction est fondamentale pour rendre compte en particulier du cœur dur de l'interaction (partie répulsive à très courte portée). L'équation auto-cohérente de Bethe-Salpeter fournit un formalisme covariant pour le traitement général d'états liés à deux corps [SB51]. L'élément central de cette équation est la matrice  $T$  représentant l'ensemble des interactions irréductibles à deux corps dans le milieu,  $\Gamma$ . Le contenu de cette matrice est déterminé par une sommation cohérente de toutes les contributions de l'interaction à deux particules.

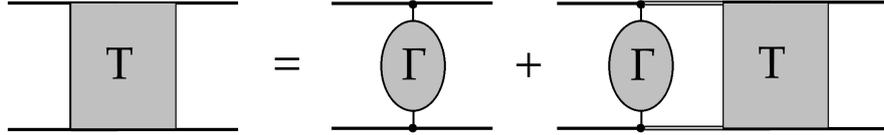


FIGURE 1.14 – Représentation schématique de l'équation de Bethe-Salpeter, en traits doubles le propagateur nucléonique exact

Plus précisément on se place dans l'approximation où l'on ne considère que les contributions dites "en échelle" des diagrammes contribuant à l'interaction à deux corps, on ne garde ainsi que les diagrammes correspondant à l'échange d'une particule.

Dans le cadre de cette approximation l'équation de Bethe-Salpeter s'exprime

$$T = V + i \int V Q G G T \quad (1.29)$$

Où  $V$  est le potentiel nucléon-nucléon nu issu de (1.28) l'opérateur de Pauli  $Q$ , permet de prendre en compte l'influence du milieu au travers de l'application du principe de Pauli, en projetant les états de diffusion intermédiaire hors de la mer de Fermi<sup>2</sup> enfin les états des nucléons virtuels (hors couche de masse) sont représentés par le propagateur à deux corps  $iGG$

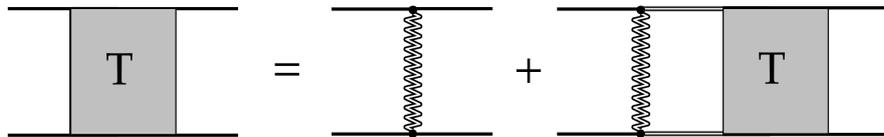


FIGURE 1.15 – Equation de Bethe-Salpeter dans le cadre où l'on ne considère que les contributions "en échelle" de l'interaction nue (zigzags), le propagateur exact est représenté traits doubles

$G$  est la fonction de Green exacte du nucléon dans le milieu obéissant à l'équation auto-cohérente de Dyson

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G \quad (1.30)$$

$G_0$  étant le propagateur du nucléon libre, l'influence du milieu est représenté par la *self-energy*  $\Sigma$

2. L'ensemble des états d'énergie négative représentant artificiellement le vide de la théorie

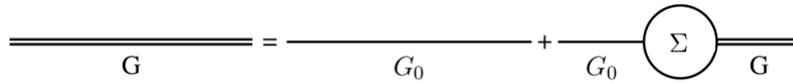


FIGURE 1.16 – Représentation schématique de l'équation auto-cohérente de Dyson à deux points, la self-energy est notée  $\Sigma$

Dans le cadre de l'approximation Hartree-Fock on détermine cette *self-energy* en sommant toutes les contributions nucléoniques au sein de la mer de Fermi.

$$\Sigma = \int_F (Tr[GT] - GT) \quad (1.31)$$

Les trois équations ((1.29)-(1.31)) forment un problème triplement auto-cohérent pouvant être résolu itérativement. Physiquement la matrice T à pour effet d'introduire les corrélations du milieu dans une fonction d'onde initialement décorrélée. La prise en compte de ces corrélations de courtes portée liée au cœur dur est fondamentale pour l'obtention d'états liés. Le cœur dur génère comme nous l'avons vu des éléments diagonaux du Hamiltonien fortement répulsif (divergents sans régularisation) empêchant la formation d'états liés. La prise en compte des corrélations courte portée au travers de la matrice T rendent ces éléments diagonaux attractifs (Figure 1.17) et permettent dans le cadre de l'approximation Hartree-Fock d'obtenir des états liés.

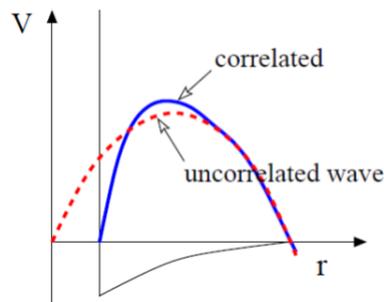


FIGURE 1.17 – Impact des corrélations à deux-corps sur une fonction d'onde à deux nucléons en fonction de leur distance relative, le potentiel nucléon-nucléon est représenté schématiquement. Figure tirée de [MP00]

L'approche DBHF (dans sa version relativiste) parvient notamment à reproduire correctement les propriétés de saturation de la matière nucléaire

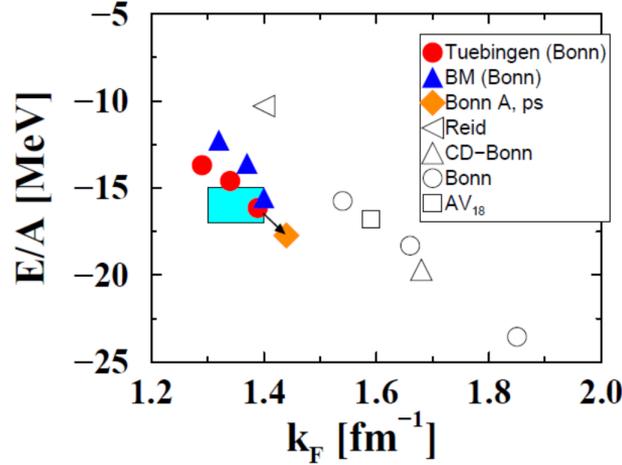


FIGURE 1.18 – Saturation de la matière nucléaire symétrique pour des modèles relativistes (symboles pleins) et non-relativistes (symboles vides), le rectangle bleu indique la zone empirique de saturation. Figure issue de [Fuc04]

Toutefois l'auto-cohérence globale de ce problème est particulièrement lourde numériquement et ne peut être appliquée pour des noyaux finis. Une autre méthode, plus moderne et plus générale se fonde sur l'application des techniques du groupe de renormalisation pour prendre en compte les corrélations discutées précédemment.

### Méthodes de renormalisation

Le principe des techniques issues de l'étude du groupe de renormalisation, revient à garantir que les degrés de liberté traités correspondent à l'échelle d'observation considérée. Le cœur dur et la force tenseur de l'interaction génèrent des modes de forte et faible impulsion, que l'on peut mettre en évidence en prenant la transformée de Fourier vers l'espace des impulsions, a priori au vu des résultats de diffusions nucléon-nucléons seuls les modes de faible impulsion ( $< 2 \text{ fm}^{-1}$ ) devraient contribuer aux observables nucléaires, toutefois les fluctuations quantiques du système couplent fortement ces modes entre eux, ce qui se traduit par la présence de termes extra-diagonaux dans l'Hamiltonien. C'est ce couplage qui est à la base de fortes corrélations et du caractère non perturbatif du problème. En effet il est de facto impossible de tronquer trivialement le Hamiltonien nucléaire au vu de l'intensité de ce couplage, et sans troncation il est impossible d'envisager une diagonalisation exacte de cet Hamiltonien. Le but des techniques de renormalisation dans ce cadre est de découpler les composantes d'impulsion faible des modes d'impulsion élevée pour permettre une troncation et un traitement du nouvel Hamiltonien ainsi obtenu. Dans le cadre des méthodes dites SRG (Similarity Renormalization Group) pour réaliser ce découplage on applique une transformation unitaire  $U(s)$  à l'Hamiltonien du système  $H$  (1.1)

$$H_s = U(s)H U^\dagger(s) = T + V_s \quad (1.32)$$

$s$  est le paramètre de la transformation de renormalisation. En différenciant (1.32) on obtient l'équation dite de flot, quantifiant l'évolution de l'Hamiltonien en fonction du paramètre  $\lambda$

$$\frac{dH}{ds} = [\eta(s), H_s] \quad (1.33)$$

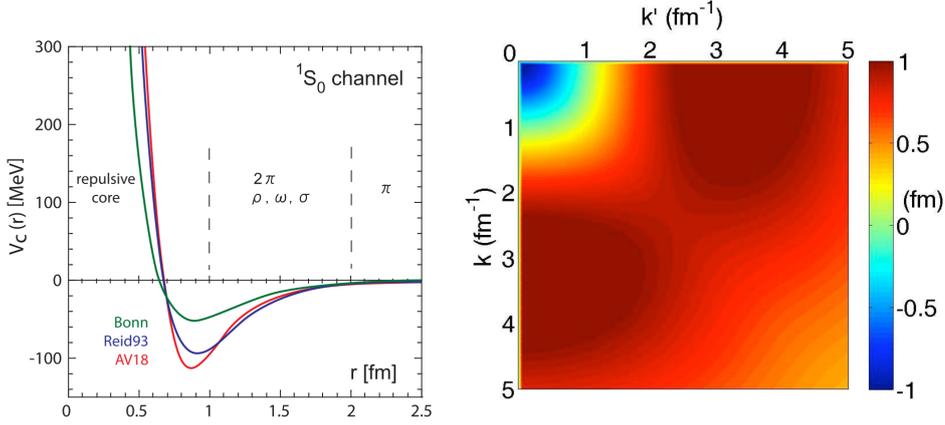


FIGURE 1.19 – Différentes paramétrisations de la force forte dans l'espace réel (à gauche) et représentation de cette interaction dans l'espace des moments (à droite)

Où  $\eta(s) = \frac{U(s)}{ds} U^\dagger(s)$  pour effectuer le découplage on peut choisir différentes formes pour  $\eta_s$  en fonction de l'effet recherché, par exemple :

- $\eta(s) = [T, H_s]$  ce choix va tendre à rendre  $H_s$  diagonal dans l'espace des impulsions
- $\eta(s) = [T^2, H_s]$  permettant d'obtenir une structure diagonale par bloc.

En choisissant à titre pédagogique la première prescription pour  $\eta(s)$  on peut décomposer l'équation de flot (1.33) en ondes partielles

$$\frac{dV_s(k, k')}{ds} = -(k^2 - k'^2)V_s(k, k') + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dq q^2 (k^2 + k'^2 - 2q^2) V_s(k, q) V_s(q, k') \quad (1.34)$$

Pour les éléments extra-diagonaux le premier terme de (1.34) domine et par conséquent

$$V_s(k, k') \simeq V_{s=0}(k, k') e^{-s(k^2 - k'^2)^2} \quad (1.35)$$

Ces termes extra-diagonaux se retrouvent exponentiellement supprimés avec l'augmentation du paramètre de flot, ce qui permet de réaliser le découplage.

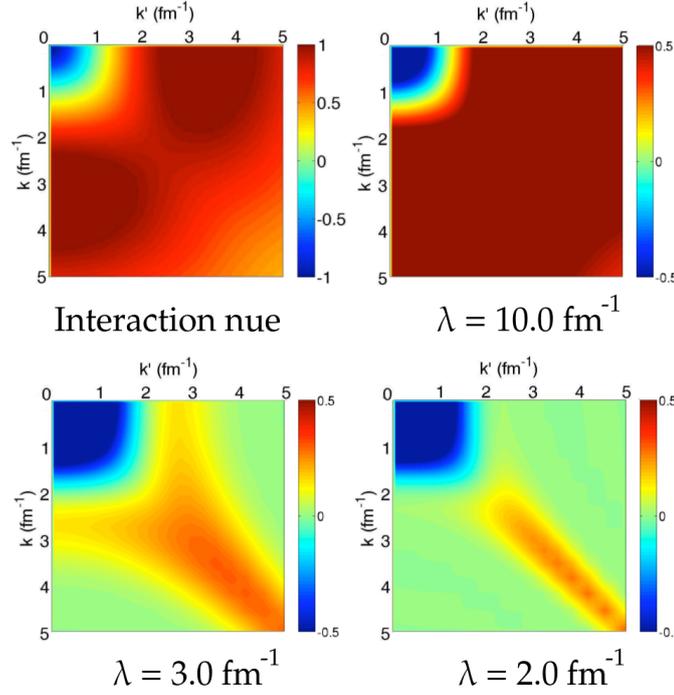


FIGURE 1.20 – Évolution des éléments de matrices de l’interaction dans l’espace des moments, par souci de simplicité on introduit le paramètre  $\lambda = s^{-1/4}$  quantifiant la suppression des éléments extras-diagonaux. Adapté de [BFS10].

On peut à présent ne conserver que les modes de faibles impulsion et par conséquent tronquer le Hamiltonien aux énergies correspondantes à l’échelle d’observation. Cette technique peut être systématisée afin de modifier la forme de l’interaction nucléaire nue dans l’approximation OBE et de la rendre compatible avec des méthodes de résolutions *ab-initio* en réalisant une forme de pré-diagonalisation du Hamiltonien. Toutefois l’application des équations SRG modifie profondément la structure du Hamiltonien (supposé à 2 corps pour plus de lisibilité) et vient enrichir sa structure de contributions à N-corps, en effet dans l’espace de Fock nous avons vu que l’Hamiltonien s’exprime en seconde quantification (1.5).

$$H_{s=0} = \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} v_{ijkl}^{(2N)} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l \quad (1.36)$$

Une variation du flot de renormalisation à l’ordre un (1.33) revient à rajouter un terme à notre Hamiltonien de départ

$$\begin{aligned} H_s &\simeq H_{s=0} + \Delta s [[T, H_{s=0}], H_{s=0}] \\ &= H_{s=0} + \Delta s \left[ \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j, \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \tilde{v}_{ijkl}^{(2N)} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l \right] \end{aligned} \quad (1.37)$$

Ce terme contient des contributions à 3, 4, ... corps artificielles ne pouvant être réabsorbés, ces contributions ont pour conséquence d’augmenter de nouveau la complexité du problème et rends nécessaire une nouvelle troncation arbitraire du Hamiltonien générant de nouvelles spuriosités difficilement traitable (perte de l’unitarité du système).

### 1.2.4 Dépendance phénoménologique

Pour permettre des calculs d'observables sur l'ensemble de la carte des noyaux nous devons alléger le calcul en dégradant encore un peu le lien avec l'interaction initiale en construisant un lagrangien phénoménologique. Pour pouvoir rendre compte des corrélations induites par le milieu sans pour autant résoudre les équations DBHF dans leur intégralité, nous allons introduire une dépendance explicite à la densité du système dans les constantes de couplage du Lagrangien. Toutefois cette dépendance n'est pas choisie arbitrairement et peut être dérivée à partir d'une représentation simplifiée de la matrice  $T$  [FLW95]. Le principe est d'exhiber une théorie des champs mésoniques dont les vertex d'interactions mésons-nucléons dépendent du milieu en partant de la matrice relativiste de Brueckner construite précédemment (1.29). L'idée étant de pousser un cran plus loin le degré d'effectivité de la théorie en sommant certaines contributions provenant des corrélations incluses dans la matrice  $T$  exprimée dans le vide, au sein de son analogue  $\mathcal{T}$  exprimée dans le milieu. Cette sommation s'effectue par le biais d'une nouvelle equation de Bethe-Salpeter

$$T = V + i \int V Q G G T \quad (1.38)$$

$$\mathcal{T} = T - i \int T Q G G T \quad (1.39)$$

Où  $G$  est toujours le propagateur nucléonique et le projecteur  $Q$  à pour action, dans le milieu, de projeter le propagateur sur les états occupés de la sphère de Fermi. Le fait de travailler avec  $\mathcal{T}$  présente l'avantage de ne plus présenter les singularités liées au cœur dur contenues dans l'interaction nue  $V$ . En suivant [ACHS87] on prends pour  $T$  et  $\mathcal{T}$  les ansatz

$$T(1, 2) \equiv \xi(1) \Delta(1, 2) \xi(2) \quad (1.40)$$

$$\mathcal{T}(1, 2) \equiv \Xi(1) \Delta(1, 2) \Xi(2) \quad (1.41)$$

Où :

- $\Delta(1, 2)$  est le propagateur mésonique<sup>3</sup>
- $\xi = g_{\mathcal{M}} * \Gamma_i$  représente le vertex d'interaction méson-nucléon dans le vide avec  $\mathcal{M} = \{\rho, \pi, \omega, \sigma\}$  et les matrices de Dirac généralisée  $\Gamma_i = \{1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_5 \gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}\}$
- $\Xi$  est le vertex d'interaction méson-nucléon dans le milieu

Le vertex d'interaction dans le milieu étant relié au vertex dans le vide par l'intermédiaire d'une nouvelle équation de Bethe-Salpeter

$$\Xi = \xi - i \int \Xi Q G G T \quad (1.42)$$

L'équation (1.42) admet une représentation diagrammatique (1.21) traduisant la prise en compte de toutes les contributions "en échelle".

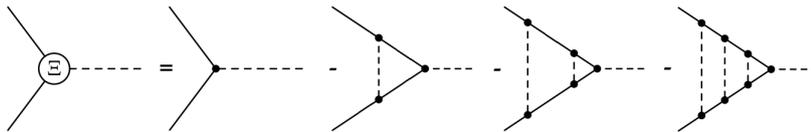


FIGURE 1.21 – Représentation diagrammatique des contributions à la fonction de vertex dans le milieu  $\Xi$  décrite par l'équation (1.42), les vertex d'interaction dans le vide sont matérialisés par des points les propagateurs mésoniques sont en pointillés et les propagateurs nucléoniques en traits pleins

3. Le propagateur  $\Delta$  est le même pour  $T$  et  $\mathcal{T}$  ce qui traduit le fait que l'on considère que les mésons ne sont pas affectés par les effets du milieu

La *self-energy* ne dépendant que faiblement de l'impulsion [SW90] on peut définir un vertex effectif représentatif de l'interaction dans le milieu en sommant uniquement sur les états de la sphère de Fermi.

$$\Xi(k_F) = \frac{Tr[\Xi QG]}{Tr[\xi QG]} \quad (1.43)$$

Le vertex habillé par le milieu dépend uniquement de l'impulsion de Fermi définie de manière univoque à partir de la densité du système. Aussi sans être une bijection exacte avec la théorie DBHF, on peut par l'intermédiaire d'une dépendance en densité reproduire de manière approchée la prise en compte des corrélations de courte portée à deux corps.

### Lagrangien phénoménologique

On peut à présent reprendre le lagrangien (1.28) en y rajoutant une dépendance explicite des constantes de couplage à la densité du système.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{int}} = & -g_\sigma(\rho_v)\bar{\psi}\sigma\psi - \frac{f_\pi(\rho_v)}{m_\pi}\bar{\psi}\gamma_5\gamma_\mu\partial^\mu\vec{\pi}\cdot\vec{\tau}\psi \\ & -g_\omega(\rho_v)\bar{\psi}\gamma_\mu\omega^\mu\psi - g_\rho(\rho_v)\bar{\psi}\gamma_\mu\vec{\rho}^\mu\vec{\rho}^\mu\cdot\vec{\tau}\psi - e\bar{\psi}\gamma_\mu\mathcal{A}^\mu\psi \end{aligned} \quad (1.44)$$

Où l'on a conservé uniquement la contribution pseudo-vecteur du couplage pionique suivant en cela la prescription de [Ser92], le couplage pseudo-scalaire engendrant des énergies de très grandes amplitudes ne permettant pas de reproduire les spectres de particules individuelles, la contribution pseudo-vecteur ne présentant pas cette pathologie. Nous faisons également le choix de faire dépendre les constantes de couplage de la densité baryonique  $\rho_v$ <sup>4</sup>

$$\rho_v = \sqrt{j_\mu j^\mu} \quad (1.45)$$

Où  $j_\mu$  est le 4-courant baryonique

$$j_\mu = \bar{\psi}\gamma_\mu\psi \quad (1.46)$$

Plus précisément l'incorporation de constantes de couplages dépendantes de la densité à pour effet de prendre en compte l'influence du milieu, au travers de la prise en compte des corrélations induites entre autres par le cœur dur. Toutefois l'ajustement de notre interaction phénoménologique sur les données expérimentales entraîne une perte de la maîtrise des corrélations incorporées à la densité lagrangienne et viennent capturer des corrélations allant bien au-delà de celles prises en compte par la théorie DBHF. Cette dépendance permet également de rendre compte de la nature non-élémentaire des nucléons, sous structure venant engendrer des forces à trois corps [ENG<sup>+</sup>02] C'est au prix de cette augmentation de la part de la phénoménologie, qui affaiblit le lien avec l'interaction nue initiale, que l'on peut construire une théorie effective phénoménologique rendant correctement compte de la complexité du problème à N-corps pour un coût numérique minimal.

### Formes des constantes de couplage

Les ansatz pour les formes des constantes de couplage sont choisis pour leur faculté à reproduire les résultats DBHF[TW99]. Pour les mésons  $\sigma$  et  $\omega$  elle prend la forme

$$g_{\{\sigma,\omega\}}(\rho_v) = g_{\{\sigma,\omega\}}(\rho_{\text{sat}})f_{\{\sigma,\omega\}}(\epsilon) \quad (1.47)$$

4. On aurait pu choisir de travailler avec une densité scalaire  $\rho_s = \bar{\psi}\psi$  mais l'utilisation de  $\rho_v$  semble mieux rendre compte de la phénoménologie des noyaux finis et permet un lien plus naturel avec la théorie DBHF[FLW95]

Où  $\rho_{\text{sat}}$  correspond à la densité de saturation de la matière nucléaire et

$$f_i(\epsilon) = a_i \frac{1 + b_i(\epsilon + d_i)^2}{1 + c_i(\epsilon + d_i)^2}, i = \{\sigma, \omega\} \quad (1.48)$$

Où  $\epsilon = \frac{\rho_v}{\rho_{\text{sat}}} f_i(\epsilon)$  doit trivialement vérifier  $f_i(1) = 1$  De plus plusieurs contraintes peuvent être imposées à (1.48) pour réduire le nombre de paramètres de notre modèle.

$$\begin{aligned} - \frac{\partial^2 f_\sigma}{\partial \epsilon^2} \Big|_{\epsilon=1} &= \frac{\partial^2 f_\omega}{\partial \epsilon^2} \Big|_{\epsilon=1} \\ - \frac{\partial^2 f_i}{\partial \epsilon^2} \Big|_{\epsilon=0} &= 0 \end{aligned}$$

Par conséquent (1.48) ne dépend plus que de 3 paramètres libres, par exemple  $b_\sigma, b_\omega$  et  $d_\sigma$ . Cette paramétrisation permet de rendre compte correctement des corrélations issues des méthodes DBHF

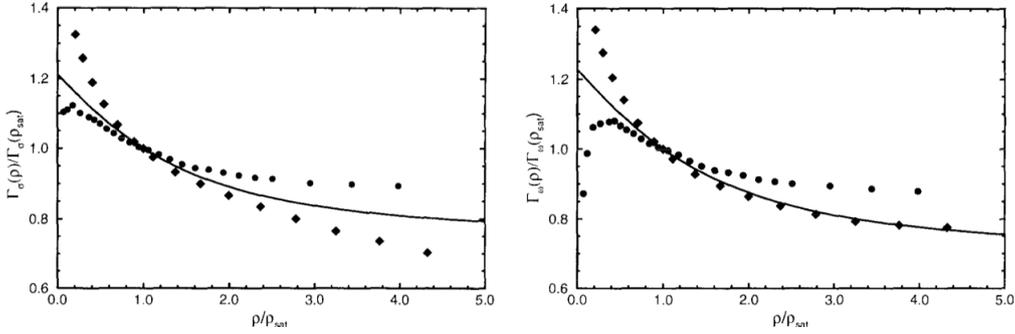


FIGURE 1.22 – Dépendance en densité des constantes de couplages normalisés des mésons  $\sigma$  (à gauche) et  $\omega$  à droite, les symboles pleins correspondent à des résultats issus de Dirac-Brueckner, la paramétrisation (1.48) est tracée en trait plein, figure issue de [TW99]

Dans le cadre des calculs DBHF les couplages des mésons  $\rho$  et  $\pi$  décroissent rapidement lorsque l'on se rapproche de la densité de saturation, aussi pour plus de simplicité on choisit une forme exponentielle pour ces deux constantes :

$$g_\rho(\rho_v) = g_\rho(\rho_{\text{sat}}) e^{-a_\rho(\epsilon-1)} \quad (1.49)$$

$$f_\pi(\rho_v) = f_\pi(\rho_{\text{sat}}) e^{-a_\pi(\epsilon-1)} \quad (1.50)$$

Au final le lagrangien phénoménologique de notre modèle dépend de 13 paramètres :

$$\begin{aligned} & m_\sigma, m_\rho, m_\pi, m_\omega \\ & g_\rho(0), f_\pi(\rho)(0), a_\rho, a_\pi \\ & g_\omega(\rho_{\text{sat}}), g_\sigma(\rho_{\text{sat}}), b_\omega, b_\sigma, d_\sigma \end{aligned} \quad (1.51)$$

On peut pour réduire le nombre de paramètres libres fixer les grandeurs existantes dans le vide à celles observées expérimentalement :

$$\begin{aligned} m_\rho &= 768.0 \text{ MeV}, m_\omega = 783.0 \text{ MeV}, m_\pi = 138.0 \text{ MeV} \\ g_\rho(0) &= 2.629, f_\pi(0) = 1.0 \end{aligned} \quad (1.52)$$

Notre modèle ne dépend plus alors que de 8 paramètres libres qui seront déterminés par un ajustement sur les mesures expérimentales des noyaux atomiques. Par la suite et en l'absence de risque de confusion on notera simplement  $\rho$  la densité baryonique vecteur  $\rho_v$

## 1.3 Conclusions

## 1.4 Références

- [ACHS87] H. B. Ai, L. S. Celenza, A. Harindranath, and C. M. Shakin. Effective interaction for relativistic mean-field theories of nuclear structure. *Phys. Rev. C*, 35 :2299–2309, Jun 1987. [22](#)
- [ACSW99] Z. Aouissat, G. Chanfray, P. Schuck, and J. Wambach. Reduced  $\sigma$ -meson mass and in-medium s-wave  $\pi$ - $\pi$  correlations. *Phys. Rev. C*, 61 :012202, Nov 1999. [iii](#), [15](#)
- [BDOS11] S.R. Beane, W. Detmold, K. Orginos, and M.J. Savage. Nuclear physics from lattice qcd. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 66(1) :1 – 40, 2011. [8](#)
- [BFS10] S.K. Bogner, R.J. Furnstahl, and A. Schwenk. From low-momentum interactions to nuclear structure. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 65(1) :94 – 147, 2010. [iv](#), [21](#)
- [Bro73] R.A Broglia. The pairing model. *Annals of Physics*, 80(1) :60 – 85, 1973. [6](#)
- [CJTW70] E. Cheifetz, R. C. Jared, S. G. Thompson, and J. B. Wilhelmy. Experimental information concerning deformation of neutron rich nuclei in the  $a \sim 100$  region. *Phys. Rev. Lett.*, 25 :38–43, Jul 1970. [6](#)
- [CR83] David J. E. Callaway and Aneesur Rahman. Lattice gauge theory in the microcanonical ensemble. *Phys. Rev. D*, 28 :1506–1514, Sep 1983. [8](#)
- [DMN<sup>+</sup>01] J. Dobaczewski, P. Magierski, W. Nazarewicz, W. Satuła, and Z. Szymański. Odd-even staggering of binding energies as a consequence of pairing and mean-field effects. *Phys. Rev. C*, 63 :024308, Jan 2001. [6](#)
- [DtSC12] R Debbe and the Star Collaboration. Rho meson diffraction off au nuclei. *Journal of Physics : Conference Series*, 389(1) :012042, 2012. [iii](#), [14](#)
- [EHM09] E. Epelbaum, H.-W. Hammer, and Ulf-G. Meißner. Modern theory of nuclear forces. *Rev. Mod. Phys.*, 81 :1773–1825, Dec 2009. [10](#)
- [ENG<sup>+</sup>02] E. Epelbaum, A. Nogga, W. Glöckle, H. Kamada, Ulf-G. Meißner, and H. Witała. Three-nucleon forces from chiral effective field theory. *Phys. Rev. C*, 66 :064001, Dec 2002. [23](#)
- [FLW95] C. Fuchs, H. Lenske, and H. H. Wolter. Density dependent hadron field theory. *Phys. Rev. C*, 52 :3043–3060, Dec 1995. [22](#), [23](#)
- [Fuc04] Christian Fuchs. *4 The Relativistic Dirac-Brueckner Approach to Nuclear Matter*, pages 119–146. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004. [iv](#), [19](#)
- [HK64] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136 :B864–B871, Nov 1964. [5](#)
- [HK17] J. W. Holt and N. Kaiser. Equation of state of nuclear and neutron matter at third-order in perturbation theory from chiral effective field theory. *Phys. Rev. C*, 95 :034326, Mar 2017. [12](#)

- [IAH07] N. Ishii, S. Aoki, and T. Hatsuda. Nuclear force from lattice qcd. *Phys. Rev. Lett.*, 99 :022001, Jul 2007. [8](#)
- [KS65] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140 :A1133–A1138, Nov 1965. [5](#)
- [Mac01] R. Machleidt. High-precision, charge-dependent bonn nucleon-nucleon potential. *Phys. Rev. C*, 63 :024001, Jan 2001. [16](#)
- [MBS09] Jérémie Messud, Michael Bender, and Eric Suraud. Density functional theory and kohn-sham scheme for self-bound systems. *Phys. Rev. C*, 80 :054314, Nov 2009. [6](#)
- [Mes11] Jérémie Messud. Generalization of internal density-functional theory and kohn-sham scheme to multicomponent self-bound systems, and link with traditional density-functional theory. *Phys. Rev. A*, 84 :052113, Nov 2011. [6](#)
- [MMS07] C. Monrozeau, J. Margueron, and N. Sandulescu. Nuclear superfluidity and cooling time of neutron star crusts. *Phys. Rev. C*, 75 :065807, Jun 2007. [6](#)
- [MP00] H Müther and A Polls. Two-body correlations in nuclear systems. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 45(1) :243 – 334, 2000. [iv](#), [18](#)
- [MS16] R Machleidt and F Sammarruca. Chiral eft based nuclear forces : achievements and challenges. *Physica Scripta*, 91(8) :083007, 2016. [iii](#), [10](#), [11](#)
- [NGV<sup>+</sup>07] P. Navrátil, V. G. Gueorguiev, J. P. Vary, W. E. Ormand, and A. Nogga. Structure of  $a = 10 \sim 13$  nuclei with two- plus three-nucleon interactions from chiral effective field theory. *Phys. Rev. Lett.*, 99 :042501, Jul 2007. [12](#)
- [SB51] E. E. Salpeter and H. A. Bethe. A relativistic equation for bound-state problems. *Phys. Rev.*, 84 :1232–1242, Dec 1951. [17](#)
- [Ser92] B D Serot. Quantum hadrodynamics. *Reports on Progress in Physics*, 55(11) :1855, 1992. [23](#)
- [SW90] L. Sehn and H.H. Wolter. Effective interactions and the equation of state in heavy ion collisions. *Nuclear Physics A*, 519(1) :289 – 302, 1990. [23](#)
- [TW99] S. Typel and H.H. Wolter. Relativistic mean field calculations with density-dependent meson-nucleon coupling. *Nuclear Physics A*, 656(3) :331 – 364, 1999. [iv](#), [23](#), [24](#)
- [Wei68] Steven Weinberg. Nonlinear realizations of chiral symmetry. *Phys. Rev.*, 166 :1568–1577, Feb 1968. [11](#)
- [Wei95] S. Weinberg. *The Quantum Theory of Fields*. Number vol. 2 in The Quantum Theory of Fields 3 Volume Hardback Set. Cambridge University Press, 1995. [9](#)
- [Wil74] Kenneth G. Wilson. Confinement of quarks. *Phys. Rev. D*, 10 :2445–2459, Oct 1974. [8](#)

## Chapitre 2

# Traitement relativiste des corrélations quantiques

*« What we observe as material bodies and forces are nothing but shapes and variations in the structure of space. »*

Erwin Schrödinger

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Description relativistes du système</b>	<b>29</b>
2.1.1	Équations du mouvements	29
	Équations mésoniques	29
	Équations nucléoniques	30
2.1.2	Hamiltonien du système	30
2.1.3	Secteur nucléonique	30
2.1.4	Secteur mésonique	30
	Densités Hamiltoniennes	30
	Dépendance temporelle	31
2.1.5	Interaction nucléon-nucléon	31
2.1.6	Hamiltonien du système	31
2.1.7	Approximation <i>no-sea</i>	33
2.1.8	Hamiltonien quantifié	34
<b>2.2</b>	<b>Théorie Hartree-Fock</b>	<b>34</b>
<b>2.3</b>	<b>Prise en compte des corrélations particules-trous dites de <i>bulk</i></b>	<b>35</b>
2.3.1	Méthode perturbative	35
	Dérivation algébrique	35
	Dérivation diagrammatique	36
	Génération automatique	37
	Programme ADG	40
2.3.2	Dépendance en densité	40
	Contribution de l'interaction	41
	Équations Hartree relativistes	43
2.3.3	Conclusions	45
<b>2.4</b>	<b>Corrélations de type particules-particules</b>	<b>46</b>
2.4.1	Introduction	46
2.4.2	Représentation	47
2.4.3	Modèles d'appariement	50

CHAPITRE 2. TRAITEMENT RELATIVISTE DES CORRÉLATIONS  
QUANTIQUES

---

Modèle BCS . . . . .	50
2.4.4 Formalisme de Bogolioubov . . . . .	51
Approche perturbative . . . . .	55
2.4.5 État BCS projeté . . . . .	55
2.4.6 Corrélations de Quartets . . . . .	57
Implémentation pratique . . . . .	60
<b>2.5 Conclusions . . . . .</b>	<b>60</b>
<b>2.6 Références . . . . .</b>	<b>61</b>

---

## 2.1 Description relativistes du système

Une fois une représentation de l'interaction nucléon-nucléon obtenue, il faut mettre en œuvre les méthodes permettant la résolution des équations du problème à N-corps. En suivant les idées issues du formalisme de la DFT, il faut commencer par décrire la dynamique du système afin de construire l'Hamiltonien décrivant le problème.

### 2.1.1 Équations du mouvements

Avec comme point de départ le Lagrangien de l'interaction nucléon-nucléon nue on définit l'action  $S$  associée à ce lagrangien comme :

$$S = \int d^4x \mathcal{L}(x) \quad (2.1)$$

La dynamique du système peut-être dérivée en minimisant l'action  $\delta S = 0$ , minimisation qui est traduite par les équations d'Euler-Lagrange.

### Équations mésoniques

Pour les degrés de libertés mésoniques les equations d'Euler-Lagrange ont pour formes :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_m} = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_m)} \quad (2.2)$$

aboutissant aux équations du mouvement pour les champs mésoniques et photoniques :

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = e \bar{\psi} \gamma^\nu \frac{1 - \tau_3}{2} \psi \quad (2.3)$$

$$(\square + m_\sigma^2) \sigma = -g_\sigma \bar{\psi} \psi \quad (2.4)$$

$$\partial_\mu \Omega^{\mu\nu} + m_\omega^2 \omega^\nu = g_\omega \bar{\psi} \gamma^\nu \psi \quad (2.5)$$

$$\partial_\mu \vec{R}^{\mu\nu} + m_\rho^2 \vec{\rho}^\nu = g_\rho \bar{\psi} \gamma^\nu \vec{\tau} \psi \quad (2.6)$$

$$(\square + m_\pi^2) \vec{\pi} = \frac{f_\pi}{m_\pi} \partial_\mu [\bar{\psi} \gamma^5 \gamma^\mu \vec{\tau} \psi] \quad (2.7)$$

De plus le courant baryonique  $j^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$  est un invariant du système ce qui implique :

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \Rightarrow \begin{cases} \partial_\mu \omega^\mu = 0 \\ \partial_\mu \vec{\rho}^\mu = \vec{0} \end{cases} \quad (2.8)$$

On se place dans la jauge de Coulomb  $\partial_\mu A^\mu = 0$ . Ce jeu supplémentaire de contraintes permet de réécrire les équations ((2.3)-(2.7)) sous forme d'équations de Klein-Gordon inhomogènes dont les termes sources correspondent aux densités et aux courants nucléoniques.

$$\square A^\mu = e \bar{\psi} \gamma^\nu \frac{1 - \tau_3}{2} \psi \quad (2.9)$$

$$(\square + m_\sigma^2) \sigma = -g_\sigma \bar{\psi} \psi \quad (2.10)$$

$$(\square + m_\omega^2) \omega^\mu = g_\omega \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \quad (2.11)$$

$$(\square + m_\rho^2) \vec{\rho}^\mu = g_\rho \bar{\psi} \gamma^\mu \vec{\tau} \psi \quad (2.12)$$

$$(\square + m_\pi^2) \vec{\pi} = \frac{f_\pi}{m_\pi} \partial_\mu [\bar{\psi} \gamma^5 \gamma^\mu \vec{\tau} \psi] \quad (2.13)$$

### Équations nucléoniques

Pour les nucléons les équations d'Euler-Lagrange s'écrivent

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho_\nu} \frac{\partial \rho_\nu}{\partial \bar{\psi}} = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \bar{\psi})} \quad (2.14)$$

Et permettent d'obtenir l'équation de Dirac dont les spineurs nucléoniques  $\psi$  sont solutions :

$$[i\gamma^\mu \partial_\mu - M + \Sigma]\psi(x) = 0 \quad (2.15)$$

Où  $\Sigma$  est la self-énergie du système, quantité (classique à ce stade) quantifiant la contribution énergétique des interactions du nucléon avec le milieu. Dans ce cas elle possède une contribution scalaire et vectorielle.

$$\Sigma = \gamma^\mu \Sigma_\mu^S + \Sigma^V \quad (2.16)$$

Où

$$\begin{aligned} - \Sigma_\mu^V &= g_\omega \omega_\mu + g_\rho \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\tau} + \frac{f_\pi}{m_\pi} \gamma_5 \partial_\mu \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} + e \frac{(1 - \tau_3)}{2} A_\mu \\ - \Sigma^S &= g_\sigma \sigma \end{aligned}$$

### 2.1.2 Hamiltonien du système

Formellement le lagrangien dépend des champs nucléoniques  $\psi$ , mésoniques  $\phi_i$  et du 4-vecteur électromagnétique  $A^\mu$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\psi, \phi_i, A_\mu) \quad (2.17)$$

Le Hamiltonien correspondant s'obtient en appliquant une transformation de Legendre au Lagrangien (2.17).

$$\mathcal{H} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \psi)} \partial^0 \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \phi_i)} \partial^0 \phi_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 A^\mu)} \partial^0 A^\mu - \mathcal{L} \quad (2.18)$$

Le Hamiltonien se décompose en trois termes

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_N + \mathcal{H}_m + \mathcal{H}_{\text{int}} \quad (2.19)$$

### 2.1.3 Secteur nucléonique

L'impulsion généralisée associée au spineur nucléonique est  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \phi_i)} = i\psi^\dagger$ .

La densité hamiltonienne correspondante qui décrit le comportement des nucléons libres s'exprime par conséquent

$$\mathcal{H}_N = \bar{\psi}[-i\gamma \cdot \nabla + M]\psi \quad (2.20)$$

### 2.1.4 Secteur mésonique

#### Densités Hamiltoniennes

Pour chacun des champs mésoniques et pour le 4-vecteur électromagnétique on obtient une densité hamiltonienne associée :

$$\mathcal{H}_A = \frac{1}{2} \left[ -F^{0i} \partial_0 A_i + F^{i\mu} \partial_i A_\mu \right] \quad (2.21)$$

$$\mathcal{H}_\sigma = \frac{1}{2} \left[ \partial_0 \sigma \partial_0 \sigma + \nabla \sigma \cdot \nabla \sigma + m_\sigma^2 \sigma^2 \right] \quad (2.22)$$

$$\mathcal{H}_\omega = \frac{1}{2} \left[ \Omega^{i\mu} \partial_i \omega_\mu - \Omega^{0i} \partial_0 \omega_i - m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu \right] \quad (2.23)$$

$$\mathcal{H}_\rho = \frac{1}{2} \left[ \vec{R}^{i\mu} \partial_i \vec{\rho}_\mu - \vec{R}^{0i} \partial_0 \vec{\rho}_i - m_\rho^2 \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\rho}^\mu \right] \quad (2.24)$$

$$\mathcal{H}_\pi = \frac{1}{2} \left[ \partial_0 \vec{\pi} \cdot \partial_0 \vec{\pi} + \nabla \vec{\pi} \cdot \nabla \vec{\pi} + m_\pi^2 \vec{\pi} \cdot \vec{\pi} \right] \quad (2.25)$$

### Dépendance temporelle

Les champs mésoniques sont des fonctions de l'espace et du temps, l'interaction médiée par les mésons n'est pas instantanée. Néanmoins pour décrire les propriétés de l'état fondamental d'un noyau dans le cadre de l'approximation de Hartree on peut négliger cette dépendance temporelle [BMVGM87]. Cela revient à négliger les composantes temporelles de chacun des champs. Cette simplification n'a de plus aucun impact au niveau Hartree<sup>1</sup> On obtient donc les expressions des termes du Hamiltonien mésonique  $\mathcal{H}_m = \int d^3x \mathcal{H}_m$  en appliquant cette approximation et en utilisant les équations d'Euler-Lagrange précédentes on obtient :

$$H_A = -\frac{1}{2} e \int d^3x \bar{\psi} \gamma_\mu A^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \psi \quad (2.26)$$

$$H_\sigma = -\frac{1}{2} \int d^3x g_\sigma \bar{\psi} \sigma \psi \quad (2.27)$$

$$H_\omega = -\frac{1}{2} \int d^3x g_\omega \bar{\psi} \gamma_\mu \omega^\mu \psi \quad (2.28)$$

$$H_\rho = -\frac{1}{2} \int d^3x g_\rho \bar{\psi} \gamma_\mu \vec{\rho}^\mu \cdot \vec{\tau} \psi \quad (2.29)$$

$$H_\pi = -\frac{1}{2} \int d^3x \frac{f_\pi}{m_\pi} \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \cdot \nabla \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} \psi \quad (2.30)$$

### 2.1.5 Interaction nucléon-nucléon

Enfin la densité Hamiltonienne traduisant l'interaction entre les nucléons du système s'exprime :

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \bar{\psi} \left[ g_\sigma \sigma + g_\omega \gamma_\mu \omega^\mu + g_\rho \gamma_\mu \vec{\rho}^\mu \cdot \vec{\tau} + \frac{f_\pi}{m_\pi} \gamma_5 \gamma_\mu \cdot \nabla \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} + e \gamma_\mu A^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \right] \psi \quad (2.31)$$

### 2.1.6 Hamiltonien du système

Pour décrire le système on somme les différentes contributions à l'Hamiltonien total.

$$H = \int d^3x \bar{\psi} \left[ -i \gamma_\mu \cdot \nabla + M \right] \psi + \frac{1}{2} \int d^3x \bar{\psi} \left[ g_\sigma \sigma + g_\omega \gamma_\mu \omega^\mu + g_\rho \gamma_\mu \vec{\rho}^\mu \cdot \vec{\tau} + \frac{f_\pi}{m_\pi} \gamma_5 \gamma_\mu \cdot \nabla \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} + e \gamma_\mu A^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \right] \psi \quad (2.32)$$

On peut ne faire dépendre le Hamiltonien que des degrés de libertés nucléoniques en ré-exprimant chacun des champ mésoniques comme :

$$\phi_i(x) = \int d^4y D_{\phi_i}(x, y) s_{\phi_i}(y) \quad (2.33)$$

1. Lors de la prise en compte des termes d'échanges (Fock) cette approximation empêche toutefois la prise en compte des effets de retards

Où  $D_{\phi_i}$  est le propagateur mésonique,  $s_{\phi_i}$  est le terme source de l'équation de Klein-Gordon satisfaite par  $\phi_i$ . Ainsi (2.32) peut s'exprimer.

$$H = \int d^3x \bar{\psi}[-i\gamma \cdot \nabla + M]\psi + \sum_m \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \bar{\psi}(x)\psi(y)\Gamma_m(x,y)D_m(x,y)\psi(x)\psi(y) \quad (2.34)$$

Où l'indice  $m$  fait référence aux mésons  $\{\sigma, \omega^\mu, \bar{\rho}^\mu, \bar{\pi}, A^\mu\}$  et les vertex d'interaction à deux corps  $\Gamma_m(x, y)$  sont définis en deux points de l'espace temps  $a$  et  $b$  :

$$\Gamma_\sigma(a, b) = -g_\sigma(a)g_\sigma(b) \quad (2.35)$$

$$\Gamma_\omega(a, b) = g_\omega(a)\gamma_\mu(a)g_\omega(b)\gamma^\mu(b) \quad (2.36)$$

$$\Gamma_\rho(a, b) = [g_\rho(a)\gamma_\mu(a)\vec{\tau}(a)] \cdot [g_\rho(b)\gamma^\mu(b)\vec{\tau}(b)] \quad (2.37)$$

$$\Gamma_\pi(a, b) = -\left[\frac{f_\pi(a)}{m_\pi}\gamma_5(a)\gamma(a) \cdot \nabla(a)\vec{\tau}(a)\right] \cdot \left[\frac{f_\pi(b)}{m_\pi}\gamma_5(b)\gamma(b) \cdot \nabla(b)\vec{\tau}(b)\right] \quad (2.38)$$

$$\Gamma_A(a, b) = \frac{e^2}{4}[\gamma_\mu(a)(1 - \tau_3(a))][\gamma^\mu(b)(1 - \tau_3(b))] \quad (2.39)$$

Jusqu'à présent les champs mésoniques et nucléonique ont été considérés comme classiques. Pour rendre compte de la nature quantique de notre théorie, on impose des relations d'anti-commutation aux champs fermioniques, ces relations sont prises à temps égaux :

$$\{\psi_\alpha(x, t), \psi_\beta^\dagger(y, t)\} = \delta_{\alpha, \beta}\delta^{(3)}(x - y) \quad (2.40)$$

$$\{\psi_\alpha(x, t), \psi_\beta(y, t)\} = \{\psi_\alpha^\dagger(x, t), \psi_\beta^\dagger(y, t)\} = 0 \quad (2.41)$$

où les  $\psi_{\alpha, \beta}$  sont des spineurs nucléoniques. On impose également des relations de commutation aux champs bosoniques.

$$[\phi_\mu(x, t), \Pi_\nu(y, t)] = i\delta_{\mu, \nu}\delta^{(3)}(x - y) \quad (2.42)$$

$$[\phi_\mu(x, t), \phi_\nu(y, t)] = [\Pi_\mu(x, t), \Pi_\nu(y, t)] = 0 \quad (2.43)$$

Où les  $\phi_{\{\mu, \nu\}}$  sont les champs mésoniques et les  $\Pi_{\{\mu, \nu\}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \phi^{\{\mu, \nu\}})}$  leurs conjugués canoniques. Pour résoudre le problème et obtenir les équations Hartree-Fock en partant de (2.34) on pourrait en toute rigueur chercher à résoudre une équation de Dyson pour le propagateur baryonique[HS83]. De prime abord et pour simplifier le problème on peut chercher des solutions spinorielles approchées  $\psi_0(x)$  à l'équation (2.15) où la self-énergie  $\Sigma$  doit être déterminé de manière auto-cohérente.

$$(-i\gamma^\mu + M + \Sigma)\psi_0(x) = 0 \quad (2.44)$$

En remplaçant les solutions exactes  $\psi(x)$  par les solutions approchées dans (2.34) on obtient un hamiltonien effectif  $H_0$ . Dans un état Hartree-Fock (un déterminant de Slater) la valeur moyenne de cet Hamiltonien donne une énergie  $E_0$ . En minimisant  $E_0$  par rapport à la self-énergie on obtient des équations pour  $\Sigma$  qui seront identiques à celles obtenues par méthode de Dyson. On peut alors développer les champs nucléoniques sur une base définie par les solutions stationnaires  $\psi_0(x)$  de (2.44) dont les coefficients restent à déterminer :

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \sum_\alpha \{f_\alpha(x)e^{-iE_\alpha t}b_\alpha + g_\alpha(x)e^{iE'_\alpha t}d_\alpha^\dagger\} \\ \psi_0^\dagger(x) &= \sum_\alpha \{f_\alpha^\dagger(x)e^{iE_\alpha t}b_\alpha^\dagger + g_\alpha^\dagger(x)e^{-iE'_\alpha t}d_\alpha\} \end{aligned} \quad (2.45)$$

Où  $f_\alpha(x)$  et  $g_\alpha(x)$  forment un ensemble complet de spineurs de Dirac en représentation coordonnée,  $\{b_\alpha, b_\alpha^\dagger\}$  sont les opérateurs de créations et annihilations de nucléons dans un état  $\alpha$  tandis que  $\{d_\alpha, d_\alpha^\dagger\}$  sont associés aux antinucléons. Toutefois l'équation (2.44) dans sa version quantique ne peut se résoudre sans nouvelle approximation de part la structure complexe de la self-énergie.

### 2.1.7 Approximation *no-sea*

Dans le cadre de cette approximation les anti-nucléons (états d'énergie négative) formant la mer de Dirac sont explicitement omis. Effectivement, la prise en compte des états appartenant à la mer de Dirac, traduisant les effets de la polarisation du vide, engendrent des contributions divergentes.

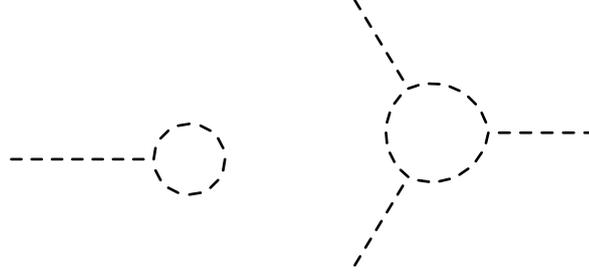


FIGURE 2.1 – Exemple de diagrammes divergents de type polarisation du vide intervenant en prenant en compte la contribution de la mer de Dirac

Toutefois l'approximation *no-sea* peut se justifier dans le cadre d'une théorie effective des champs. Elle peut être vue comme un schéma de soustraction partiel permettant l'annulation d'une partie des contributions divergentes. Rigoureusement il faudrait régulariser les diagrammes incluant des boucles nucléons-antinuéons en incluant des contre-termes au Lagrangien. Le principe étant d'incorporer au Lagrangien (2.2) de nouveaux termes non linéaires en champs mésoniques compensant exactement les contributions divergentes et permettant de renormaliser notre théorie cette idée donne naissance aux théories de type No-Sea Effective Theory (NSET) [Kar10].

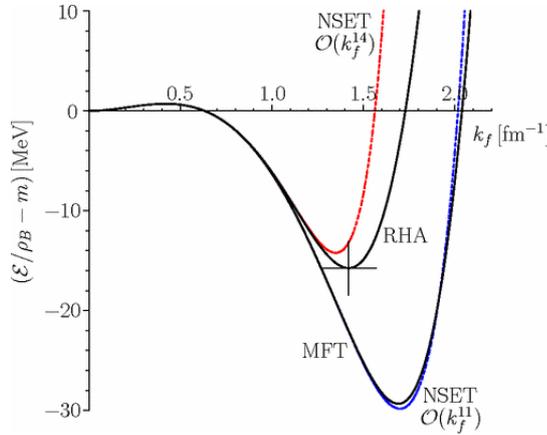


FIGURE 2.2 – Comparaison des techniques de renormalisation NSET et de l'approximation *no-sea* issu de [Kar10]

En 2.2 on peut ainsi comparer l'approximation *no-sea* et la théorie effective complète NSET. Pour de faibles valeurs de l'impulsion de Fermi (typiquement  $k_f < 1.2$  fm), les approximations coïncident avec la théorie complète. Pour de plus grandes valeurs de  $k_f$  il faudra dans le cadre de l'approximation *no-sea*, absorber les effets restant de la structure du vide dans la dépendance en densités de constantes de couplage que l'on discutera ultérieurement. En conclusion l'approximation *no-sea* permet de reformuler le problème en ne conservant que des nucléons peuplant des états d'énergies positifs. Ainsi les opérateurs spinoriels s'expriment en fonction des seuls

opérateurs de création et annihilation nucléoniques

$$\begin{aligned}\psi_0(x) &= \sum_{\alpha} \{f_{\alpha}(x)e^{-iE_{\alpha}t}b_{\alpha}\} \\ \psi_0^{\dagger}(x) &= \sum_{\alpha} \{f_{\alpha}^{\dagger}(x)e^{iE_{\alpha}t}b_{\alpha}^{\dagger}\}\end{aligned}\quad (2.46)$$

Sur cette base on peut à présent exprimer l'Hamiltonien effectif total du système  $H_0$  en seconde quantification.

### 2.1.8 Hamiltonien quantifié

$$H_0 = T + \sum_m V_m \quad (2.47)$$

Où :

$$T = \sum_{i,j} b_i^{\dagger} b_j \int d^3x \bar{f}_i(x) [i\gamma \cdot \Delta + M] f_j \quad (2.48)$$

est l'énergie cinétique tandis que

$$V_m = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} b_i^{\dagger} b_j^{\dagger} b_k b_l \int d^3x_1 d^3x_2 \bar{f}_i(x_1) \bar{f}_j(x_2) \Gamma_m(x_1, x_2) D_m(x_1, x_2) f_k(x_2) f_l(x_1) \quad (2.49)$$

représente le terme d'interaction à deux corps issus des échanges mésoniques. A ce niveau nous avons pu construire un Hamiltonien en seconde quantification ne dépendant pas de la densité baryonique.

## 2.2 Théorie Hartree-Fock

Pour décrire l'état fondamental du système il faut résoudre l'équation de Schrödinger

$$H_0 |\Phi_0\rangle = E_0 |\Phi_0\rangle \quad (2.50)$$

Où  $H_0$  est l'Hamiltonien (2.47),  $E_0$  et  $|\Phi_0\rangle$  sont l'énergie et la fonction d'onde du noyau à déterminer. Comme vu au premier chapitre, on se place dans l'approximation de champ-moyen mais cette fois avec un Hamiltonien effectif. On postule ainsi que l'état fondamental du système à A-nucléons s'écrivant sous la forme d'un déterminant de Slater. Ce déterminant est construit sur une base à un corps formée par les opérateurs créations et annihilation nucléoniques  $\{b_i, b_i^{\dagger}\}$  :

$$|\Phi_0\rangle = \prod_i b_i^{\dagger} |0\rangle \quad (2.51)$$

Où  $|0\rangle$  représente le vide de la théorie. Dans le cas de l'approximation de champ moyen on peut développer la valeur de l'Hamiltonien sur une base de déterminants de Slater composés d'états à une particule  $\phi_i$ . Le nombre d'états à une particule ne dépend dans ce cas que du nombre de nucléons A.

$$E_0 = \langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle = \sum_i^A \langle i | T | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_m \sum_{i,j}^A \langle ij | V_m [ |ij\rangle - |ji\rangle ] \quad (2.52)$$

On veut en premier lieu décrire l'état fondamental des noyaux atomiques, on se place donc dans la limite où les champs sont indépendants du temps. De plus on restreindra notre étude aux noyaux possédant un nombre de nucléons et de protons pairs.

Les systèmes pairs-pairs ont pour particularité de conserver la parité sous renversement du temps et par conséquent la composante spatiale des sources des équations Klein-Gordon ((2.9)-(2.13)) ne contribueront pas au terme de Hartree. Les équations de Hartree-Fock s'obtiennent alors en minimisant (2.52) par rapport aux fonctions d'ondes de la base.

$$\delta[\langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle - E \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle] \quad (2.53)$$

On obtient ainsi les fonctions d'ondes à un corps et l'énergie de l'état fondamental. Toutefois dans ce cadre on ne saurait décrire correctement les observables nucléaires. Pour obtenir une description satisfaisante il faut prendre en compte des corrélations supplémentaires issues des effets complexes du milieu nucléaire (le *bulk*), négligées par les approximations successives. Autrement dit il faut aller au delà de la stricte théorie Hartree-Fock définie précédemment.

### 2.3 Prise en compte des corrélations particules-trous dites de *bulk*

Pour prendre en compte ces corrélations, on peut utiliser différentes méthodes. Dans le cadre de notre travail nous en étudierons deux.

- Approche perturbative.
- Rajout d'une dépendance en densité.

Pour être à même de contrôler l'incorporation des corrélations on procède en développant les observables d'intérêt en série perturbative. D'autre part tandis qu'on peut incorporer implicitement divers types de corrélations en incluant la dépendance en densité discutée au précédent chapitre que l'on ajustera sur les données expérimentales. Cette dernière méthode bien que plus efficace pour la description physique du noyau renforce la dépendance phénoménologique de notre modèle.

#### 2.3.1 Méthode perturbative

##### Dérivation algébrique

Le principe de base des méthodes perturbatives à N-corps [[MP34]-[Tob57]] que l'on nomme MBPT (*Many Body Perturbation Theory*) est basée sur la théorie de Rayleigh-Schrödinger [Lin74]. La première étape réside dans la partition du problème complet décrit par l'Hamiltonien exact  $H_{\text{exact}}$  (2.34) en un Hamiltonien effectif non-perturbé  $H_0$  et une perturbation  $W$ .

$$H_{\text{exact}} = H_0 + W \quad (2.54)$$

Un point important de la problématique est le choix de l'Hamiltonien non-perturbé, dans notre cadre on choisira l'Hamiltonien Hartree-Fock  $H_{\text{HF}}$ , ne dépendant que de la matrice-densité à un corps dont les éléments de matrices s'écrivent

$$H_{ij}[\rho] = t_{ij} + \sum_{kl} \tilde{v}_{ijkl} \rho_{lk} \quad (2.55)$$

Les états propres exacts de  $H_{\text{HF}}$  sont des déterminants de Slater que l'on notera ici  $|\Psi\rangle_{\text{HF}}$  construits à partir des fonction d'ondes nucléoniques indépendantes  $|\psi_i\rangle$ . Ainsi

$$H_{\text{HF}} |\Psi\rangle_{\text{HF}} = E_{\text{HF}} |\Psi\rangle_{\text{HF}} \quad (2.56)$$

Où les valeurs propres correspondent à la somme des énergies de particules indépendantes obtenues en résolvant les équations Hartree-Fock décrite précédemment.

$$E_{\text{HF}} = \sum_n^A \epsilon_n \quad (2.57)$$

La correction à l'énergie au premier ordre de la série perturbative est déjà incluse dans l'énergie Hartree-Fock. On peut calculer la première correction à l'énergie, qui correspond donc au deuxième ordre en perturbation. Formellement on peut l'écrire

$$E_W^{(2)} = \sum_{n>0}^{\infty} \frac{|\langle 0|W|n\rangle|^2}{E_W^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (2.58)$$

Où  $|0\rangle$  désigne l'état fondamental, ici l'état Hartree-Fock  $|\Psi\rangle_{\text{HF}}$ . Il faut déterminer les éléments de matrices couplant l'état fondamental aux états excités. On introduit la notation usuelle traduisant la construction d'états excités.

$$|\psi_{abc}^{rst}\rangle = a_t^\dagger a_s^\dagger a_r^\dagger a_c a_b a_a |\Psi\rangle_{\text{HF}} \quad (2.59)$$

Les états  $r, s, t, \dots$  réfèrent à des excitations de type particules et les états  $a, b, c, \dots$  à des trous. Dans notre cas où l'on ne considère qu'une interaction à deux corps, les éléments de matrices couplant des états différents de 3 excitations, ou plus seront nuls. Reste à évaluer les couplages entre des déterminants de Slater auxquels on a rajouté une ou deux particules.

$$\begin{aligned} \sum_{n>0}^{\infty} |\langle 0|W|n\rangle|^2 =_{\text{HF}} & \langle \Psi | H_{\text{exact}} | \Psi_a^r \rangle -_{\text{HF}} \langle \Psi | H_{\text{HF}} | \Psi_a^r \rangle \\ & +_{\text{HF}} \langle \Psi | H_{\text{exact}} | \Psi_{ab}^{rs} \rangle -_{\text{HF}} \langle \Psi | H_{\text{HF}} | \Psi_{ab}^{rs} \rangle \end{aligned} \quad (2.60)$$

Le théorème de Brillouin et les propriétés des états Hartree-Fock permettent de ne conserver que la contribution provenant du couplage aux états doublement excités. Pour ces états auxquels deux excitations ont été rajoutées on peut écrire

$$H_W |\Psi_{ab}^{rs}\rangle = \left( E^{(0)} - (\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s) \right) |\Psi_{ab}^{rs}\rangle \quad (2.61)$$

Ainsi le second ordre de la correction à l'énergie est

$$E_W^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{a,b,r,s} \frac{|\langle ab|W|rs\rangle|^2}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)} \quad (2.62)$$

Toutefois une dérivation purement algébrique des corrections s'avère pénible et fastidieuse. Pour permettre un traitement systématique des perturbations un formalisme diagrammatique est nécessaire

### Dérivation diagrammatique

En suivant l'approche de Hugenholtz [SB09] on peut représenter chaque contribution à la série perturbative sous la forme d'un diagramme. En postulant un ensemble de règles de transcription, permettant le passage d'un diagramme vers l'expression algébrique correspondante de manière bijective. Un diagramme est constitué d'un ensemble de points (vertex ou sommets) alignés verticalement et de lignes (arêtes ou arcs) les connectant.

L'ordre de la correction  $n$  détermine le nombre de vertex, ensuite on trace tous les arcs pouvant connecter les  $n$  vertex entre eux. Par convention on munira les arcs descendants des indices trous  $a, b, c$  et les lignes ascendantes des indices particules  $r, s, t$ . Pour écrire un diagramme cohérent :

1. On associe à chaque vertex un élément de matrice où les indices des lignes incidentes correspondent aux *bra* et les indices des lignes émergentes indiquent les index du *ket*

2. Chaque ligne descendante  $d$  contribue au dénominateur d'un facteur  $\epsilon_d$  et une ligne montante  $m$  d'un facteur  $-\epsilon_m$ .
3. Le signe global d'un terme est donné par un facteur  $(-1)^{h+l}$  pour  $h$  lignes descendantes et pour  $l$  boucles fermées
4. On somme sur tous les labels apparaissant dans le diagramme
5. Enfin on rajoute un facteur  $2^k$  avec  $k$  le nombre de lignes connectés aux mêmes vertex.

Le second ordre de la perturbation est ainsi représenté en Figure 2.3

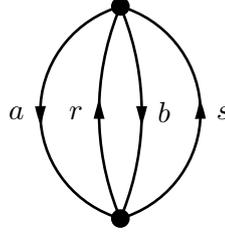


FIGURE 2.3 – Diagramme représentant la correction du second ordre à l'énergie Hartree-Fock dans le cadre MBPT

Les deux vertex de ce diagramme correspondent aux élément de matrices

$$\langle ab|W|rs\rangle \langle rs|W|ab\rangle \quad (2.63)$$

A partir des lignes entrantes et sortantes on détermine l'expression du dénominateur

$$(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s) \quad (2.64)$$

Il y a deux lignes orientées vers le bas, ce qui implique deux excitations de type trous, par conséquent  $h = 2$ . Enfin deux paires de lignes lient les mêmes vertex, donc  $k = 4$ . Enfin le nombre de boucle fermée dans ce cas est  $l = 2$ , ce qui conduit à l'expression

$$E_W^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{a,b,r,s} \frac{|\langle ab|W|rs\rangle|^2}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)} \quad (2.65)$$

Qui correspond exactement à (2.62), l'avantage d'une méthode diagrammatique réside dans la systématité inhérente aux règles de construction. On peut mettre à profit cette spécificité pour automatiser la génération des diagrammes et des expressions algébriques correspondantes, directement utilisables pour l'évaluation numérique des corrections.

### Génération automatique

La génération automatique de diagrammes de Feynman ou de Hugenholtz est un problème ayant attiré beaucoup d'attention [STE03],[PG95]. Toutefois aucune application moderne et modulable adaptée à la physique nucléaire n'existe. Afin de fournir un outil robuste permettant de développer des corrections aux ordres élevés nous avons besoin de faire appel à quelques notions de théories des graphes.

**Définition.** Graphe :

Un graphe  $\mathcal{G}$  est totalement caractérisé par le triplé  $(V,E, \omega)$

- $V$  est l'ensemble des Vertex ou sommets du graphe
- $E$  est l'ensemble des arêtes ou arcs reliant les sommets

—  $\omega$  est un poids associé aux arêtes

**Propriétés.** Propriétés générales des graphes :

- Deux sommets reliés par une arête sont dits adjacents
- Une arête adjacente à un seul sommet est appelée une boucle
- Un sous-graphe de  $\mathcal{G}$  est un graphe  $(V', E', \omega')$  où  $V' \subseteq V$  et où  $E' \subseteq E$  et  $\omega'$  étant la restriction de  $\omega$  à  $E'$ .

**Définition.** Chaînes, chemins et cycles :

- Une chaîne reliant des sommets  $v_1, v_2, \dots, v_n$  est la suite finie d'arêtes entres ces sommets.
- Une chaîne est dite fermée si  $v_1 = v_n$ , ouverte sinon.
- Un chemin est une chaîne dont tous les sommets sont distincts.
- Un cycle est une chaîne fermée dont le sommet initial est distinct de tous les sommets intermédiaires.
- Un graphe est dit connexe si pour n'importe quelle paires de sommets est connectée par une arête.
- On appelle graphe orienté un graphe dont les arêtes sont munies d'un sens

**Définition.** Matrices d'incidence :

Soit un graphe orienté  $G$  sa matrice d'incidence associée  $\mathcal{I}(G)$  de taille  $n \times p$  où  $n$  est le nombre de sommets et  $p$  le nombre d'arcs. Ses coefficients  $\mathcal{I}_{ij}$  valent -1 pour un arc  $x_j$  sortant d'un sommet  $v_i$ , 1 pour un arc  $x_j$  entrant dans un sommet  $v_i$  et 0 sinon.

**Définition.** Matrices d'adjacence :

Une matrice d'adjacence associée à un graphe  $\mathcal{G} = (V, E, \omega)$  possédant  $n$  sommets  $v_1, \dots, v_n$  dont les coefficients sont définis comme

$$\mathcal{A}_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } \{v_i, v_j\} \in E \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

A titre d'exemple considérons le graphe donné en Figure 2.4

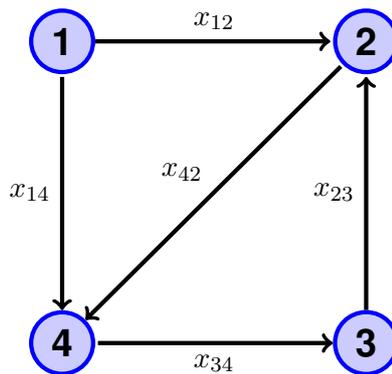


FIGURE 2.4 – Exemple d'un graphe orienté à 4 sommets et 5 arcs

La matrice d'adjacence associée s'exprime

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.66)$$

Pour générer les diagrammes de Hugenholtz dans le cadre de l'approche MBPT on peut traduire la procédure de génération manuelle des graphes décrite à la section précédente en terme de conditions sur les matrices d'adjacence. Pour générer l'ensemble des termes de la série perturbative à l'ordre  $n$  pour une interaction à deux corps on

1. Génère l'ensemble des matrices  $\mathcal{A} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{N})$  vérifiant la condition de partition

$$a_{ij} + a_{ji} = 2 \quad (2.67)$$

2. On impose que tous les coefficients diagonaux  $a_{ii}$  soient nuls

3. On vérifie que

$$\sum_i^n a_{ij} = \sum_j^n a_{ij} = 2 \quad (2.68)$$

4. Enfin on vérifie que les matrices ainsi générées soient irréductibles, traduisant le caractère totalement connecté des diagrammes de Hugenholtz.

On peut implémenter cet algorithme en python, utilisant les bibliothèques NETWORKX et NUMPY. On obtient ainsi les matrices d'adjacences chacune d'elle correspondant à un et un seul diagramme. Pour exemple les graphes aux troisième ordres en perturbation sont présentés en Figure 2.5.

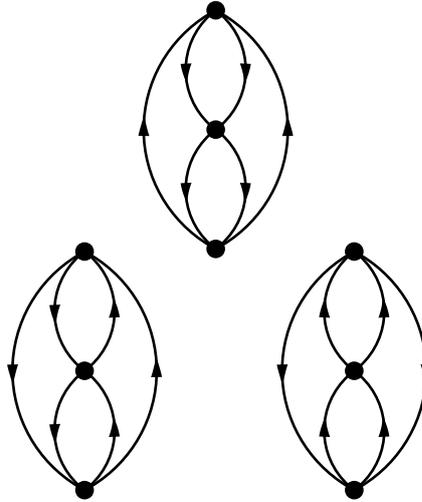


FIGURE 2.5 – Diagrammes de Hugenholtz contribuant à la correction à l'ordre 3 en perturbation de l'énergie.

Suite à cette étape de génération on peut il faut extraire des diagrammes générés l'expression algébrique leur étant associée. La représentation la plus adaptée pour cette extraction est de se placer dans la perspective des matrices d'incidences. Sous cette forme on peut identifier chaque arc par une colonne et chaque sommet par une ligne. On peut ainsi procéder à l'identification des arcs correspondants à des excitations de types trous ou de type particules. Le facteur de normalisation empêchant tout double comptage est obtenu en comptant les colonnes identiques  $N$ . En généralisant la procédure de transcription présentée en section précédente on peut obtenir l'expression algébrique de la perturbation à un ordre quelconque. Pour le troisième ordre l'expression algébrique correspondante obtenue par cette méthode est donnée en (2.69). Expression identique à la détermination des indices de boucle près aux

expression dérivées algébriquement [SB09].

$$\begin{aligned}
 E_W^{(3)} = & \frac{1}{8}(-1)^{4+l} \sum_{abcdrs} \frac{\langle ab|W|rs\rangle \langle rs|W|cd\rangle \langle cd|W|ab\rangle}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)(\epsilon_c + \epsilon_d - \epsilon_r - \epsilon_s)} \\
 & + (-1)^{3+l} \sum_{abcrst} \frac{\langle ab|W|rs\rangle \langle cs|W|tb\rangle \langle rt|W|ac\rangle}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)(\epsilon_a + \epsilon_c - \epsilon_t - \epsilon_r)} \\
 & + \frac{1}{8}(-1)^{2+l} \sum_{abrstu} \frac{\langle ab|W|rs\rangle \langle rs|W|tu\rangle \langle tu|W|ab\rangle}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_t - \epsilon_u)}
 \end{aligned} \tag{2.69}$$

### Programme ADG

Les algorithmes décrits précédemment ont été implémentés dans le cadre d'un programme informatique très général : ADG (*Automated Diagram Generator*) disponible librement et fera l'objet d'une publication dans *Computer Physics Communications*. En utilisant la structure creuse des matrices d'adjacences on peut considérablement diminuer la complexité numérique des algorithmes précédents ; aussi on peut donner quelques chiffres quantifiant les performances de notre implémentation

Ordre	Nombres de diagrammes	Temps d'exécution (s)
2	1	< 0.01
3	3	0.01
4	39	0.12
5	870	3.2

TABLEAU 2.1 – Nombres de diagrammes de Hugenholtz dans le cadre du formalisme MBPT et temps d'exécution du programme ADG sur un ordinateur portable

On trouvera en Annexe A définir une sortie de notre programme présentant les diagrammes et expressions de l'énergie à l'ordre 4 en perturbation. Dans le cadre de ces méthodes on peut obtenir moyennant un lourd coup numérique de très bonnes approximations de l'état fondamental de certains noyaux atomiques. Toutefois pour notre étude nous nous focaliserons sur une autre technique de prise en compte des corrélations particules-trous.

### 2.3.2 Dépendance en densité

Le fait de rajouter une dépendance en densité rend la théorie mathématiquement spurieuse. Comme nous allons le voir nous ne serons plus en toute rigueur en présence d'une théorie Hamiltonienne, l'objet fondamental de notre théorie sera en effet l'énergie prise en tant que fonctionnelle de la densité. On ne parlera par la suite que de théorie pseudo-hamiltonienne ou encore pseudo-Hartree-Fock. D'autres pathologies apparaîtront lorsque l'on considérera des brisures explicites de certaines symétries du problème. On considère donc le Hamiltonien du système (2.47) mais cette fois on considérera une dépendance en densité de ses constantes de couplage. On considère cette fois  $H_0$  comme étant une fonctionnelle de la seule densité totale du système  $\rho$  (au travers des couplages du terme d'interaction)

$$\begin{aligned}
 H_0 &= H_0[\rho] \\
 \rho_{ij} &= \langle \Phi_0 | b_j^\dagger b_i | \Phi_0 \rangle
 \end{aligned} \tag{2.70}$$

En effet l'approximation de champ moyen garantit la réduction de toute l'information du système à sa matrice densité. On peut s'assurer que  $|\Phi_0\rangle$  est bien un déterminant

de Slater si et seulement si la matrice densité associée est idempotente ( $\rho^2 = \rho$ ). L'énergie fonctionnelle de la densité est construite comme la valeur moyenne de l'Hamiltonien dans l'état  $|\Phi_0\rangle$ .

$$\mathcal{E}_{RHF}[\rho] = \langle \Phi_0 | H_0[\rho] | \Phi_0 \rangle \quad (2.71)$$

En appliquant le théorème de Wick à (2.52) on obtient

$$\mathcal{E}_{RHF}[\rho] = \sum_{ij} T_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl}[\rho] \{ \rho_{li} \rho_{kj} - \rho_{kl} \rho_{ij} \} \quad (2.72)$$

Où

$$\begin{aligned} T_{ij} &= \int d^3x \bar{f}_i [-i\gamma \cdot \nabla + M] f_j \\ V_{ijkl} &= \int \int d^3x d^3y \bar{f}_i(x) \bar{f}_j(y) \Gamma_m(x, y) f_k(y) f_l(x) \end{aligned} \quad (2.73)$$

Dans la base des  $\{b_i, b_i^\dagger\}$  l'opérateur densité est diagonal par conséquent la partie cinétique  $T_{ij}$  de (2.73) l'est aussi. Il est toutefois important de noter qu'en imposant une dépendance en densité des constantes de couplage on rajoute une contribution de réarrangement à la self-énergie

$$\begin{aligned} \Sigma_\mu^R &= \frac{j_\mu}{\rho} \left[ \frac{\partial g_\sigma}{\partial \rho} \bar{\psi} \sigma \psi + \frac{\partial g_\omega}{\partial \rho} \bar{\psi} \gamma_\nu \omega^\nu \psi + \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial g_\rho}{\partial \rho} \bar{\psi} \gamma_\nu \vec{\rho}^\nu \cdot \vec{\tau} \psi + \frac{1}{m_\pi} \frac{\partial f_\pi}{\partial \rho} \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\nu \partial^\nu \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} \psi \right] \end{aligned} \quad (2.74)$$

### Contribution de l'interaction

Deux contributions engendrent la valeur moyenne du terme interaction  $V_m[\rho]$ .

1. La contribution directe, dite contribution de Hartree pouvant être diagrammatiquement représentée

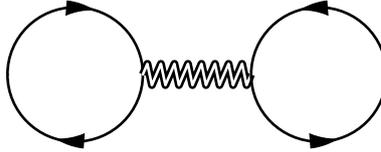


FIGURE 2.6 – Contribution directe (terme de Hartree)

Pour chaque méson la contribution de Hartree a pour expression

$$V_m^{\text{Hartree}} = \pm \frac{1}{2} \sum_{ij} \int \int d^3x d^3y [\bar{f}_i(x) \Gamma_m(x) f_i(x)] D_m(x, y) [\bar{f}_j(y) \Gamma_m(y) f_j(y)] \quad (2.75)$$

Dans le cas d'un méson scalaire la contribution est négative, mais sera positive dans les autres cas. Les expressions des constantes de couplage effectives s'expriment

$$\begin{aligned} \Gamma_A &= e\gamma^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \\ \Gamma_\sigma &= g_\sigma(\rho) \\ \Gamma_\omega &= g_\omega(\rho) \gamma^\mu \\ \Gamma_\rho &= g_\rho(\rho) \gamma^\mu \vec{\tau} \\ \Gamma_\pi &= \frac{f_\pi(\rho)}{m_\pi} \gamma_5 \gamma \cdot \nabla \vec{\tau} \end{aligned} \quad (2.76)$$

En utilisant (2.33) on peut exprimer (2.75) en fonction des champs mésoniques  $\phi_m$  en intégrant sur l'une des coordonnées.

$$V_m^{\text{Hartree}} = \pm \frac{1}{2} \sum_i j \int d^3x \bar{f}_i \Gamma_m(x) \int d^3y \bar{f}_j(y) D_m(x, y) \Gamma_m(y) f_j(y) f_i(x) \quad (2.77)$$

$$V_m^{\text{Hartree}} = \frac{1}{2} \sum_i \int d^3x [\bar{f}_i(x) \Gamma_m \langle \phi_m \rangle f_i(x)] \quad (2.78)$$

Où l'on a introduit la valeur moyenne des champs mésoniques  $\langle \phi_m \rangle$ . Par conséquent seule la valeur moyenne des champs  $\phi_m$  intervient dans la contribution à l'énergie. Par conséquent ils interviennent en tant que champs classiques. Pour ne pas alourdir les équations suivantes on posera  $\phi_m = \langle \phi_m \rangle$ . On peut à présent faire de nouveau intervenir les paramètres mésoniques en utilisant les équations de Klein-Gordon et une intégration par partie liant sources et dynamique des mésons en interaction.

$$V_m^{\text{Hartree}} = \pm \frac{1}{2} \int d^3x \left[ (\partial_\mu \phi_m)^2 + m_m^2 \right] + \sum_{ij} \int d^3x [\bar{f}_i(x) \Gamma_m(x) \phi_m(x) f_i(x)] \quad (2.79)$$

2. La contribution de Fock, ou contribution d'échange peut-être représentée par le diagramme.

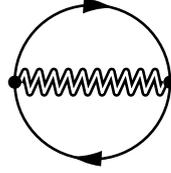


FIGURE 2.7 – Contribution d'échange (terme de Fock)

$$V_m^{\text{Fock}} = \pm \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{I}_{ij} \int d^3x d^3y [\bar{f}_i(x) \Gamma_m(x) f_j(x)] D_m(x, y) [\bar{f}_j(y) \Gamma_m(y) f_i(y)] \quad (2.80)$$

On note  $\tau_i$  l'isospin de l'état quantique  $|i\rangle$  et

$$\mathcal{I}_{ij} = \begin{cases} \delta_{\tau_i, \tau_j} & \text{Couplage isoscalaire} \\ 2 - \delta_{\tau_i, \tau_j} & \text{Couplage isovecteur} \end{cases} \quad (2.81)$$

Ces deux contributions permettent d'exprimer l'énergie en tant que fonctionnelle de la densité

$$\mathcal{E}^{\text{RHF}}[\rho] = Tr[(-i\gamma \cdot \nabla + M\Gamma_m \phi_m)\rho] + \frac{1}{2} Tr[\mathcal{V}[\rho]\rho^\dagger \otimes \rho] \pm \frac{1}{2} \int d^3x [(\partial_\mu \phi_m)^2 + m - m^2] \quad (2.82)$$

La trace indique que l'on somme sur les indices de Dirac tandis que  $\mathcal{V}$  est l'opérateur traduisant l'interaction  $V_{ijkl}$  de (2.73). La prise en compte du terme d'échange a pour effet de renforcer légèrement l'énergie de liaison du noyau et par conséquent de réduire le rayon moyen du noyau. L'effet de ce terme joue toutefois un rôle majeur dans l'influence du spin-orbite sur le système.

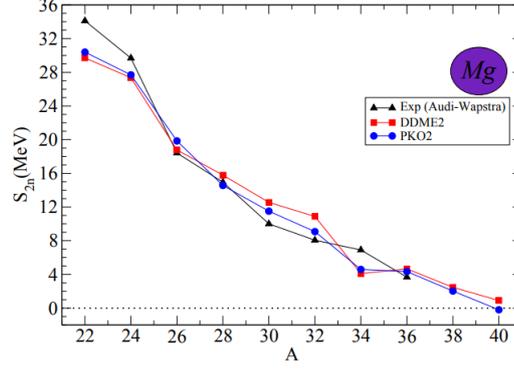


FIGURE 2.8 – Comparaison de l'énergie de séparation à deux neutrons pour des isotopes du Magnésium. Avec terme d'échange (PKO2) et sans (DD-ME2), en noir les valeurs expérimentales. (Issu de [EKPhAV11])

### Équations Hartree relativistes

Muni des outils et équations introduit précédemment on peut formuler les équations Hartree-Fock dans leur version relativiste. Toutefois pour permettre la résolution des équations en un temps raisonnable on peut absorber la contribution des termes d'échanges dans la dépendance en densité des constantes de couplage. Cette dernière approximation n'a pas de conséquences majeures dans notre cas mais empêche un potentiel traitement des états excités par les méthodes de type RPA (*Random Phase Approximation*). A titre de comparaison on peut comparer pour les isotopes du Magnésium les énergies de séparation à deux neutrons avec et sans prise en compte explicite du terme de Fock (Figure ??). Dans ce cadre on ne conservera donc que les équations incluant la contribution de Hartree. Cette approximation donne naissance à la théorie dite de champ moyen relativiste (*Relativistic Mean Field*). De plus, expérimentalement les potentiels nucléaires préservent la parité. Aussi les mésons pseudo-scalaires (ici le pion) générant des potentiels de Hartree violant la parité ne contribuent pas aux équations de champ moyens.

Par analogie avec (2.53) la matrice densité est déterminée par minimisation de l'énergie fonctionnelle de la densité en imposant la contrainte d'idempotence sur  $\rho$ .

$$\delta \left[ \mathcal{E}^{RMF} - \sum_{kl} \Lambda_{kl} (\rho^2 - \rho)_{kl} \right] = 0 \quad (2.83)$$

Il est important de noter qu'aucun théorème d'existence ne permet d'affirmer qu'un minimum peut être trouvé. En effet cette minimisation ne suit pas un principe variationnel de Ritz, la fonctionnelle dépendant de la matrice densité. Aussi le minimum obtenu peut être inférieur à l'énergie de l'état fondamental réel. Cette minimisation débouche sur les équations du champ moyen relativiste

$$\begin{aligned} [h[\rho], \rho] &= 0 \\ (-\delta + m_m^2)\phi_m &= \pm Tr(\Gamma_m \rho) \end{aligned} \quad (2.84)$$

Où  $h[\rho]$  est le pseudo-hamiltonien<sup>2</sup> de Dirac défini par la dérivée fonctionnelle de l'énergie fonctionnelle de la densité.

$$h[\rho] = \frac{\delta \mathcal{E}^{RMF}}{\delta \rho} \quad (2.85)$$

2. On parlera ici de pseudo-hamiltonien à cause de sa dépendance en densité

Par conséquent bien qu'il ne s'agisse pas à proprement parler d'une théorie Hamiltonienne on peut en dériver les équations de Hartree relativistes en représentation coordonnées sous forme :

— D'une equation de Dirac

$$\left(-i\alpha \cdot \nabla + \beta M^*(r) + [V(r) + \Sigma^R(r)]\right) f_i(r, q_i) = \epsilon_i f_i(r, q_i) \quad (2.86)$$

Où

- $M^*(r)$  est la masse effective de Dirac

$$M^*(r) = M + S(r) \quad (2.87)$$

- $S(r)$  et  $V(r)$  sont respectivement les contributions de Hartree à la self-energy scalaire et de la composante temporelle vectorielle

$$\begin{aligned} S(r) &= g_\sigma(\rho_v)\sigma(r) \\ V(r) &= g_\omega(\rho_v)\omega^0(r) + g_\rho(\rho_v)\rho_3^0(r)\tau_3 + eA^0(r) \end{aligned} \quad (2.88)$$

- Enfin  $\Sigma^R$  correspond au terme de réarrangement de la self-énergie (2.74) provenant de la dépendance en densité.
- Enfin  $\alpha$  et  $\beta$  correspondent aux matrices  $\gamma^0\gamma$  et  $\gamma^0$  en représentation de Dirac.

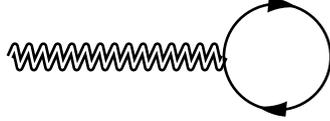


FIGURE 2.9 – Contributions directes à la self-énergie (S et V)

— De trois équations de Klein-Gordon (pour les mésons) et d'une équation de Poisson pour le photon représentant les effets Coulombiens.

$$\begin{aligned} -\Delta A^0(r) &= e\rho_c(r) \\ (-\Delta + m_\sigma^2)\sigma(r) &= -g_\sigma(\rho_v)\rho_s(r) \\ (-\Delta + m_\omega^2)\omega^0(r) &= g_\omega(\rho_v)\rho_v(r) \\ (-\Delta + m_\rho^2)\rho_3^0(r) &= g_\rho(\rho_v)\rho_{tv}(r) \end{aligned} \quad (2.89)$$

Où les termes sources correspondent aux densités scalaires et vectorielles ainsi qu'à la composante temporelle des 4-vecteurs courants  $j_\mu, \vec{j}_\mu, j_C^\mu$  :

$$\rho_s(r) = \sum_i \bar{f}_i(r) f_i(r) \quad (2.90)$$

$$\rho_v(r) = j^0 = \sum_i f_i^\dagger(r) f_i(r) \quad (2.91)$$

$$\rho_{tv}(r) = j_3^0 = \sum_i f_i^\dagger(r) \tau_3 f_i(r) = \rho_v^{\text{protons}} - \rho_v^{\text{neutrons}} \quad (2.92)$$

$$\rho_c(r) = j_C = \sum_i f_i^\dagger(r) \frac{1 - \tau_3}{2} f_i(r) = \rho_v^{\text{protons}} \quad (2.93)$$

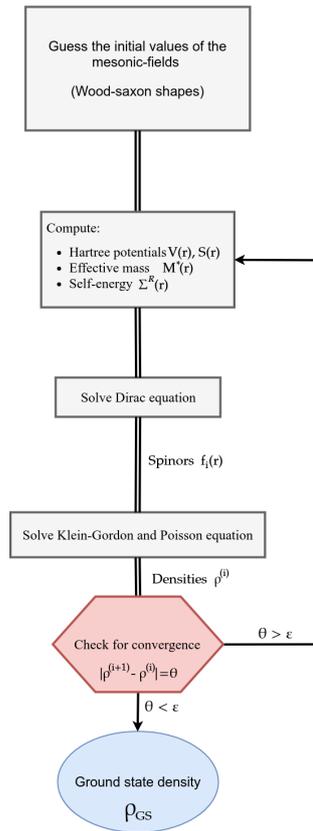


FIGURE 2.10 – Schéma de résolution dans le cadre d’approche d’un champ moyen relativiste auto-cohérent

Aussi la détermination d’observables du noyau dans son état fondamental est conditionnée à la résolution du système d’équations décrit précédemment. Il faut résoudre un système d’équations différentielles et intégrées couplées. De plus pour résoudre l’équation de Dirac (2.86) il faut préalablement connaître les champs mésoniques  $\phi_m$  générant les potentiels de Hartree. De même pour résoudre les équations de Poisson et de Klein-Gordon (2.89) il faut déterminer leurs termes sources s’obtenant eux-même grâce aux spineurs nucléoniques solution de (2.86). Ce modèle est donc intrinsèquement auto-cohérent. On peut établir un schéma numérique permettant la résolution de ce système en figure [2.10].

### 2.3.3 Conclusions

Pour pouvoir présenter une description satisfaisante du noyau atomique, il a fallu prendre en compte les corrélations particules-trous dites de bulk. Dans le cadre de ce travail, deux approches sont proposées, d’une part l’approche purement Hamiltonienne, permettant d’extraire des observables à partir d’une théorie Hamiltonienne vraie, issue d’une paramétrisation relativiste de l’interaction nucléon-nucléon. Puis on développe les observables d’intérêt en perturbation pour incorporer les corrélations du bulk ordre par ordre. Une méthode formelle d’automatisation du traitement des perturbations à été développée et présentée. D’autre part on peut au prix d’une augmentation du niveau de phénoménologie du modèle, construire un théorie fonctionnelle de la densité en faisant dépendre explicitement le Lagrangien de l’interaction nucléon-nucléon de la densité du système. Cette dépendance permet de capturer pour un très faible coût numérique une grande partie des corrélations du bulk, fournissant ainsi une description satisfaisante au regard des mesures expérimentales.

## 2.4 Corrélations de type particules-particules

### 2.4.1 Introduction

Comme brièvement mentionné au premier chapitre [1.1.5] plusieurs phénomènes expérimentaux ne peuvent être décrits dans le cadre des approches précédemment introduites. On peut principalement noter :

1. Différences dans les énergies de liaison et d'excitation entre les noyaux pairs et impairs (Figure 1.3)
2. Ouverture d'un *gap* pour les états  $0^+$  pour des noyaux proches de fermeture de couches (??).

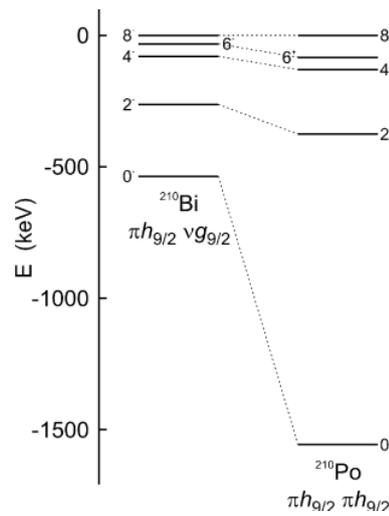


FIGURE 2.11 – Spectres du  $^{210}\text{Po}$  et du  $^{210}\text{Bi}$ , l'état  $0^+$  du Polonium est bien plus lié que dans le Bismuth

3. L'énergie de l'état  $2^+$  est quasi-constante pour une large plage isotopique, 2.12

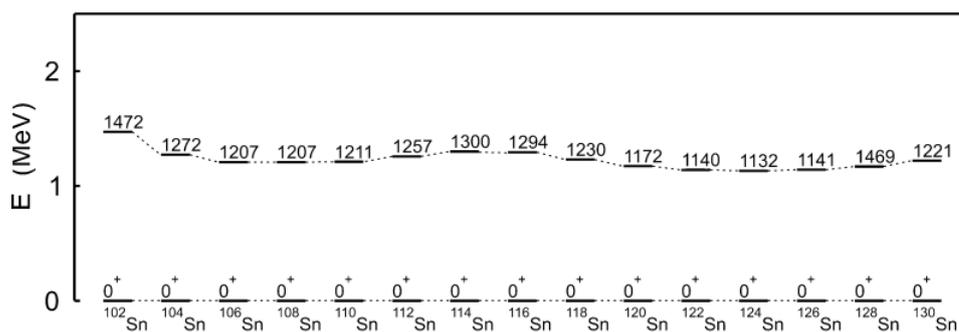


FIGURE 2.12 – Énergie de l'état  $2^+$  pour 15 isotopes de l'étain. On note la remarquable stabilité de l'énergie autour de  $\simeq 2$  MeV

4. Le *Backbending*, phénomène modifiant le comportement rotationnel des noyaux superfluides, analogue à l'effet Meissner dans les super-conducteurs.

Dans l'espoir de comprendre ces phénomènes Bohr, Mottelson et Pines [BMP58] on, par analogie avec les systèmes électroniques, interprété ces observations comme des manifestations de la superfluidité nucléaire. Le principe réside dans la formation, autour du niveau de Fermi, de paires nucléoniques, de nature quasi-bosoniques, pouvant

donc condenser et donner naissance à des effets superfluides macroscopiques. Dans le cas électronique l'interaction attractive permettant la formation de paires est issue de l'échanges de phonons entre électrons corrélés. Dans le cas du noyau atomique c'est la partie attractive dans le canal  $^1S^0$  de l'interaction nucléon-nucléon (négligée dans le cadre des modèles de champ-moyen) qui en est responsable. Autrement dit l'interaction résiduelle, permet la formation de paires, dites de Cooper, de nucléons peuplant des états de spins opposés, proche du niveau de Fermi. Ces paires se comportent en moyenne comme autant de quasi-bosons indépendants au sein du noyau et induisent des effets superfluides observables. Or la prise en compte des excitations du système s'effectue en partant de l'état fondamental de Hartree et en promouvant un ou plusieurs nucléons, autour du niveau de Fermi, depuis un état occupé vers un état vide, état dont l'énergie sera plus grande. Il est clair que l'énergie d'une telle configuration sera d'autant plus grande que l'écart entre les deux états concernés est important. Ainsi pour les noyaux magiques où ce *gap* est grand, le couplage de l'état fondamental aux états excités par l'interaction résiduelle est négligeable. La description de Hartree de leur état fondamental sera donc satisfaisante. Néanmoins pour les noyaux où l'espacement est faible, par exemple pour les noyaux à couche ouverte, l'état fondamental est quasi-dégénéré avec des configurations correspondant aux premiers états excités. Dans ce cas l'interaction résiduelle couple fortement ses états et l'approximation de champ-moyen n'est plus suffisante pour la description des propriétés de ces noyaux.

## 2.4.2 Représentation

Revenons sur la nature des paires de Cooper nucléoniques, au sens littéral il s'agit de pseudo-bosons. En tant que particules fermioniques les nucléons satisfont des relations d'anti-commutation, les paires nucléoniques, vont quant à elle satisfaire des relations de commutations bosoniques en valeur moyenne. Le théorème spin-statistique garantit que les fonctions d'ondes nucléoniques se doivent d'être anti-symétrisées par rapport à l'échange de particules. Pour un système de  $n_f$  fermions indépendants, la fonction d'onde totale du système en représentation coordonnées peut s'exprimer sous forme déterminant-ale (dans les faits un déterminant de Slater). Un déterminant étant une forme n-linéaire alternée, le caractère alterné, garantit l'anti-symétrisation totale de la fonction d'onde. Effectivement toute permutation de ligne, correspondant physiquement à l'échange spatial de deux particules, entraîne un changement de signe. L'expression explicite de ce déterminant en fonction des fonctions d'ondes individuelles peut s'obtenir par la formule de Leibnitz

$$\text{Det}(\Psi) = \sum_{\sigma \in \mathcal{G}_{n_f}} \epsilon(\sigma) \prod_{i=1}^{n_f} \psi_{\sigma(i),i} \quad (2.94)$$

Où  $\mathcal{G}_{n_f}$  est l'ensemble des permutations de cardinal  $n_f$  et  $\epsilon(\sigma)$  est la signature de la permutation. Le phénomène d'appariement correspond à une pseudo-bosonification du système, à savoir que la fonction d'onde totale du système correspondra à un produit de fonction fermionique et bosonique. De part sa nature pseudo-bosonique la nouvelle fonction d'onde de paires nucléoniques se devra d'être totalement symétrique sous l'échange des  $n_p$  paires. Une représentation possible du système peut donc s'exprimer sous la forme d'un permanent. Un permanent étant une forme n-linéaire symétrique, pouvant par conséquence s'exprimer

$$\text{Perm}(\Psi) = \sum_{\sigma \in \mathcal{G}_{n_p}} \prod_{i=1}^{n_p} \psi_{\sigma(i),i} \quad (2.95)$$

Comme parenthèse théorique on peut noter que le calcul où l'expansion symbolique d'un permanent présente une complexité bien plus grande que pour un déterminant.

A l'origine de cette complexité supplémentaire, se trouve l'impossibilité d'utiliser des méthodes d'élimination de type Gauss-Jordan. En effet à l'inverse du déterminant, le permanent n'est pas un morphisme de groupe c'est à dire qu'il n'est pas multiplicatif ( $\text{Perm}(A \cdot B) \neq \text{Perm}(A) \cdot \text{Perm}(B)$ ). Toutefois on peut exhiber une représentation déterminant-ale d'un permanent [PA13]. On peut montrer [Gre11] que pour  $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$  et  $B \in \mathbb{M}_l(\mathbb{R})$  où  $l = 2^n - 1$  et  $b_{ij} \in \{a_{ij}\} \cup \{-1, 0, 1\}$

**Théorème.**  $\forall A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$  il existe  $B \in \mathbb{M}_l(\mathbb{R})$ , où  $l = 2^n - 1$  et  $b_{ij} \in \{a_{ij}\} \cup \{-1, 0, 1\}$  telle que  $\text{Perm}(A) = \text{Det}(B)$

La construction explicite de  $B$  peut être réalisée en faisant appel à quelques outils issus de la théorie des graphes à laquelle nous avons déjà fait appel précédemment. Tout d'abord construisons un graphe orienté acyclique associé à la matrice  $A$  de taille  $l$  dont les coefficients sont notés  $\{a_{ij} : 1 \leq i, j \leq l\}$ . Ce graphe possède  $2^l$  sommets indicés par les sous-parties de  $\mathcal{S} = \{1, \dots, l\}$ . Les arcs de ce graphe ont pour poids le coefficient  $a_{ij}$  associé. A titre d'exemple considérons une matrice 3x3 que l'on notera

$$A_3 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix} \quad (2.96)$$

Le graphe associé peut être représenté en Figure 2.13.

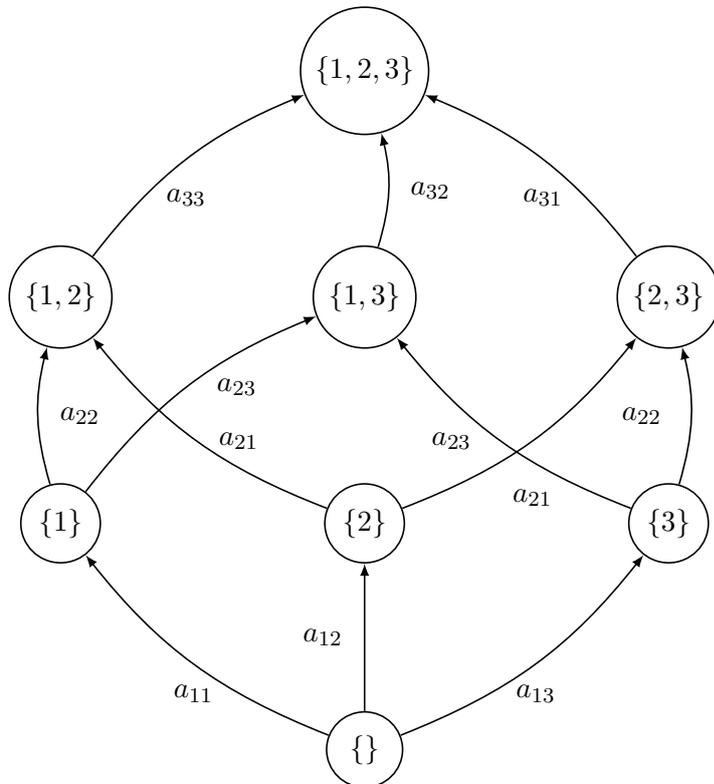


FIGURE 2.13 – Représentation en terme de graphe orienté de la matrice  $A_3$

On définit l'Arithmetic Branching Program (ABP) comme la somme du poids des chemins du graphe ; le poids d'un chemin étant défini comme le produit des poids des arcs formant ce chemin.

Dans le cas du graphe 2.13, l'APB vaut donc

$$APB(A_3) = a_{11}(a_{22}a_{33} + a_{23}a_{32}) + a_{12}(a_{21}a_{33} + a_{23}a_{31}) + a_{13}(a_{21}a_{32} + a_{22}a_{31}) \quad (2.97)$$

Ainsi l'APB du graphe associé à la matrice  $A_3$  correspond de fait au permanent de cette même matrice. A présent on opère une transformation laissant invariante la couverture cyclique du graphe (2.13), on fusionne les sommets extrémaux du graphe (dans le cas de  $A_3$  il s'agit de  $\{\}$  et  $\{1, 2, 3\}$ ) et on rajoute une boucle à chaque autre sommet dont le poids sera fixé à -1 pour les matrices de dimensions paires et 1 sinon. On obtient un nouveau graphe orienté, cyclique cette fois,  $\mathcal{G}_t$  de même APB pouvant être représenté en Figure 2.14

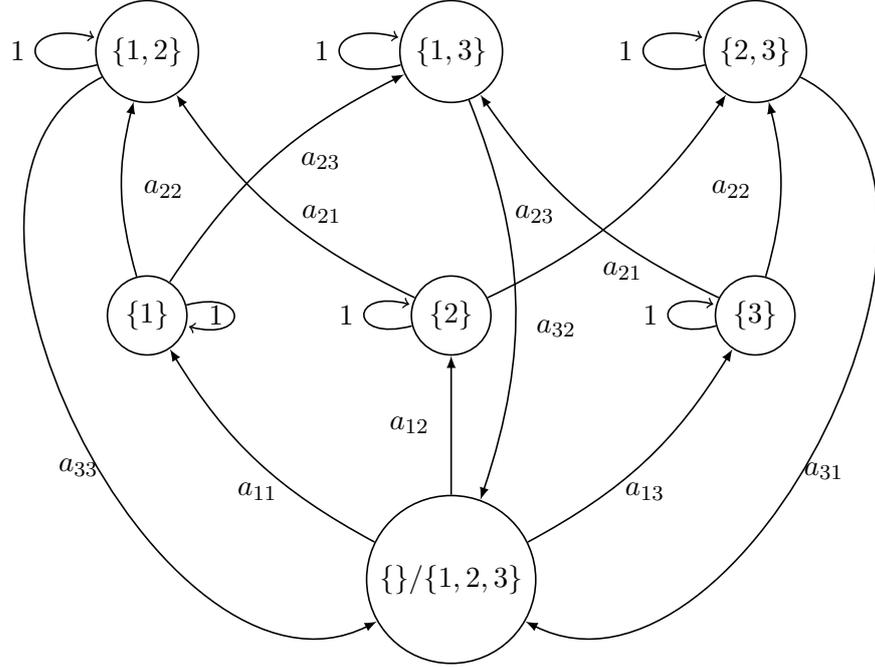


FIGURE 2.14 – Graphe  $\mathcal{G}_t$  après transformation, les sommets extrémaux sont fusionnés, le poids des boucles supplémentaires vaut 1 dans ce cas

On peut à présent considérer la matrice d'adjacence pondérée  $\mathcal{A}$  de  $\mathcal{G}_t$ , dont les éléments  $\mathcal{A}_{ij}$  prennent la valeur des poids des arcs connectant les sommets  $i$  et  $j$  et 0 si les sommets ne sont pas connectés. On obtient ainsi

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & a_{11} & a_{21} & a_{31} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & a_{33} & a_{23} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & a_{13} & a_{33} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & a_{13} & 0 & a_{23} \\ a_{22} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ a_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ a_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.98)$$

Le déterminant de cette matrice d'adjacence vaut exactement la valeur de l'APB précédent, autrement dit

$$\text{Det}(\mathcal{A}) = APB(A_3) = \text{Perm}(A_3) \quad (2.99)$$

Cette méthode permet donc d'obtenir un algorithme permettant de calculer le permanent d'une matrice en construisant une matrice supplémentaire dont il ne restera qu'à

calculer le déterminant. Cette approche permet de réduire drastiquement le coût de calcul d'un permanent (problème P-complet) et de se ramener systématiquement à un calcul de faible complexité. On peut de cette manière obtenir une structure formelle pour des fonctions d'ondes bosoniques représentant les paires nucléoniques. Au delà des considérations numériques et mathématiques ce théorème exprime d'une autre manière la possibilité de construire à partir des fonctions d'ondes fermioniques à un corps une représentation bosonique de fermions appariés.

### 2.4.3 Modèles d'appariement

Comme nous l'avons vu il est fondamental, pour être à même de décrire les systèmes nucléaires de considérer des corrélations à 2-corps (appariement), on parle génériquement de corrélations particules-particules.

Dans le cadre de cette étude nous nous attacherons à trois types d'approches permettant de prendre en compte les corrélations d'appariement à différents niveaux de précision dans le cadre du problème à N-corps.

- BCS
- PBCS
- Bogolioubov

Pour construire une théorie d'appariement il faut également une force d'appariement à même de rendre compte de la partie attractive de l'interaction résiduelle. Cette force d'appariement sera explicitée dans une section ultérieure. Suite à cela nous introduirons un modèle permettant le traitement des corrélations plus complexes, à 4-corps cette fois : les quartets.

#### Modèle BCS

Historiquement l'approche BCS<sup>3</sup> permet de rendre compte d'un état quantique, constitué de paires de Cooper. Dans ce cas l'état fondamental peut s'exprimer

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) |0\rangle \quad (2.100)$$

Où l'opérateur  $c_k^\dagger c_{-k}^\dagger$  décrit la création d'une paire de nucléons d'impulsion  $k$ ,  $-k$  et de spins opposés. De fait les deux nucléons de la paire sont dans des états conjugués temporels l'un l'autre. Les paramètres  $u_k$  et  $v_k$  doivent être déterminés par méthode variationnelle afin de minimiser l'énergie de l'état BCS. De plus on impose une condition de normalisation

$$\langle \Psi_{\text{BCS}} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = \prod_{k>0} (u_k^2 + v_k^2) = 1 \quad (2.101)$$

Ce qui revient à imposer

$$u^2 + v^2 = 1 \quad (2.102)$$

Cette description permet de traduire la formation de paires de Cooper dans les états du noyau les plus proches de la surface de Fermi. Toutefois (2.100) correspond à une superposition cohérente de d'états quantiques appariés.

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = |0\rangle + \sum_{k>0} \frac{v_k}{u_k} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger |0\rangle + \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \frac{v_k v_{k'}}{u_k u_{k'}} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger c_{k'}^\dagger c_{-k'}^\dagger + \dots \quad (2.103)$$

Ce qui revient à dire qu'il ne s'agit pas d'une fonction d'onde avec un nombre de paires bien définies, mais d'une superposition de différents états. La théorie BCS ne

---

3. Des initiales de ses concepteurs Bardeen, Cooper et Schrieffer

conserve donc pas le nombre de particules du système. Plus fondamentalement, le fait que la valeur moyenne de l'opérateur création de paires  $\langle c_k^\dagger c_k^\dagger \rangle$  prenne une valeur non nulle dans son état fondamental. Cela traduit la présence d'un ordre-diagonal à longue distance. L'existence de cet ordre s'explique par la brisure d'une symétrie de jauge U(1). Au sens de la théorie de Ginzburg-Landau on réalise une brisure de symétrie spontanée du système énergétiquement favorisée pour les noyaux à couches ouvertes. L'opérateur de Casimir associé à cette symétrie correspond à l'opérateur nombre de particules. Après cette brisure spontanée le système ne possède plus de nombre de particules correctement défini. On peut quantifier cette brisure de symétrie en calculant la variance du nombre de particules dans l'état BCS.

$$\langle \Psi_{\text{BCS}} | \hat{N}^2 | \Psi_{\text{BCS}} \rangle - N^2 = 4 \sum_{k>0} u_k^2 v_k^2 \quad (2.104)$$

Où  $N$  est la valeur moyenne de l'opérateur nombre de particules

$$N = \langle \Psi_{\text{BCS}} | \hat{N} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2 \quad (2.105)$$

Cette non-conservation du nombre de particules nécessite de rajouter une contrainte lors de la recherche variationnelle de l'énergie. On peut tenir compte de cette contrainte en ajoutant un multiplicateur de Lagrange  $\mu$  modifiant le Hamiltonien de départ pour garantir en moyenne la conservation du nombre de particules.

$$\hat{H}' = \hat{H} - \mu N \quad (2.106)$$

Ce multiplicateur de Lagrange correspond au potentiel chimique du système, au sens où il quantifie la variation de l'énergie du système lorsque l'on change le nombre de particules. Toutefois l'utilisation de l'ansatz BCS engendre des pathologies pour certains noyaux. En effet, à interaction d'appariement fixée, pour des noyaux proches des *drip-lines* où la surface de Fermi est très proche des états du continuum les énergies de séparation des neutrons sont de l'ordre de grandeur des gaps d'appariement. Les paires de Cooper issues de (2.100) peuvent ainsi diffuser sur les états du continuum ce qui augmente artificiellement l'intensité des corrélations d'appariements. Ces paires peuvent ainsi former un gaz de neutrons non physique augmentant artificiellement le rayon neutronique du noyau. En conséquence l'approximation BCS ne fait sens que pour des noyaux suffisamment éloignés des *drip-lines* ce qui sera le cas des noyaux étudiés dans le cadre de cette étude. Une approche plus universelle et élégante, permet de traiter sur un pied d'égalité corrélations du bulk et corrélations d'appariement, c'est le formalisme de Bogolioubov.

#### 2.4.4 Formalisme de Bogolioubov

A contrario de l'ansatz BCS, l'approche de Bogolioubov modifie la structure de l'état de référence Hartree  $|\Phi_0\rangle$  pour passer d'un déterminant de Slater, à une forme plus générale. Les degrés de liberté du système ne sont plus des fermions indépendants habillés par les effets du milieu, mais des quasi-particules décrite par les opérateurs à un corps  $\{\beta_i, \beta_i^\dagger\}$  définis directement par les opérateurs définissant l'état de Hartree pur  $\{b_i, b_i^\dagger\}$ ; on qualifiera la base formée par ces opérateurs, de base canonique ou de Hartree. On passe d'un jeu d'opérateur à l'autre par transformation unitaire définie comme

$$\beta_i = \sum_j U_{ij}^* b_j + V_{ji}^* b_j^\dagger \quad (2.107)$$

On peut écrire cette transformation sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.108)$$

Les opérateurs de quasi-particules satisfont également les relations d'anti-commutations

$$\{\beta_i, \beta_j\} = \{\beta_i^\dagger, \beta_j^\dagger\} = 0, \{\beta_i, \beta_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (2.109)$$

L'état de référence de notre théorie, est construit comme état produit des opérateurs de quasi particules

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{i>0} \beta_i |0\rangle \quad (2.110)$$

On définit également l'état du vide associé à ces opérateurs

$$\beta_i |\Phi_0\rangle = 0, \forall i \quad (2.111)$$

Le nouvel état de référence (2.110) ne conserve pas le nombre de particules, ce qui traduit la brisure de symétrie de jauge associée.

$$\hat{N} |\Phi_0\rangle \neq N |\Phi_0\rangle \quad (2.112)$$

Il est important de noter que cette transformation admet une décomposition de Bloch-Messiah-Zumino introduisant une base intermédiaire ( décomposition illustrée en figure 2.15).

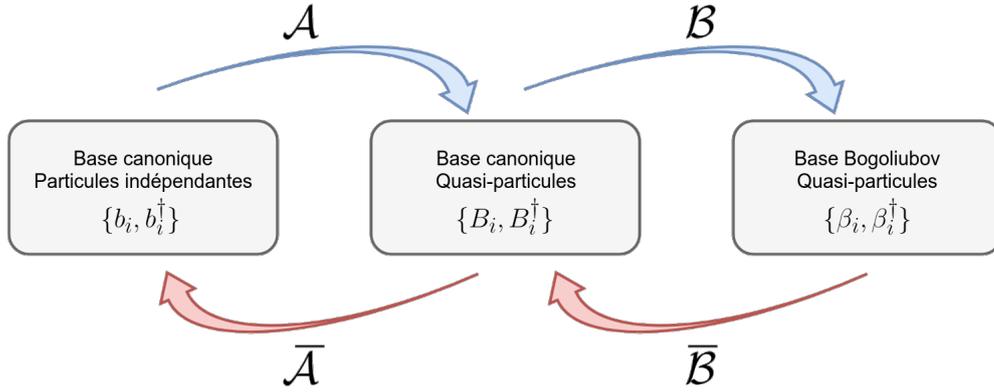


FIGURE 2.15 – Représentation des bases intervenant dans la décomposition de Bloch-Messiah-Zumino de la transformation de Bogoliubov

Formellement la transformation peut matricielle-ment s'exprimer

$$\begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} D^\dagger & 0 \\ 0 & D^T \end{pmatrix}}_{\mathcal{B}} \begin{pmatrix} \bar{U}^\dagger & \bar{V}^\dagger \\ \bar{V}^T & \bar{U}^T \end{pmatrix} \overbrace{\begin{pmatrix} C^\dagger & 0 \\ 0 & C^T \end{pmatrix}}^{\mathcal{A}} \quad (2.113)$$

Cette transformation permet d'exprimer l'état de référence (2.110) dans la base canonique sous la forme

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_i^\dagger) |0\rangle \quad (2.114)$$

Avec

- $u_i = \bar{U}_{ii}^* = \bar{U}_{ii}^*$
- $v_i = \bar{V}_{ii}^* = -\bar{V}_{ii}^*$

Vérifiant la condition de normalisation  $u_i^2 + v_i^2 = 1$ . Cette forme, exprimée dans la base canonique est analogue à l'ansatz BCS. Se ramener à cette base permettra d'effectuer une réduction de la théorie de Bogolioubov au formalisme BCS. Le contenu physique du système à A-nucléons est cette fois contenu dans deux objets distincts. D'une part la densité à 1-corps, identique à celle de la théorie de Hartree exposée précédemment

$$\rho_{ij} = \frac{\langle \Phi_0 | b_j^\dagger b_i | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} = \rho_{ji}^* \quad (2.115)$$

Mais également le tenseur d'appariement (ou densité anormale)

$$\kappa_{ij} = \frac{\langle \Phi_0 | b_j b_i | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} = -\kappa_{ji} \quad (2.116)$$

Ce tenseur est l'objet fondamental permettant de quantifier la brisure de la symétrie de jauge. Dans le langage des transitions de phase, on peut voir  $|\kappa|$  comme le paramètre d'ordre quantifiant le passage d'une phase classique ( $|\kappa|=0$ ) à une phase superfluide ( $|\kappa| \neq 0$ ). Ces deux grandeurs peuvent s'exprimer comme fonction des paramètres de la transformation de Bogolioubov (2.108)

- $\rho_{ij} = \sum_k V_{ik}^* V_{kj}^T$
- $\kappa_{ij} = \sum_k V_{ik}^* U_{kj}^T$

L'introduction de cette transformation entraîne la perte de l'idempotence de  $\rho$ , on introduit une nouvelle grandeur qui encode toute l'information contenue dans l'état  $|\Phi\rangle$ , la matrice densité généralisée de Valatin.

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \quad (2.117)$$

Cette matrice densité, idempotente cette-fois ( $\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}$ ), est l'objet central d'une théorie de champ moyen où l'on réalise une brisure spontanée d'une symétrie de jauge. La nouvelle énergie fonctionnelle de la densité de notre modèle

$$\mathcal{E}^{\text{RHB}} \equiv \mathcal{E}^{\text{RHB}}[\mathcal{R}, \phi_m] \quad (2.118)$$

En imposant d'une part l'idempotence et la conservation du nombre de particule moyen on peut réécrire la variation de l'énergie fonctionnelle de la densité généralisée.

$$\delta \left[ \mathcal{E}^{\text{RHB}}[\mathcal{R}] - \mu N - \text{Tr} \{ \Lambda (\mathcal{R}^2 - \mathcal{R}) \} \right] = 0 \quad (2.119)$$

Principe permettant d'aboutir aux nouvelles équations de champ moyen pour la densité et les champs mésoniques

$$[\mathcal{H}, \mathcal{R}] = 0 \quad (2.120)$$

$$\left( -\Delta + m_{\phi_m}^2 \right) \phi_m(r) = s_{\phi_m}(r) \quad (2.121)$$

Où l'Hamiltonien de Hartree-Bogolioubov s'écrit

$$\mathcal{H} = \frac{\delta \mathcal{E}^{\text{RHB}}[\mathcal{R}]}{\delta \mathcal{R}} \quad (2.122)$$

L'équation RHB (**R**elativistic **H**artree **B**ogoliubov) (2.120) peut s'exprimer en termes matriciels

$$\mathcal{H} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}_i = E_i \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}_i \quad (2.123)$$

Où  $h$  est le champ de Dirac auto-cohérent représentant au pseudo-hamiltonien de Hartree (2.85)

$$h = \frac{\delta \mathcal{E}^{\text{RHB}}[\mathcal{R}]}{\delta \rho} \quad (2.124)$$

Ce champ relativiste comprend les contributions cinétiques et de Hartree ainsi que la contribution du milieu, prise en compte de part sa dépendance en densité. Le champ d'appariement (ou champ de Bogolioubov) s'écrit

$$\Delta = \frac{\delta \mathcal{E}^{\text{RHB}}[\mathcal{R}]}{\delta \kappa} \quad (2.125)$$

Terme qui tient compte des corrélations particules-particules responsables de l'appariement dans le noyau. A ce stade le champ d'appariement est considéré comme relativiste au sens où il possède une structure de Lorentz non-triviale

$$\Delta = \begin{pmatrix} \Delta_{++} & \Delta_{+-} \\ \Delta_{-+} & \Delta_{--} \end{pmatrix} \quad (2.126)$$

Les indices + et - désignent respectivement la grande et petite composante d'un 4-spineur de Dirac. Pour une interaction d'appariement donnée  $\mathcal{V}^{\text{pair}}$  on peut calculer le champs  $\Delta$

$$\Delta_{ab}(r, r') = \frac{1}{2} \sum_{cd} \mathcal{V}_{abcd}^{\text{pair}}(r, r') \kappa_{dc}(r, r') \quad (2.127)$$

Où les indices  $\{a, b, c, d\}$  réfèrent aux indices spinoriels. L'étude de la structure relativiste de l'appariement [SR02] permet d'évaluer les différentes contributions de Lorentz au champs d'appariement (2.126). Il apparaît que les termes  $\Delta_{+-}$  et  $\Delta_{-+}$  sont plut petits (d'environ un ordre de grandeur) que  $\Delta_{++}$ . D'autre part le terme  $\Delta_{--}$  ne se couple que très faiblement avec les états proches de la surface de Fermi. En conséquence de quoi  $\Delta_{--}$  n'a que très peu d'influence sur l'appariement du système. Aussi on considérera par la suite que le champ de Bogolioubov comme un objet purement classique. Dans les faits on utilisera une force d'appariement de Gogny non-relativiste [GLELR96], de portée finie afin de ne pas générer de divergence ultra-violette, pouvant s'exprimer sous la forme

$$\mathcal{V}^{\text{Pair}}(r_1, r_2) = \sum_{i=1,2} e^{\left(\frac{r_1 - r_2}{\mu_i}\right)^2} [W_i + B_i P^\sigma - H_i P^\tau - M_i P^\sigma P^\tau] \quad (2.128)$$

Le Hamiltonien d'appariement associé peut s'écrire

$$H_{\text{Pair}} = \sum_{i,i'} \mathcal{V}_{i,i'}^{\text{Pair}} a_i^\dagger a_{i'}^\dagger a_i' a_i \quad (2.129)$$

On construit ainsi un modèle relativiste hybride. Pour l'interaction dans le canal particules-trous le traitement est totalement relativiste, pour le canal particules-particules on utilise l'interaction classique (2.128) ajustée sur les données. On peut valider ce modèle en comparant les énergies de séparation à deux neutrons pour des isotopes de l'étain dans le cadre d'une approche totalement relativiste, d'une approche hybride comparée au données expérimentales (Figure 2.16).

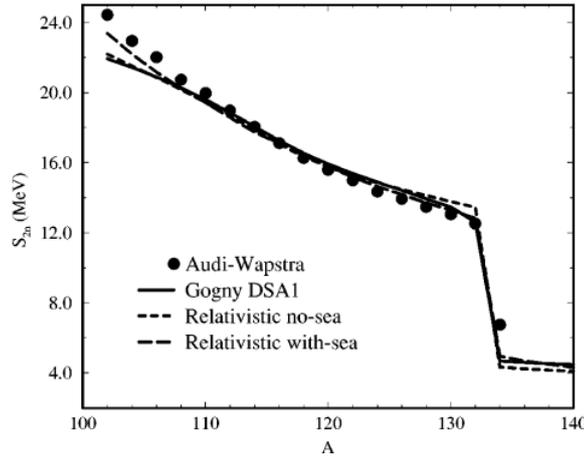


FIGURE 2.16 – Énergies de séparation à deux neutrons pour des isotopes de l'étain. Les lignes brisées représentent l'interaction relativiste pure, les traits pleins l'approche hybride ; les points correspondent aux données expérimentales. Figure issue de [SR02]

L'approche RHB permet l'obtention de très bons résultats pour la prise en compte de l'appariement de manière universelle. Néanmoins il faut garder à l'esprit que cette méthode à l'instar de la méthode BCS ne permet qu'une approximation de l'état fondamental du système. En effet cet état n'est plus état propre de l'opérateur nombre, malgré la correction apportée par la contrainte sur le nombre moyen de particules. Pour une description plus complète de l'effet de ces corrélations il est impératif de restaurer la symétrie brisée, c'est l'objet de la section suivante.

### Approche perturbative

Mentionnons de nouveau brièvement ici la possibilité de repartir d'un Hamiltonien vrai, de le développer en perturbation mais au lieu de développer notre théorie sur une base Hartree-Fock, on peut appliquer les transformations de Bogolioubov de manière à prendre en compte les corrélations d'appariement dans un cadre perturbatif. Les corrections se calculeront dans le cadre du formalisme BMBPT (*Bogolioubov Many Body Perturbation Theory*). Le programme ADG permet également le calcul des expressions et diagrammes dans ce cadre. On trouvera en Annexe @A définir un exemple de expressions de cette théorie.

#### 2.4.5 État BCS projeté

En restreignant notre étude aux noyaux éloignés des *drip-lines* on peut sans perte de généralité se concentrer sur la forme de l'ansatz BCS (2.100) quitte à s'y ramener dans le cadre du formalisme HFB par une transformation dans la base canonique (2.114). L'état de référence de notre théorie, n'est comme nous l'avons vu, pas un état propre de l'opérateur nombre de particules. Il s'agit d'un mélange de plusieurs états possédant chacun un nombre de nucléons bien définis. La contrainte variationnelle n'a pour effet que de favoriser la contribution de l'état possédant le bon nombre de particules. De fait une théorie présentant une brisure de symétrie ne saurait rendre complètement compte des corrélations. Spécifiquement pour une faible interaction d'appariement les modèles HFB où BCS prédirent des corrélations inexistantes. Il faut être à même de raffiner notre théorie en restaurant la symétrie brisée, ici on étudiera l'approche dite PBCS (*Projected BCS*). Considérons plus précisément la symétrie associée à la conservation du nombre de particules. Comme précisé plus

haut le nombre de nucléons  $N$  est associé à l'invariance de rotation sous la jauge  $U(1)$ . L'équation différentielle caractérisant ce groupe peut s'écrire

$$-i \frac{d|\Phi\rangle}{d\theta} = \hat{N} |\Phi\rangle \quad (2.130)$$

Où  $\theta$  désigne l'angle de jauge. Les solutions de (2.130) correspondent à des états dégénérés en énergie et brisant le nombre de particules (ce qui est par exemple le cas d'un vide de BCS ou de Bogolioubov)

$$|\Phi(\theta + \delta\theta)\rangle = \mathcal{R}(\delta\theta) |\Phi(\theta)\rangle \quad (2.131)$$

Où l'opérateur  $\mathcal{R}(\delta\theta) = e^{i\delta\theta\hat{N}}$  traduit une rotation de l'état dans l'espace de jauge. Par conséquent on peut, en utilisant cet opérateur, construire un état projeté, possédant le bon nombre de particules en intégrant sur l'angle de jauge.

$$|\Phi^N\rangle = \hat{P}_N |\Phi(\theta)\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\theta(\hat{N}-N)} |\Phi(\theta)\rangle \quad (2.132)$$

Dans ce cas le facteur  $e^{i\theta N}$  est un poids permettant d'annuler les contributions ne possédant pas le bon nombre de particules. Ainsi, on peut définir à partir d'une théorie brisant une symétrie une technique permettant la restauration systématique de cette symétrie. Cette restauration est illustrée en figure 2.17.

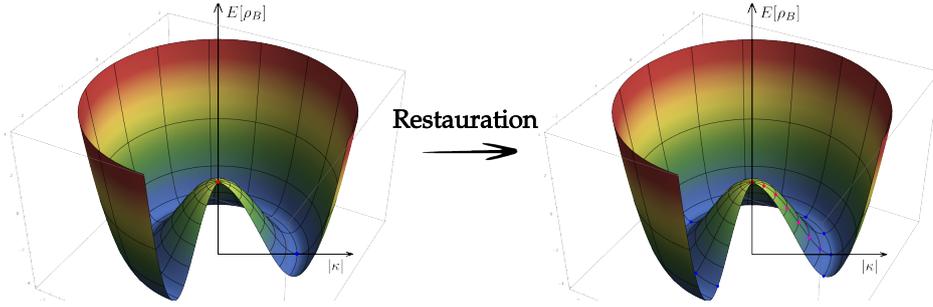


FIGURE 2.17 – Principe de la brisure et restauration d'une symétrie, dans le cas d'un potentiel en "chapeau mexicain". En rouge à droite l'état conservant la symétrie, les états en bleus correspondent aux modes de Goldstone, dégénérés en énergie et brisant la symétrie. A droite on illustre la somme sur l'ensemble des modes de Goldstone à même de restaurer cette symétrie.

Explicitement pour un état BCS dans un espace de Fock à N-corps on peut écrire l'état projeté

$$|\Phi^N\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\theta(\hat{N}-N)} \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_i^\dagger) |0\rangle \quad (2.133)$$

Par la suite on posera pour plus de concision  $x_i = \frac{v_i}{u_i}$ . On peut ré-exprimer (2.133) sous la forme

$$|\Phi^N\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-i\theta N} \sum_k \frac{1}{k!} e^{2i\theta k} \left( \sum_i x_i a_i^\dagger a_i^\dagger \right)^k |0\rangle \quad (2.134)$$

En utilisant la définition d'une distribution de Dirac.  $\int_0^{2\pi} e^{i(x-n)\theta} d\theta = 2\pi \delta_{x,n}$  on obtient

$$|\Phi^N\rangle = \frac{1}{N!} \left( \sum_i x_i a_i^\dagger a_i^\dagger \right)^N |0\rangle \quad (2.135)$$

En introduisant l'opérateur de création de paires corrélées défini par

$$\Gamma^\dagger = \sum_i x_i a_i^\dagger a_i^\dagger \quad (2.136)$$

Ici (2.135) forme un état collectif de paires condensées, cette forme à l'avantage de permettre une interprétation plus simple de cet état. L'état projeté s'exprime comme une somme de produits de créateurs  $a_i^\dagger$  et les poids  $x_i$  différents deux à deux. On peut passer d'un état à  $N - 1$  où  $N + 1$  en ajoutant ou retirant un jeu d'opérateur  $a_i^\dagger a_i^\dagger$ . En tant que superposition d'état cohérents, les opérateurs créations de paires  $P_i^\dagger = a_i^\dagger a_i^\dagger$  vérifient

$$(P_i^\dagger)^2 = 0 \quad (2.137)$$

En utilisant (2.137) on peut exhiber les propriétés de récurrence de l'état projeté ([Row01], [SB08])

$$|\Phi^N\rangle = |\Phi^N(i)\rangle + x_i \sqrt{N} P_i^\dagger |\Phi^{N-1}(i)\rangle \quad (2.138)$$

En utilisant ces propriétés on peut calculer la norme et les éléments de matrices du Hamiltonien d'appariement de l'état projeté. D'une part

$$\langle \Phi^N | \Phi^N \rangle = \frac{1}{M} \sum_i x_i^2 \langle \Phi^{N-1} | \Phi^{N-1} \rangle - \frac{1}{N} \sum_i x_i^3 \langle \Phi^{N-1} | P_i^\dagger | \Phi^{N-2} \rangle \quad (2.139)$$

Et d'autre part

$$\begin{aligned} \langle \Phi^N | P_i^\dagger P_j | \Phi^N \rangle &= x_i^2 x_j^2 \langle \Phi^{N-2} | P_j^\dagger P_i | \Phi^{N-2} \rangle + x_j \langle \Phi^N | P_i^\dagger | \Phi^{N-1} \rangle \\ &\quad - x_j^2 x_i \langle \Phi^{N-1} | P_j^\dagger | \Phi^{N-2} \rangle + \delta_{ij} x_i^4 \langle \Phi^{N-2} | 1 - N_i | \Phi^{N-2} \rangle \end{aligned} \quad (2.140)$$

Les seules inconnues à déterminer pour connaître totalement l'état projeté sont les  $x_i$ . Grâce aux relations de récurrences (2.140) et (2.139) on peut calculer l'énergie du système apparié

$$E_{\text{Pair}} = \frac{\langle \Phi^N | H_{\text{Pair}} | \Phi^N \rangle}{\langle \Phi^N | \Phi^N \rangle} \quad (2.141)$$

Il reste alors à minimiser cette énergie pour déterminer de manière variationnelle les coefficients de mélange de l'état PBCS. L'utilisation des méthodes de récurrence présente un gros avantage numérique et permet dans ce cadre de réaliser la restauration de symétrie au plus haut niveau de précision possible<sup>4</sup>. Cette méthode permet de prendre en compte les corrélations d'appariement, tout en conservant exactement le bon nombre de particules. Toutefois afin de pouvoir prendre en compte une gamme plus large de corrélations, utile pour décrire notamment la coexistence des appariement protons et neutrons mais surtout des corrélations de type quartet on peut présenter un autre ansatz dont la construction est une généralisation de la méthode PBCS présentée précédemment.

## 2.4.6 Corrélations de Quartets

Depuis longtemps [FV63] l'existence de corrélations à 4-corps dans l'état fondamental des noyaux  $N=Z$  est supposée. Un premier argument formel provient du fait que dans les méthodes de types BCS ou Bogolioubov on ne peut obtenir de coexistence entre appariement proton-proton ou neutron-neutron en même temps que l'appariement proton-neutron. La force nucléaire étant indépendante de la charge des particules l'appariement proton-neutron devrait être de la même intensité que les

4. On réalise de fait l'équivalent d'une VAP (Variation After Projection)

autres types de corrélations. Bien que le fait de négliger ces corrélations pour des noyaux lourds présentant un important excès de neutrons peut se justifier. En effet les neutrons et les protons les plus proches de la surface de Fermi occuperont dans ce cas des couches principales différentes les éléments de matrices d'une interaction proton-neutron seraient de très faible amplitude. Toutefois pour les noyaux légers et particulièrement pour les noyaux dont le nombre de protons est identique au nombre de neutrons ces approximations ne font plus sens. De plus l'interprétation de bandes rotationnelles dans les spectres expérimentaux de certains noyaux ( $^{12}\text{C}$ ,  $^{20}\text{Ne}$  ou  $^{24}\text{Mg}$ ) tend à indiquer la présence d'agrégats de particules alpha dans l'état fondamental. Ce phénomène de *clustering* sera largement étudié par la suite. La préformation au sein du noyau de clusters à 4 corps, incite fortement à l'étude de l'impact corrélations de quartets sur la structure nucléaire. Il existe plusieurs façon d'incorporer des corrélations de ce type, toutefois pour imposer la conservation du nombre de quartet, le plus simple est d'étendre le formalisme introduit à la section précédente. On part toujours d'une interaction d'appariement à deux-corps et l'on considère toutes les configurations de paires comme indiqué en Figure 2.18.

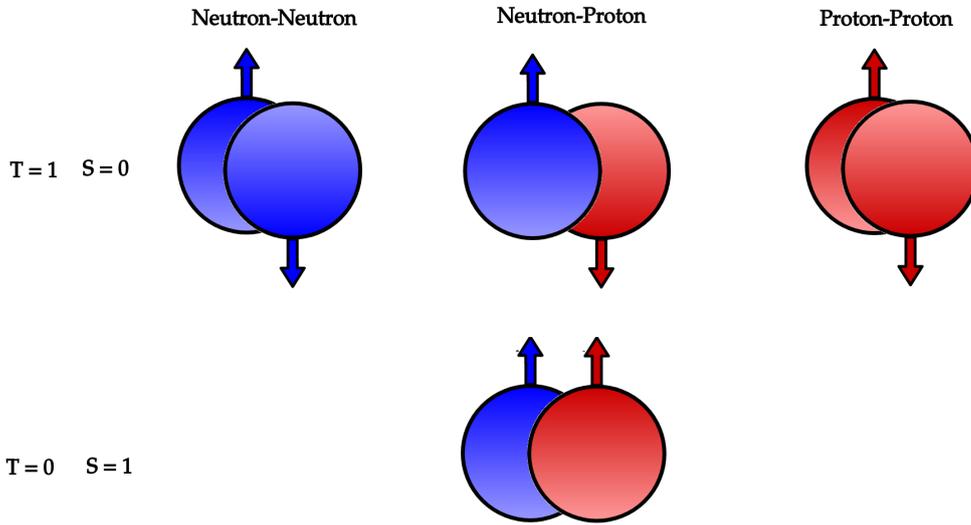


FIGURE 2.18 – Les différents agencements possibles pour les paires nucléoniques. T indique l'isospin total, et S le spin total.

Toutefois pour simplifier le problème on ne conserve que l'agencement vectoriel dans le canal d'isospin. Dans le cadre de cette approximation, on suppose le quartet de notre modèle est composé de paires de Cooper dont l'isospin total sera nul. Cette restriction se justifie a-posteriori par la faiblesse de la contribution des termes isoscalaire [SS16]. On généralise (2.129) pour le cas d'une interaction vectorielle dans le canal d'isospin où l'isospin est explicitée.

$$H_{\text{Pair}} = - \sum_{i,j,\tau} V_{ij} P_{i,\tau}^\dagger P_{j,\tau} \quad (2.142)$$

Où  $\tau$  est l'indice d'isospin valant 1 pour les paires de neutrons, -1 pour les paires de protons et 0 pour les paires neutron-proton. Les opérateurs créations de paires ont pour expressions

- Proton-Proton :  $P_{i,-1} = \pi_i^\dagger \pi_i^\dagger$
- Proton-Neutron :  $P_{i,0} = \frac{\nu_i^\dagger \pi_i^\dagger + \pi_i^\dagger \nu_i^\dagger}{\sqrt{2}}$

- Neutron-Neutron :  $P_{i,-1} = \nu_i^\dagger \nu_i^\dagger$

Où les jeux d'opérateurs  $\{\pi_i^\dagger, \nu_i^\dagger\}$  traduisent respectivement la création d'un proton et d'un neutron dans un état  $i$ .

A présent il faut construire un ansatz de l'état fondamental de (2.142). Tout d'abord on introduit un opérateur de quartet indépendant  $Q_{ij}^\dagger$  obtenu en couplant deux paires de Cooper d'isospin total  $T = 0$ .

$$Q_{ij}^\dagger = [P_i^\dagger P_j^\dagger]^{T=0} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( \underbrace{P_{i,1}^\dagger P_{j,-1}^\dagger}_{\text{Proton-Proton}} + \overbrace{P_{i,-1}^\dagger P_{j,1}^\dagger}^{\text{Neutron-Neutron}} - \underbrace{P_{0,1}^\dagger P_{0,-1}^\dagger}_{\text{Proton-Neutron}} \right) \quad (2.143)$$

En partant de cette expression on construit l'opérateur de quartet collectif

$$Q^\dagger = \sum_{i,j} x_{ij} Q_{ij}^\dagger \quad (2.144)$$

Où l'on somme sur tous les états construisant le cluster. On peut ainsi construire un état condensé<sup>5</sup> de quartets rendant compte des corrélations à 4-corps.

$$|\Phi_{\text{Quartet}}\rangle = (Q^\dagger)^{N_q} \quad (2.145)$$

Où  $N_q$  indique le nombre de quartet considéré pour la construction de l'état  $|\Phi_{\text{Quartet}}\rangle$ . Cet état possède par construction un nombre bien défini de nucléons  $N = Z = 2N_q$  et un isospin total  $T = 0$ . Dans ce schéma de construction un quartet est un objet corrélé dans l'isoespace et dans l'espace des moments angulaires. De prime abord il ne correspond pas à une structure bien-localisée spatialement comme l'est une particule  $\alpha$ , l'étude de la localisation spatiale des paires de Cooper et des quartets est l'objet du chapitre @RefQuandPret. Néanmoins dans l'état le problème est trop complexe pour être résolu numériquement, on peut simplifier (2.144) en supposant la séparabilité des amplitudes de mélange  $x_{ij} = x_i x_j$ . Dans le cadre de cette approximation l'opérateur de quartet peut s'écrire en termes d'opérateurs de paires de Cooper  $\Gamma_r^\dagger = \sum_i x_i P_{i,r}^\dagger$  identique à l'opérateur (2.136) de la théorie PBCS, où l'indice d'isospin est explicite.

$$A^\dagger = 2\Gamma_1^\dagger \Gamma_{-1}^\dagger - (\Gamma_0^\dagger)^2 \quad (2.146)$$

L'état fondamental (2.145) peut donc s'exprimer.

$$|\Phi_{\text{Quartet}}\rangle = (2\Gamma_1^\dagger \Gamma_1^\dagger - \Gamma_0^{\dagger 2})^{N_q} |0\rangle \quad (2.147)$$

On peut à l'aide du binôme de Newton développer l'état (2.147)

$$|\Phi_{\text{Quartet}}\rangle = \sum_k \binom{N_q}{k} (-1)^{N_q-k} 2^k (\Gamma_1^\dagger \Gamma_{-1}^\dagger)^k \Gamma_0^{\dagger 2(N_q-k)} \quad (2.148)$$

Dans cette dernière expression on peut identifier l'état BCS projeté introduit précédemment d'une part pour des paires de neutrons et paires de protons

$$|\Phi_{\text{PBCS}}\rangle^{NN/PP} = (\Gamma_1^\dagger \Gamma_{-1}^\dagger)^{N_q} |0\rangle \quad (2.149)$$

et d'autre part les paires neutron-proton

$$|\Phi_{\text{PBCS}}\rangle^{NP} = \Gamma_0^{2N_q} |0\rangle \quad (2.150)$$

5. Il s'agit ici d'un état collectif de quartets et non d'un pur condensat bosonique.

Le quartet que l'on considère est de fait une combinaison d'états BCS projetés dont le nombre respectif de paires est fixé par les coefficients du binôme. A nouveau pour déterminer totalement l'état quartet il faut déterminer les amplitudes de mélanges  $x_i$ . On les détermine à nouveau de manière variationnelle en minimisant la valeur moyenne de l'hamiltonien pris dans l'état quartet  $\langle \Phi_{\text{Quartet}} | H_{\text{Pair}} | \Phi_{\text{Quartet}} \rangle$  sous la contrainte  $\langle \Phi_{\text{Quartet}} | \Phi_{\text{Quartet}} \rangle = 1$ . Or l'état quartet étant une combinaison des fonctions PBCS introduites en section précédente, on peut exprimer ces valeurs moyennes par le biais de relations de récurrences analogues. Ces relations de récurrence sont détaillées en Annexe @Aintroduire. Cette méthode de prise en compte des corrélations à 4-corps de type quartet a l'avantage de présenter une certaine simplicité numérique mais peut surtout être étendue aisément afin de traiter aussi bien les noyaux sphériques, déformés axialement où encore présentant des déformations triaxiales comme nous le verrons ultérieurement.

### Implémentation pratique

Les approches de type BCS peuvent s'implémenter dans le cadre des méthodes de champ moyen relativiste. Initialement pour les noyaux à couche ouverte on commence la procédure de champ moyen pur, on en obtient les spectres en termes d'énergie de particules indépendantes. On sélectionne les états énergétiquement proches du niveau de Fermi, ces états définissent une fenêtre d'appariement dans laquelle les corrélations particules-particules s'appliqueront. Les bornes de cette fenêtre sont phénoménologique mais ce choix peut être motivé par l'ouverture naturelle d'un gap dans le spectre séparant naturellement les états sensibles à l'appariement des états plus bas en énergie. On résout les équations de type BCS sur ces états, ce qui nous permet d'obtenir un nouvel ensemble de nombres d'occupations  $v_i$ . Il existe trois niveaux de raffinements. pour la prise en compte de ces corrélations

1. On obtient des solutions ayant convergé en champ moyen puis on applique les méthodes BCS une unique fois.
2. On réalise quelques itérations en champ moyen pur, puis on injecte dans la routine de type BCS les niveaux d'énergie concernés. On obtient ainsi un nouveau jeu de nombre d'occupations, que l'on réinjecte au niveau du champ moyen. On répète alors cette procédure jusqu'à convergence totale des équations RMF+BCS
3. On réalise quelques itérations de champ moyen, on injecte les états concernés dans les routines BCS puis on résout de nouvelles équations de champ moyen auxquelles s'est rajouté un terme source  $[\mathcal{H}, \mathcal{R}] = G[\mathcal{R}]$  [RPPnAB16].

Dans le cadre de cette étude on se restreindra au deux premières approches, par la suite la seconde méthode sera désignée comme résolution totalement auto-cohérente.

## 2.5 Conclusions

Dans ce chapitre nous avons introduit les éléments de formalisme nécessaire au traitement du champ moyen. En particulier le traitement des corrélations de *bulk* as été présenté sous deux aspects, d'une part en utilisant un développement perturbatif en partant des solution Hartree-Fock d'un problème Hamiltonien (MBPT) décrivant une interaction nucléaire réaliste renormalisée. D'autre part en introduisant les méthodes EDF, sommant les corrélations au travers d'une dépendance phénoménologique en densité des constantes de couplage du Lagrangien. Par la suite on en déduit un pseudo-hamiltonien permettant d'obtenir des équations de type Hartree relativiste (RMF). Nous avons ensuite introduit des méthodes de traitement des corrélations de type particules-particules, tout d'abord en discutant des représentations

physiques des problèmes fermioniques en bosonique en exhibant des liens formels entre déterminants et permanents. Puis l'ansatz BCS a été présenté comme premier type de traitement de l'appariement nucléaire. Pour traiter plus finement le problème en considérant tous les états du noyau sur un pied d'égalité les transformations de Bogolioubov ont été exposées. Ces méthodes reposent sur le principe de brisure de la symétrie de jauge  $U(1)$ ; brisure matérialisée par la non-conservation du nombre de particules. Malgré l'efficacité de ces méthodes, des spuriétés inhérentes à cette brisure imposent de restaurer cette symétrie. Aussi nous avons présenté une méthode de projection d'états de type BCS (PBCS) permettant de remédier à ce problème en utilisant des relations de récurrences. Enfin une approche des corrélations à 4-corps a été proposée en considérant la présence de quartets dans le système. En guise de conclusion à ce chapitre l'ensemble des méthodes décrites sont présentées en Figure 2.19

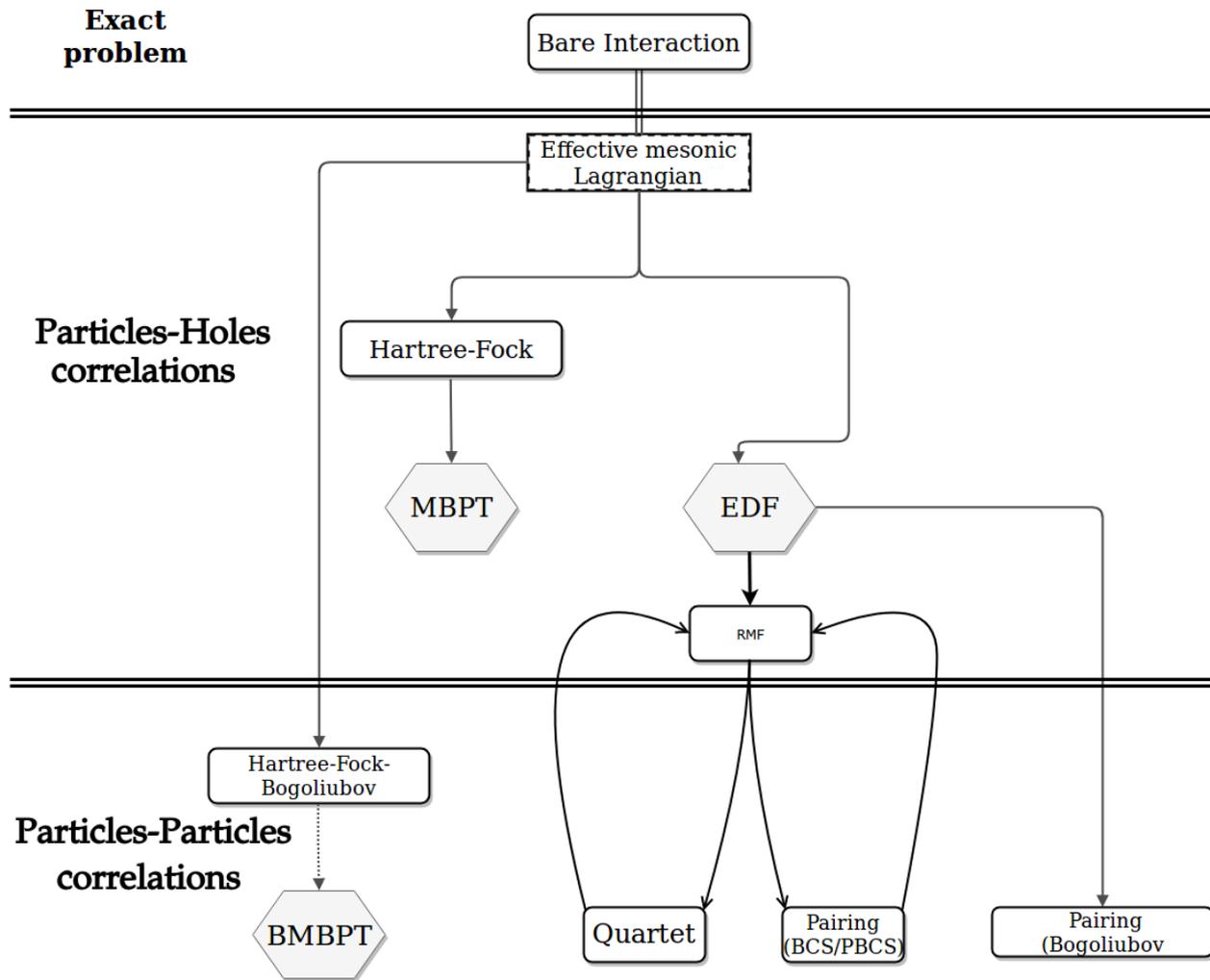


FIGURE 2.19 – Figure récapitulative des théories et modèles présentés dans ce chapitre. Les hexagones grisés indiquent un formalisme. Les indications le long des flèches les techniques employées.

## 2.6 Références

- [BMP58] 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.*, 110 :936–938, May 1958. [46](#)
- [BMVGM87] A. Bouyssy, J.-F. Mathiot, N. Van-Giai, and S. Marcos. Relativistic description of nuclear systems in the hartree-fock approximation. *Phys. Rev. C*, 36 :380–401, Jul 1987. [31](#)
- [EKPnAV11] J.-P. Ebran, E. Khan, D. Peña Arteaga, and D. Vretenar. Relativistic hartree-fock-bogoliubov model for deformed nuclei. *Phys. Rev. C*, 83 :064323, Jun 2011. [iv](#), [43](#)
- [FV63] B.H. Flowers and M. Vujičić. Charge-independent pairing correlations. *Nuclear Physics*, 49 :586 – 604, 1963. [57](#)
- [GLELR96] T. Gonzalez-Llarena, J.L. Egido, G.A. Lalazissis, and P. Ring. Relativistic hartree-bogoliubov calculations with finite range pairing forces. *Physics Letters B*, 379(1) :13 – 19, 1996. [54](#)
- [Gre11] Bruno Grenet. An Upper Bound for the Permanent versus Determinant Problem. Manuscript, 2011. [48](#)
- [HS83] C.J. Horowitz and Brian D. Serot. Properties of nuclear and neutron matter in a relativistic hartree-fock theory. *Nuclear Physics A*, 399(2) :529 – 562, 1983. [32](#)
- [Kar10] Felix Karbstein. Integrating out the dirac sea in the walecka model. *Phys. Rev. C*, 81 :045206, Apr 2010. [iv](#), [33](#)
- [Lin74] I Lindgren. The rayleigh-schrodinger perturbation and the linked-diagram theorem for a multi-configurational model space. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 7(18) :2441, 1974. [35](#)
- [MP34] Chr. Møller and M. S. Plesset. Note on an approximation treatment for many-electron systems. *Phys. Rev.*, 46 :618–622, Oct 1934. [35](#)
- [PA13] Polya and G. Aufgabe. *Arch. Math. Phys.*, 20 :424, 1913. [48](#)
- [PG95] D. PERRET-GALLIX. Towards a complete feynman diagrams automatic computation system. *International Journal of Modern Physics C*, 06(04) :531–540, 1995. [37](#)
- [Row01] D.J. Rowe. Restoration of particle number as a good quantum number in bcs theory. *Nuclear Physics A*, 691(3) :691 – 709, 2001. [57](#)
- [RPPnAB16] C. Robin, N. Pillet, D. Peña Arteaga, and J.-F. Berger. Description of nuclear systems with a self-consistent configuration-mixing approach : Theory, algorithm, and application to the  $^{12}\text{C}$  test nucleus. *Phys. Rev. C*, 93 :024302, Feb 2016. [60](#)
- [SB08] N. Sandulescu and G. F. Bertsch. Accuracy of bcs-based approximations for pairing in small fermi systems. *Phys. Rev. C*, 78 :064318, Dec 2008. [57](#)
- [SB09] I Shavitt and R Bartlett. *Many Body Methods in Chemistry and Physics*. Cambridge Press, 2009. [36](#), [40](#)
- [SR02] M. Serra and P. Ring. Relativistic hartree-bogoliubov theory for finite nuclei. *Phys. Rev. C*, 65 :064324, Jun 2002. [v](#), [54](#), [55](#)

- [SS16] M. Sambataro and N. Sandulescu. Isoscalar-isovector proton-neutron pairing and quartet condensation in  $n = z$  nuclei. *Phys. Rev. C*, 93 :054320, May 2016. [58](#)
- [STE03] P. STEVENSON. Automatic generation of vacuum amplitude many-body perturbation series. *International Journal of Modern Physics C*, 14(08) :1135–1141, 2003. [37](#)
- [Tob57] W. Tobocman. Many-body perturbation theory. *Phys. Rev.*, 107 :203–208, Jul 1957. [35](#)



## Chapitre 3

# Symétries brisées, phénomènes émergents et agrégation nucléaire

*« The description of right lines and circles, upon which geometry is founded, belongs to mechanics. Geometry does not teach us to draw these lines, but requires them to be drawn. »*

Isaac Newton

### Sommaire

<b>3.1</b>	<b>Symétrie spatiales</b>	<b>67</b>
3.1.1	Introduction et définitions	67
3.1.2	Symétries et spuriotés	71
3.1.3	Motivations expérimentales	73
3.1.4	Développement multipolaire	73
<b>3.2</b>	<b>Réalisation pratique</b>	<b>75</b>
3.2.1	Systèmes à symétrie axiale	75
	Réalisation formelle	75
	Schéma de résolution	77
	Optimisations numériques	78
	Résultats pour l'Uranium 234	79
3.2.2	Systèmes octupolaires	80
	Motivation	80
	Extension formelle	81
	Résultats pour le Radium 224	81
3.2.3	Systèmes triaxialement déformés	83
	Réalisation formelle	83
	Résultats pour le Platine 190	85
	Conclusions	88
<b>3.3</b>	<b>Champ-moyen sous contraintes multiples</b>	<b>88</b>
3.3.1	Problématique	88
3.3.2	Algorithmes bio-mimétiques	88
	Bio-mimétisme	89
3.3.3	Résultats	91
<b>3.4</b>	<b>Agrégation nucléaire</b>	<b>92</b>
3.4.1	Introduction	92
3.4.2	Champ-moyen relativiste et clusters	93

3.4.3	Mesure de localisation . . . . .	94
3.4.4	Origines de l'agrégation nucléaire . . . . .	98
	Dispersion spatiale . . . . .	99
	Influence de la déformation sur la dispersion . . . . .	101
<b>3.5</b>	<b>Transition de phases quantiques . . . . .</b>	<b>103</b>
3.5.1	D'une symétrie continue à une symétrie discrète . . . . .	103
3.5.2	Oxygène 16 : Résultats du champ-moyen . . . . .	105
3.5.3	Conclusions . . . . .	107
<b>3.6</b>	<b>Références . . . . .</b>	<b>108</b>

---

## 3.1 Symétrie spatiales

### 3.1.1 Introduction et définitions

L'un des concepts majeurs de la physique moderne réside dans la compréhension des symétries qui sous-tendent les comportements des objets physiques. La physique nucléaire ne fait pas figure d'exception et l'étude des symétries structurelles des noyaux et de l'interaction nucléon-nucléon est un outil incontournable pour affiner notre entendement du noyau. Le théorème de Noether, assure, qu'à toute transformation infinitésimale qui laisse invariante l'intégrale de l'action du système est associée une quantité qui se conserve, un invariant. Autrement dit si l'interaction du système reste inchangée sous certaines symétries il existera une quantité observable conservée par le système. Formellement, dans le cadre d'une description quantique, l'existence de cet invariant se traduit par la commutation de l'Hamiltonien de l'interaction nucléon-nucléon  $\hat{H}$ , avec l'opérateur  $\hat{O}$  associé à l'invariant considéré.

$$[\hat{H}, \hat{O}] = 0 \quad (3.1)$$

L'Hamiltonien exact décrivant l'interaction nucléaire nue, possède certaines symétries, issues de la structure des interactions fondamentales. Notamment, l'interaction reste invariante sous les translations, rotations, réflexion spatiale (parité), renversement du temps, rotation dans l'espace d'Isospin et enfin sous l'échange des deux nucléons ainsi que sous le groupe des transformations de Lorentz. Ces symétries laissent des traces observables expérimentalement, en particulier au niveau des spectres d'excitations des noyaux. Toutefois les symétries fondamentales de l'Hamiltonien exact ne sont pas nécessairement symétries du Hamiltonien de champ-moyen (Hartree-Fock). Pour préciser notre propos considérons une transformation représentée par un opérateur unitaire  $U$  vérifiant

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1 \quad (3.2)$$

Comme vu précédemment  $U$  est une symétrie du Hamiltonien vrai  $H$  si

$$[H, U] = 0 \quad (3.3)$$

On peut montrer dans ce cas que l'Hamiltonien de champ-moyen  $\tilde{h}$  vérifie la relation

$$U^{-1}\tilde{h}(\bar{\rho})U = h(\rho) \quad (3.4)$$

Avec  $\bar{\rho} = U\rho U^{-1}$ . Par conséquent une symétrie du Hamiltonien du départ ne reste une symétrie au niveau du champ-moyen si et seulement si la matrice densité vérifie  $\bar{\rho} = \rho$  ce qui revient à écrire

$$\bar{\rho} = U\rho U^{-1} = \rho \quad (3.5)$$

Comme au chapitre précédent la matrice densité est définie dans le cadre des théories Hartree-Fock comme un projecteur des états sur la mer de Fermi. On peut comprendre la condition (3.4) comme une traduction du fait que  $\rho$  commute avec  $U$  si la transformation  $U$  laisse la mer de Fermi invariante. La transformation en question transformerait un état  $|\lambda\rangle$  appartenant à la mer de Fermi en une superposition linéaire d'états appartenant tous à la mer de Fermi.

$$U|\lambda\rangle = \sum_{i \in \text{Fermi sea}} \langle i|\lambda|i\rangle |i\rangle \quad (3.6)$$

Ces symétries se manifestent expérimentalement par la présence de motifs caractéristiques, entre autres dans la structure de certains spectres observables. Toutefois comme brièvement esquissé au Chapitre 2, la différence entre le Hamiltonien

vrai et l'Hamiltonien approché constitue l'interaction résiduelle. Cette interaction induit plusieurs types de corrélations, celles d'appariement décrite au chapitre précédent mais également des modes d'excitations collectifs. Ces modes d'excitations peuvent s'interpréter comme des oscillations du champ-moyen. La prise en compte de ces oscillations impose d'aller au-delà d'une pure théorie Hartree-Fock décrivant un champ-moyen gelé. D'un point de vue phénoménologique la prise en compte de ces corrélations collectives est à l'origine de l'apparition de phénomènes émergents traduisant cette collectivité, principalement ici la déformation nucléaire. Différents modes collectifs peuvent être à l'origine de ces déformations, en particulier les modes vibrationnels et rotationnels.)

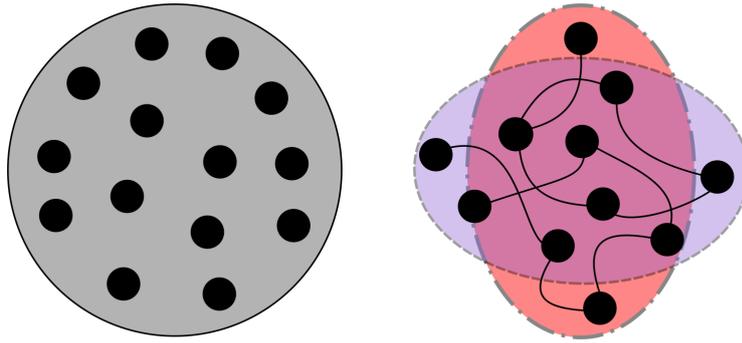


FIGURE 3.1 – Représentation schématique de l'effet des modes collectifs sur la forme du noyau, à gauche une configuration de champ-moyen figée, à droite l'interaction résiduelle engendre des déformations dites *prolate* (en rouge) et *oblate* (en bleu).

De nouveau la question primordiale est de savoir comment rendre compte des effets collectifs induits par l'interaction résiduelle. De même que pour les corrélations d'appariement il est possible d'inclure de manière systématique des sommes d'excitations particules-trous, toutefois ce traitement se heurte vite à l'augmentation combinatoire du nombre d'excitations et à cause aux contraintes numériques, encode difficilement la phénoménologie, particulièrement des noyaux les plus déformés. Heureusement il existe une autre réalisation possible permettant la prise en compte des déformations nucléaires, basée sur le concept de brisure de symétries. Le fait d'autoriser le système à briser spontanément certaines symétries permet de saisir des corrélations nucléoniques pour une augmentation relativement faible du coût numérique et sans modification formelle de notre théorie. Dans le cas où l'on brise la symétrie associée aux rotations spatiales, on capture les corrélations correspondantes à des superpositions d'excitations particules-trous de moments angulaires différents. Ces corrélations jouent, pour certains noyaux un rôle prépondérant non-seulement pour une description des états excités mais aussi pour décrire l'état fondamental. Dans les faits pour s'assurer de la conservation d'une symétrie ou a contrario pour autoriser la brisure de celle-ci, il faut analyser la structure précise des états nucléoniques. En toute généralité on peut développer un état  $|\lambda\rangle$  de la mer de Fermi sur une base d'états  $|nljm\tau\rangle$  avec  $n$  est le nombre quantique principal,  $l$  le nombre azimutal,  $j$  le moment angulaire total,  $m$  le nombre quantique magnétique et enfin  $\tau$  l'isospin.

$$|\lambda\rangle = \sum_{nljm\tau} C_{nljm\tau}^{\lambda} |nljm\tau\rangle \quad (3.7)$$

C'est à cet état que l'on applique différents jeu de contraintes afin d'imposer des symétries, certaines de ces contraintes seront relâchées pour permettre au système de

les briser.

1. Dans le cadre de systèmes auto-liés de taille finie, la mer de Fermi ne peut être laissée invariante par translation spatiale. En effet on peut aisément comprendre que si la densité était invariante par translation, la densité de matière devrait être uniformément distribuée dans tout l'espace. Cette brisure de symétrie forcée, engendre plusieurs spuriosités nécessitant l'introduction de corrections à l'énergie dites du centre de masse.
2. On veut également garantir le fait de pouvoir toujours distinguer les orbitales protons des orbitales neutrons, sans les mélanger. Cela revient à imposer l'invariance des états sous les rotations autour d'un axe (noté  $z$  dans ce cas) dans l'espace d'isospin. Pour ce faire il suffit de limiter le développement (3.7)

$$|\lambda, \tau_\lambda\rangle = \sum_{nljm} C_{nljm\tau}^{\lambda\tau_\lambda} |nljm\tau_\lambda\rangle \quad (3.8)$$

3. Pour que le système reste invariant sous l'inversion du sens du temps il faut que la mer de Fermi reste invariante sous l'action de l'opérateur  $\mathcal{T}$  agissant selon

$$\mathcal{T}|\lambda\rangle = \sum_{nljm\tau} (-1)^{j+l-m} (C_{nljm\tau}^\lambda)^* |nljm\tau\rangle \quad (3.9)$$

Cette invariance est assurée si le nombre de nucléons du noyau est pair. De plus dans notre cas le Hamiltonien commute avec la composante  $T_z$  de rotation d'isospin, l'invariance par renversement du temps n'est réalisée que pour les noyaux pairs-pairs.

4. Notre étude porte sur l'étude des propriétés statiques du noyau, aussi dans le cadre d'une théorie de champ-moyen indépendante du temps, les états sont laissés invariants par les translations temporelles, ce qui traduit la conservation de l'énergie du système.
5. On peut contraindre le système à l'invariance sous les transformations de parité, il suffit de limiter l'expansion de chacune des orbitales à des états de moment angulaire  $l$  pair (ou impairs). De fait (3.7) possédera une parité bien définie, restant invariant lors de l'application de l'opérateur parité.
6. Enfin on peut contraindre le système à respecter différentes-symétries vis-à-vis du groupe des rotations. On représente les symétries rotationnelles en introduisant les opérateurs de moments cinétiques  $J_x, J_y, J_z$ . Ces opérateurs sont les générateurs d'une algèbre de Lie, associée au groupe spécial unitaire SU(2). On peut à partir de ces opérateurs distinguer trois cas

- Les systèmes à symétries sphériques, dont le Hamiltonien commute avec les trois composantes du moment cinétique total  $\vec{J}$

$$[H, \vec{J}] = 0 \quad (3.10)$$

Cette symétrie peut être imposée en limitant le développement de (3.7)

$$|\lambda j_\lambda m_\lambda\rangle = \sum_{nl\tau} C_{nl\tau}^\lambda |nlj_\lambda m_\lambda \tau\rangle \quad (3.11)$$

On peut comprendre les conditions nécessaires à la conservation de cette symétrie en introduisant les opérateurs d'échelles  $J_\pm = J_x \pm iJ_y$  agissant sur (3.11)

$$J_\pm |\lambda j_\lambda m_\lambda\rangle = \sqrt{j_\lambda \mp m_\lambda} \sqrt{j_\lambda \pm m_\lambda + 1} |\lambda j_\lambda m_{\lambda \pm 1}\rangle \quad (3.12)$$

Aussi pour que les opérateurs  $J_{\pm}$  laissent invariants les états de la mer de Fermi, il faut et il suffit que chaque état caractérisé par un  $j_{\lambda}$  les  $2j_{\lambda}+1$  orbites de  $m_{\lambda}$  appartiennent tous à la mer de Fermi. Cette condition implique que les noyaux respectant exactement la symétrie sphérique sont ceux dont les couches majeures sont totalement occupées. Autrement dit il s'agit des noyaux à couches fermées.

- Les systèmes à symétries axiales, où le Hamiltonien ne commute qu'avec l'une des composantes du moment cinétique, par exemple  $J_z$ .

$$[H, J_z] = 0 \quad (3.13)$$

On peut contraindre cette symétrie en limitant le développement de (3.7) aux états de  $m_{\lambda}$  fixé

$$|\lambda m_{\lambda}\rangle = \sum_{nlj\tau} c_{nlj\tau}^{\lambda} |nljm_{\lambda}\tau\rangle \quad (3.14)$$

En effet les  $|\lambda m_{\lambda}\rangle$  sont états propres de l'opérateur  $J_z$  associée à la valeur propre  $m_{\lambda}$  et  $J_z$  laisse les états de la mer de Fermi invariants.

- Les systèmes triaxiaux, où l'on ne conserve qu'une symétrie symplectique du développement (3.7), ce qui revient à ne conserver qu'un seul plan de symétrie du noyau, permettant ainsi de décrire des formes très générales.

Néanmoins, si l'on est toujours à même de construire un Hamiltonien triaxial, axial ou sphérique les solutions obtenues ne représenteront pas forcément l'état d'équilibre du noyau. En effet un tel état peut être stationnaire, mais ne correspond pas nécessairement au minimum en énergie. Chacune des symétries dont l'on autorise la brisure, peut donc abaisser l'énergie du système, mais il ne suffit pas d'exhiber une telle solution il faut également prouver qu'elle représente un minimum en énergie pour décrire l'état fondamental du système.

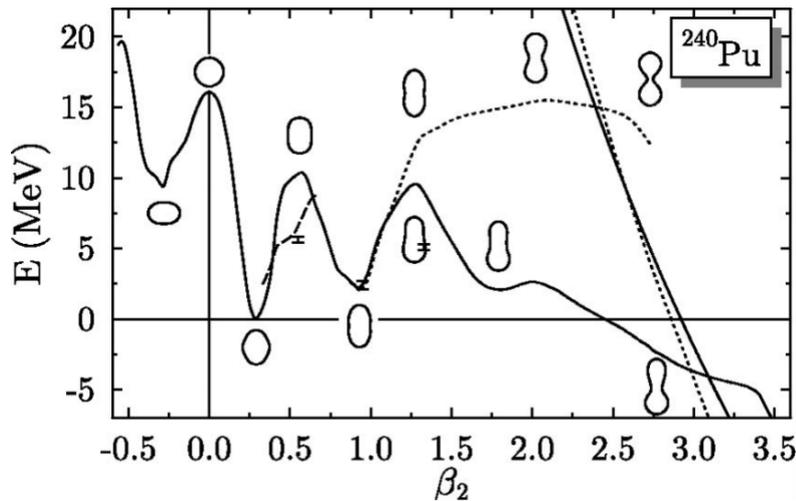


FIGURE 3.2 – Deux chemins de fission du  $^{240}\text{Pu}$ , en trait plein les solutions axiales, en pointillés les solutions triaxiales. Les solutions d'énergie minimale sont celles de symétrie axiale. Figure issue de [BHR03]

La présence de symétries dans le cadre de systèmes de taille finie n'est pas sans conséquence quand à la stabilité des solutions aux équations de champ-moyen, comme nous allons le voir en section suivante.

### 3.1.2 Symétries et spuriosités

Dans le précédent chapitre, nous avons dérivé les équations Hartree-Fock reposant sur un principe variationnel permettant de garantir le caractère stationnaire de l'énergie, vis-à-vis de variations infinitésimales de densité. Faut-il encore pouvoir déterminer les conditions garantissant la minimisation de l'énergie. Partons d'un déterminant de Slater  $|\Phi_0\rangle$  associé à une matrice densité  $\rho^{(0)}$  et considérons une symétrie continue de l'Hamiltonien initial brisée par le Hamiltonien de Hartree. Il est important de noter que cette section est valide aussi bien dans le cadre d'une approche Hartree-Fock que dans le cadre des transformations de Bogolioubov, la matrice densité généralisée de Valatin  $\mathcal{R}$  vient dans ce cas se substituer à la matrice densité usuelle  $\rho$ . Toute transformation continue, en particulier une symétrie, peut être représentée par un opérateur unitaire  $U_T = e^{i\theta S}$  où  $\theta$  est un paramètre réel et  $S$  une matrice hermitienne. Par exemple dans le cas d'une rotation autour d'un axe  $k$ , cette rotation s'écrirait  $E^{i\theta J_k}$  où  $\theta$  serait l'angle de la rotation. L'effet de cette transformation sur la matrice densité initiale s'exprime

$$\rho_t = e^{i\theta S} \rho^{(0)} e^{-i\theta S} \quad (3.15)$$

En utilisant la formule de Baker-Campbell-Hausdorff cette transformation peut s'exprimer comme un développement polynomial en  $\theta$

$$\begin{aligned} \rho_t = & \rho^{(0)} + i\theta[S, \rho_0] - \frac{\theta^2}{2} [S, [S, \rho_0]] + o(\theta^2) \\ & \rho^{(0)} + \rho^{(1)} + \rho^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (3.16)$$

Les termes  $\rho^{(1)}$  et  $\rho^{(2)}$  correspondent respectivement aux variations de densité à l'ordre 1 et 2 induits par la transformation. Dans la base où  $\rho^{(0)}$  est diagonale les matrices  $\rho^{(1)}$  et  $\rho^{(2)}$  peuvent s'exprimer aisément en distinguant les états de type particules à l'extérieur de la mer de Fermi, que l'on notera  $p, p'$  et les états trous au sein de la mer de Fermi notés  $h, h'$ . Dans ce cadre la matrice  $\rho^{(0)}$  s'exprime

$$\rho_{hh'}^{(0)} = \delta_{hh'} \quad \rho_{pp'}^{(0)} = \rho_{ph}^{(0)} = 0 \quad (3.17)$$

Les variations de la densité aux ordres 1 et 2 peuvent s'exprimer en utilisant les relations (3.16)

$$\begin{aligned} \rho_{ph}^{(1)} &= iS_{ph} & \rho_{hp}^{(1)} &= -iS_{ph} & \rho_{hh'}^{(1)} &= \rho_{pp'}^{(1)} = 0 \\ \rho_{ph}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left[ \sum_{p'} S_{pp'} S_{p'h} - \sum_{h'} S_{ph'} S_{h'h} \right] \\ \rho_{hp}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left[ \sum_{p'} S_{hp'} S_{p'p} - \sum_{h'} S_{hh'} S_{h'p} \right] \\ \rho_{pp'}^{(2)} &= \sum_h \rho_{ph}^{(1)} r h o_{hp}^{(1)} \\ \rho_{hh'}^{(2)} &= - \sum_p \rho_{hp}^{(1)} \rho_{ph}^{(1)} \end{aligned} \quad (3.18)$$

En se limitant au premier ordre en  $\theta$ , on peut exprimer l'énergie du système en tant que fonctionnelle de la densité

$$\mathcal{E}_{ij}(\rho_t) = \mathcal{E}_{ij}(\rho^{(0)} + \rho^{(1)}) \quad (3.19)$$

Comme vu au chapitre précédent le hamiltonien Hartree-Fock à 1-corps est défini comme  $h_{ij}^{(0)} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho_{ij}}|_{\rho^{(0)}}$  et est diagonal dans la base qui diagonalise  $\rho^{(0)}$  et s'exprime

$$h_{pp'}^{(0)} = \epsilon_p \delta_{pp'} \quad h_{hh'}^{(0)} = \epsilon_h \delta_{hh'} \quad h_{ph}^{(0)} = h_{hp}^{(0)} = 0 \quad (3.20)$$

De même la partie interaction à deux corps s'exprime

$$\mathcal{V}_{ij,kl} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho_{ij} \rho_{kl}} \quad (3.21)$$

On peut ainsi réexprimer (3.19) en fonction de (3.20) et (3.21).

$$\mathcal{E}_{ij}(\rho_t) = h_{ij}(\rho^{(0)}) + \sum_{kl} \mathcal{V}_{ij,kl} \rho_{kl}^{(1)} \quad (3.22)$$

Or comme  $\rho^{(0)}$  est solution d'équations de champ-moyen la matrice densité satisfait la relation de commutation

$$[h(\rho^{(0)}), \rho^{(0)}] = 0 \quad (3.23)$$

Or pour une symétrie  $S$  du Hamiltonien on peut écrire

$$h(\rho) = e^{i\theta S} h(\rho^{(0)}) e^{-i\theta S} \quad (3.24)$$

Et comme  $\rho_t = e^{i\theta S} \rho^{(0)} e^{-i\theta S}$  alors  $\rho_t$  satisfait également une relation de commutation

$$[h(\rho_t), \rho_t] = e^{i\theta S} [h(\rho^{(0)}), \rho^{(0)}] e^{-i\theta S} = 0 \quad (3.25)$$

Cette dernière equation devient

$$[h(\rho^{(0)}), \rho^{(1)}]_{ij} + \sum_{kl} \mathcal{V}_{ij,kl} \rho_{kl}^{(1)} = 0 \quad (3.26)$$

En introduisant le vecteur

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} \rho_{ph}^{(1)} \\ \rho_{hp}^{(1)} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

Et la Hessienne de la densité  $M$

$$M = \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \rho \partial \rho} = \begin{pmatrix} A_{ph,p'h'} & B_{ph,p'h'} \\ B_{ph,p'h'}^* & A_{ph,p'h'}^* \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

Dont les éléments  $A$  et  $B$  s'expriment

$$\begin{aligned} A_{ph,p'h'} &= \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \rho_{hp} \rho_{p'h'}} = \delta_{pp'} \delta_{hh'} (\epsilon_p - \epsilon_h) + \mathcal{V}_{ph,p'h'} \\ B_{ph,p'h'} &= \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \rho_{hp} \rho_{h'p'}} = \mathcal{V}_{ph,h'p'} \end{aligned} \quad (3.29)$$

On peut réécrire l'équation (3.26) matriciellement :

$$MK = 0 \quad (3.30)$$

Cette équation implique, que pour chaque symétrie brisée par l'Hamiltonien Hartree-Fock, la Hessienne de la densité  $M$  possède une valeur propre nulle. Ce théorème à deux types de conséquences importantes, dans le cadre de la matière infinie cette valeur propre correspond à un mode de Goldstone. Dans notre cas de système de taille finie cette valeur propre correspond à un état spurieux. En particulier quand la densité  $\rho_t \neq \rho^{(0)}$  une symétrie continue du Hamiltonien génère l'apparition d'une infinité de dégénérescence des solutions des équations de champ-moyen. Ces dégénérescences représentés en Figure 3.3 sont d'un comportement collectif, comme par exemple une déformation spatiale du noyau. C'est précisément ce comportement collectif que nous nous proposons d'étudier dans les sections à venir.

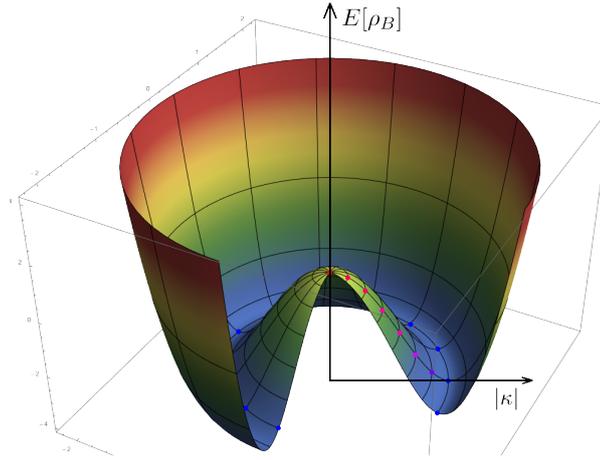


FIGURE 3.3 – Représentation des dégénérescences (points bleus) associés à une symétrie continue du Hamiltonien.

### 3.1.3 Motivations expérimentales

Au delà des motivations formelles d'une description de la déformation ou plus généralement des brisures de symétries des observations expérimentales attestent de la déformation des noyaux. L'exemple le plus frappant est la présence de bandes rotationnelles [BBH<sup>+</sup>87] dans les spectres de certains noyaux. Ces structures particulières traduisent le comportement des noyaux lorsqu'il est soumis aux rotations, un noyau déformé ne se comportant pas de la même manière qu'un noyau sphérique. De même la mesure des transitions électromagnétiques des états excités permet une mesure du comportement collectif et des déformations du système [SLW17] [PBM<sup>+</sup>18]. Il est donc fondamental pour un modèle théorique de pouvoir formellement prendre en compte les déformations spatiales des noyaux.

### 3.1.4 Développement multipolaire

Il est important de noter qu'à chaque fois que l'on parlera de déformations on se placera implicitement dans le référentiel intrinsèque du noyau, les noyaux étant sphériques dans le référentiel du laboratoire. Dans cette section, nous introduirons les outils et quantités nécessaires pour quantifier les déformations nucléaires. Le principe de ces quantités est d'évaluer l'écart entre un système sphérique et le système déformé, le rayon notamment, n'est plus une simple constante mais devient une fonction des coordonnées. Cette fonction peut être développée en série polynomiale les termes de cette série étant classés par ordre croissant présentant ainsi des termes linéaires, quadratiques et ainsi de suite, c'est le principe d'un développement multipolaire. Toutefois deux contraintes doivent être imposées pour rendre compte des particularités du noyau, d'abord les noyaux atomiques étant incompressible, le volume total doit donc être conservé. De plus toutes transformations traduisant une translation du centre du masse de la distribution sans changement de la répartition de matière est spurieuse et ne correspond pas à une réalité observable. On peut introduire des opérateurs déformation  $Q_{\lambda\mu}$ , traduisant la non-isotropie du noyau et les développer sur une base d'harmoniques sphériques. On peut schématiquement représenter les effets de certains de ces opérateurs, utiles dans le cadre de cette étude, sur les densités de matières.

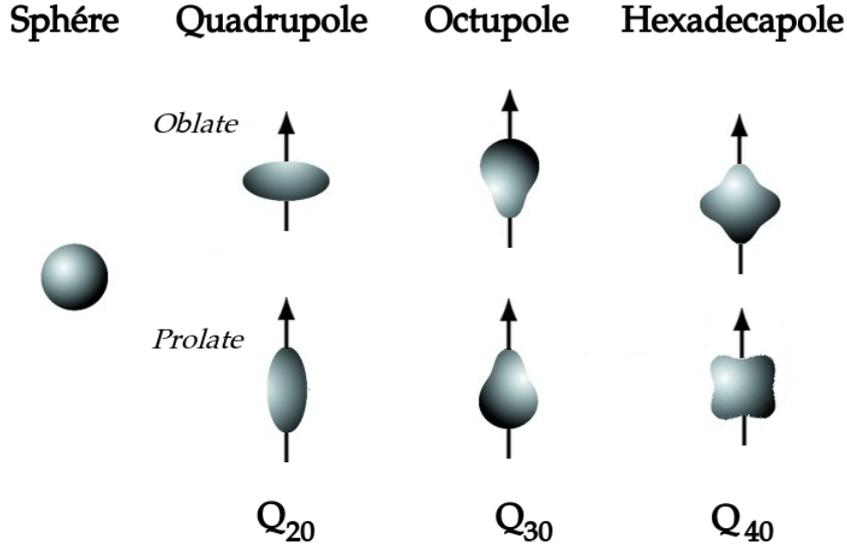


FIGURE 3.4 – Exemples d’action d’opérateurs multipolaires sur la distribution de matière au sein du noyau, les codes axiaux permettent d’obtenir des déformations quadrupolaires, les codes brisant la parité permettent d’obtenir en plus des déformations octupolaires et enfin les codes triaxiaux permettent d’incorporer en plus les déformations hexadecapolaires et quadrupolaires triaxiales.

Dans le cadre d’une théorie de champ-moyen on peut incorporer des contraintes additionnelles permettant d’obtenir une déformation voulue. Formellement il s’agit de rajouter un ensemble de multiplicateur de Lagrange, un pour chaque type de déformation, lors de la minimisation. Ainsi dans un cas RMF où RHB l’énergie fonctionnelle de la densité s’exprime

$$\mathcal{E}(\rho) = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \quad (3.31)$$

Le jeu de contraintes associées aux déformations s’expriment

$$\langle \Phi_0 | Q_{\lambda\mu} | \Phi_0 \rangle = q_{\lambda\mu} \quad (3.32)$$

Où  $q_{\lambda\mu}$  correspond à la valeur de la déformation souhaitée. La nouvelle fonctionnelle à minimiser s’exprime

$$\mathcal{E}'(\rho) = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle - \sum_{\lambda\mu} \Lambda_{\lambda\mu} (\langle \Phi_0 | Q_{\lambda\mu} | \Phi_0 \rangle - q_{\lambda\mu}) \quad (3.33)$$

Où les  $\Lambda_{\lambda\mu}$  représentent l’ensemble des paramètres de Lagrange contraignant les déformations. Pour plus de précision on peut établir les expressions des opérateurs multipolaires, en coordonnées cartésiennes, d’utilité pour la suite de cette étude. Ainsi on retrouve

— Le moment axial quadrupolaire ( $\lambda = 2, \mu = 0$ )

$$Q_{20} \propto \sum_i^A (2z_i^2 - x_i^2 - y_i^2) \quad (3.34)$$

— Le moment axial octupolaire ( $\lambda = 3, \mu = 0$ )

$$Q_{30} \propto \sum_i^A \left( z_i^3 - \frac{3}{2} z_i (x_i^2 + y_i^2) \right) \quad (3.35)$$

— Le moment tetrahédrique ( $\lambda = 3, \mu = 2$ )

$$Q_{32} \propto \sum_i^A (z_i(x_i^2 - y_i^2)) \quad (3.36)$$

On introduit également pour chaque moment, une quantité adimensionnelle associée permettant la comparaison systématique entre noyaux que l'on note respectivement  $\beta_{20}$ ,  $\beta_{30}$  et  $\beta_{32}$ . Pour alléger les notations pour les moments axiaux  $\{\lambda \neq 0, \mu = 0\}$  on omettra l'indice  $\mu = 0$  (ie  $\beta_{20} = \beta_2$ ). Muni de ces outils permettant de quantifier la déformation nucléaire, il nous faut à présent détailler la résolution en pratique des équations de champ-moyen relativiste dans un cadre autorisant des brisures de symétries spatiales

## 3.2 Réalisation pratique

Dans le cadre de ces travaux nous présenterons les équations de Hartree et de Hartree-Bogolioubov pour des systèmes à déformations axiales et triaxiales. Chacune des symétries considérées est liée à une représentation irréductible du groupe associé, correspondant à une quantité conservée permettant d'indexer les fonctions d'ondes spinorielles du système.

### 3.2.1 Systèmes à symétrie axiale

#### Réalisation formelle

De nombreux noyaux peuvent être décrits de manière satisfaisante en les autorisant à pouvoir se déformer axialement. Le système de coordonnées le plus adapté à la description du système est sans équivoque cylindrique  $(r, \theta, z)$  et l'on notera  $O_z$  l'axe de symétrie du système, la quantité conservée dans ce cas étant projection du moment cinétique sur cet axe. On notera  $f_i(\mathbf{r})$  les fonctions d'ondes associées à un état  $i$  caractérisé par le triplet de nombres quantiques  $(\Omega, \Pi, \tau)$  où  $\Omega$  est la projection du moment cinétique sur  $O_z$ ,  $\Pi$  la parité de l'état et  $\tau$  la projection de l'isospin. Dans un cadre relativiste ces fonctions d'ondes spinorielles prennent la forme générale [RGL97]

$$f_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} F_i^+(r, z, \tau_i) e^{i(\Omega_i - \frac{1}{2})\theta} \\ F_i^-(r, z, \tau_i) e^{i(\Omega_i + \frac{1}{2})\theta} \\ iG_i^-(r, z, \tau_i) e^{i(\Omega_i - \frac{1}{2})\theta} \\ iG_i^+(r, z, \tau_i) e^{i(\Omega_i + \frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

On appelle  $F$  la grande composante (ou composante lente) du spineur tandis que  $G$  est sa petite composante (ou composante rapide). Pour résoudre explicitement le problème nucléaire il faut faire le choix d'une base ou développer ces spineurs, deux choix usuels sont possibles, une expansion ou des techniques de discrétisation dans l'espace coordonnée. Notre choix se portera sur les techniques d'expansion, en particulier dans une base construite à partir des fonctions d'ondes d'un oscillateur harmonique. Ce choix présente l'avantage de fournir un formalisme très puissant pour le calcul des divers éléments de matrices entrant un jeu dans les équations auto-cohérentes de champ-moyen, en particulier les opérateurs non-locaux qui entrent en jeu dans le cadre d'une interaction de portée finie. Toutefois il faut garder à l'esprit les limites de cette expansion, les fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique présentant des queues de distributions trop rapidement décroissantes, empêchant le traitement d'états très faiblement liés et donc de noyaux très fortement déformés

ou très proche des *driplines*. Heureusement des techniques d'extension de cette méthode existent notamment en appliquant des transformations particulières aux fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique [SDNR05],[PSL<sup>+</sup>17]. Ainsi dans le cadre de système à déformation axiale les spineurs de Dirac sont développés sur les états propres d'un potentiel harmonique bidimensionnel déformé

$$V_{OH}(r, z) = \frac{1}{2}M\omega_r^2 r^2 + \frac{1}{2}M\omega_z z^2 \quad (3.38)$$

Un état propre de cet oscillateur est désigné  $|\alpha\rangle$  et se caractérise totalement par les nombres quantiques

$$|\alpha\rangle = |n_z, n_r, \Lambda, m_s\rangle \quad (3.39)$$

Où  $n_r$  et  $n_z$  indiquent les nombres de nœuds des fonctions d'onde de l'oscillateur dans les directions  $r$  et  $z$ . Tandis que  $m_l$  et  $\Lambda$  rendent compte des projections des moments angulaires et de spin sur l'axe de symétrie ( $O_z$ ). Les nombres quantiques caractérisant les spineurs de Dirac (3.37) s'obtiennent directement à partir des nombres quantiques de l'oscillateur harmonique selon

$$\Omega = \Lambda + m_s \quad (3.40)$$

$$\Pi = (-1)^{n_z + \Lambda} \quad (3.41)$$

L'énergie associée à un état propre de cet oscillateur harmonique s'exprime

$$\epsilon_\alpha = (2n_r + |\Lambda| + 1)\hbar\omega_r + (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega_z \quad (3.42)$$

En notant  $\Phi_\alpha$  les fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique (3.38) pouvant s'expliciter

$$\Phi_\alpha(\mathbf{r}, s, \tau) = \psi_{n_r}^\Lambda(r)\psi_{n_z}(z) \frac{e^{i\Lambda\theta}}{\sqrt{2\pi}} \chi_\Sigma(s) \chi_T(\tau) \quad (3.43)$$

$\chi_\Sigma(s)$  et  $\chi_T(\tau)$  étant respectivement les spineurs dans l'espace spinoriel et dans l'espace d'isospin. Dans cette equation les fonctions  $\psi_{n_r}^\Lambda(r)$  et  $\psi_{n_z}(z)$  correspondent respectivement aux fonctions d'ondes radiales et axiales de l'oscillateur harmonique

$$\psi_{n_r}^\Lambda(r) = \beta_r \tilde{\psi}_{n_r}^\Lambda(r) = N_{nr}^\Lambda \beta_r \sqrt{2\eta}^{\frac{|\Lambda|}{2}} e^{-\frac{\eta}{2}} L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta) \quad (3.44)$$

$$\psi_{n_z}(z) = \sqrt{\beta_z} \tilde{\psi}_{n_z}(\xi) = N_{nz} \sqrt{\beta_z} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_{n_z}(\xi) \quad (3.45)$$

Où les paramètres de l'oscillateur s'expriment

$$\beta_z = \frac{1}{b_z} = \left(\frac{m\omega_z}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}, \beta_r = \frac{1}{b_r} = \left(\frac{m\omega_r}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.46)$$

Toutefois il est important de noter que ces paramètres ne sont pas indépendants, la conservation du volume nucléaire impose la relation supplémentaire  $b_r^2 b_z = b_0^3$ . La base est par conséquent entièrement fixée par deux constantes,  $\hbar\omega_0$  et  $b_0$ . Et on introduit les variables auxiliaires adimensionnelles

$$\xi = z\beta_z, \eta = r^2\beta_r^2 \quad (3.47)$$

Et  $H_{n_z}(\xi)$  et  $L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta)$  désignant les polynômes de l'Hermite et de Laguerre. Enfin les constantes de normalisations des fonctions d'ondes (3.44) et (3.45) s'expriment

$$N_{nz} = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z!}\right)^{\frac{1}{2}} \text{ et } N_{nr}^\Lambda = \left(\frac{n_r!}{(n_r + |\Lambda|)!}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.48)$$

Sur cette base on peut alors développer indépendamment petite et grande composante des spineurs de Dirac (3.37)

$$F_i(\mathbf{r}, \tau_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} F_i^+(r, z, \tau_i) e^{i(\Omega_i - \frac{1}{2})\theta} \\ F_i^-(r, z, \tau_i) e^{i(\Omega_i + \frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix} = \sum_{\alpha}^{\alpha_{\max}} f_{\alpha}^{(i)}(\tau_i) \Phi_{\alpha}(r, z, \theta) \quad (3.49)$$

$$G_i(\mathbf{r}, \tau_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} G_i^+(r, z, \tau_i) e^{i(\Omega_i - \frac{1}{2})\theta} \\ G_i^-(r, z, \tau_i) e^{i(\Omega_i + \frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix} = \sum_{\bar{\alpha}}^{\bar{\alpha}_{\max}} g_{\bar{\alpha}}^{(i)}(\tau_i) \Phi_{\alpha}(r, z, \theta) \quad (3.50)$$

Le choix des bornes des sommes intervenant dans les expressions (3.49) et (3.50) est particulièrement important, dans les faits on les fixe aux valeurs respectives  $N_{\max}$  et  $\bar{N}_{\max} = N_{\max} + 1$  pour éviter l'apparition d'états spurieux [GRT90]. En utilisant l'orthogonalité des fonctions d'ondes (3.43) on peut ré-exprimer les équations de Dirac du système, sous forme matricielle.

$$\begin{pmatrix} A_{\alpha, \alpha'} & B_{\alpha, \bar{\alpha}'} \\ B_{\bar{\alpha}, \alpha'} & -C_{\bar{\alpha}, \bar{\alpha}'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{\alpha'}^{(i)}(\tau_i) \\ g_{\bar{\alpha}'}^{(i)}(\tau_i) \end{pmatrix} = \epsilon_i \begin{pmatrix} f_{\alpha}^{(i)}(\tau_i) \\ g_{\bar{\alpha}}^{(i)}(\tau_i) \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

Les éléments de matrices  $A_{\alpha, \alpha'}$ ,  $B_{\alpha, \bar{\alpha}'}$  et  $C_{\bar{\alpha}, \bar{\alpha}'}$  s'expriment

$$A_{\alpha, \alpha'} = 2\delta_{\Lambda\Lambda'} \delta_{m_s m'_s} \int_0^{\infty} d\xi \psi_{n_z}(\xi) \psi_{n'_z}(\xi) \int_0^{\infty} d\eta \psi_{n_r}^{\Lambda}(\eta) \psi_{n'_r}^{\Lambda}(\eta) [M^*(z, r) + V(z, r)] \quad (3.52)$$

$$C_{\alpha, \alpha'} = 2\delta_{\Lambda\Lambda'} \delta_{m_s m'_s} \int_0^{\infty} d\xi \psi_{n_z}(\xi) \psi_{n'_z}(\xi) \int_0^{\infty} d\eta \psi_{n_r}^{\Lambda}(\eta) \psi_{n'_r}^{\Lambda}(\eta) [M^*(z, r) - V(z, r)] \quad (3.53)$$

Tandis qu'en utilisant les relations d'orthogonalité des polynômes de Laguerre et de L'Hermite on peut exprimer

$$\begin{aligned} B_{\alpha, \bar{\alpha}} &= \delta_{\Lambda\bar{\Lambda}} \delta_{m_s \bar{m}'_s} \delta_{n_r \bar{n}_r} (-1)^{1/2 - m_s} \beta_z \left( \delta_{n_z \bar{n}_z - 1} \sqrt{\frac{\bar{n}_z}{2}} - \delta_{n_z \bar{n}_z + 1} \sqrt{\frac{\bar{n}_z}{2}} \right) \\ &+ \delta_{\Lambda\bar{\Lambda}+1} \delta_{m_s \bar{m}'_s - 1} \delta_{n_z \bar{n}_z} N_{n_r}^{\Lambda} N_{\bar{n}_r}^{\bar{\Lambda}} \beta_r \int_0^{\infty} d\eta e^{-\eta} \eta^{\Lambda-1/2} L_{n_r}^{\Lambda}(\eta) \left( \tilde{L}_{\bar{n}_r}^{\bar{\Lambda}}(\eta) - \Lambda L_{\bar{n}_r}^{\bar{\Lambda}} \right) \\ &+ \delta_{\Lambda\bar{\Lambda}-1} \delta_{m_s \bar{m}'_s + 1} \delta_{n_z \bar{n}_z} N_{n_r}^{\Lambda} N_{\bar{n}_r}^{\bar{\Lambda}} \beta_r \int_0^{\infty} d\eta e^{-\eta} \eta^{\Lambda-1/2} L_{n_r}^{\Lambda}(\eta) \left( \tilde{L}_{\bar{n}_r}^{\bar{\Lambda}}(\eta) - \bar{\Lambda} L_{\bar{n}_r}^{\bar{\Lambda}} \right) \end{aligned} \quad (3.54)$$

### Schéma de résolution

Une fois obtenus les éléments de matrice (3.51), déterminer les spineurs solutions de l'équation de Dirac revient à résoudre un problème de diagonalisation de matrices symétriques. Plusieurs optimisations peuvent être apportées afin d'exploiter au mieux la structure diagonale par bloc de spin-parité de cette matrice, structure due à la symétrie axiale conservée. En diagonalisant indépendamment chacun des blocs, on peut ainsi paralléliser directement en utilisant des *pragmas* OpenMp cette étape du calcul tout en ne conservant que les éléments non-nuls de la matrice. Dans un second temps on vectorise les opérations matricielles pour augmenter encore la rapidité de cette étape, ces deux optimisations permettent de gagner un facteur  $\simeq 4$  par rapport aux codes préexistants. On note également l'avantage de cette vectorisation pour un futur portage vers des architectures de type GPU (*Graphics Processing Unit*). Une fois les solutions spinorielles obtenues on peut calculer les expressions des densités scalaires  $\rho^S$  et vectorielles  $\rho^V$  dans la base de l'oscillateur harmonique selon

$$\rho_{\alpha\alpha'}^S = 2 \sum_{i>0} v_i^2 \left( f_{\alpha}^{(i)} f_{\alpha'}^{(i)} - g_{\alpha}^{(i)} g_{\alpha'}^{(i)} \right) \quad (3.55)$$

$$\rho_{\alpha\alpha'}^V = 2 \sum_{i>0} v_i^2 \left( f_{\alpha}^{(i)} f_{\alpha'}^{(i)} + g_{\alpha}^{(i)} g_{\alpha'}^{(i)} \right) \quad (3.56)$$

De même on déterminera la densité Coulombienne  $\rho^C$  et la densité d'isospin  $\rho^\tau$ . Une fois ces densités obtenues dans la base d'oscillateur harmonique, on les développe dans l'espace des coordonnées

$$\rho(z, r) \propto \sum_{\alpha\alpha'} \rho_{\alpha\alpha'} \delta_{\Lambda\Lambda'} H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) L_{n_r}^{\Lambda}(\eta) L_{n'_r}^{\Lambda'}(\eta) \quad (3.57)$$

Ces densités dans l'espace coordonnées sont les sources des equations mésoniques de Klein-Gordon  $s_{\phi}$

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + m_{\phi}^2 \right) \phi^{(m)}(r, z) = s_{\phi^{(m)}}(r, z) \quad (3.58)$$

De nouveau pour résoudre cette équation, on développe les champs mésoniques dans la base (dite bosonique cette fois) des états d'un oscillateur harmonique, il est d'ailleurs pratique d'utiliser les mêmes paramètres  $\beta_0$  et  $\hbar\omega_0$  que ceux de la base utilisée pour développer les équations de Dirac. On obtient un système matriciel inhomogène d'équations de Klein-Gordon à inverser

$$\sum_{n'_z n'_r}^{N_b} \mathcal{H}_{n_z n_r n'_z n'_r} \phi_{n_z n_r}^{(m)} = s_{n_z n_r}^{(\phi_m)} \quad (3.59)$$

Où l'élément de la matrice de Klein-Gordon s'exprime

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{n_z n_r n'_z n'_r} &= \delta_{n_r n'_r} \delta_{n_z n'_z} \left( \beta_z^2 \left( n_z + \frac{1}{2} \right) + \beta_r^2 (2n_r + 1) + m_{\phi^{(m)}}^2 \right) \\ &- \frac{\beta_z^2}{2} \delta_{n_r n'_r} \left( \sqrt{(n_z + 1)n'_z} \delta_{n_z n'_z - 2} + \sqrt{n_z(n'_z + 1)} \delta_{n_z n'_z + 2} \right) \\ &+ \beta_r^2 \delta_{n_z n'_z} \left( n'_r \delta_{n_r n'_r - 1} + n_r \delta_{n_r n'_r + 1} \right) \end{aligned} \quad (3.60)$$

Il suffit alors de résoudre par inversion le système d'équations (3.59) pour déterminer totalement les champs mésoniques massifs du système. Le terme Coulombien se traite quand à lui analytiquement. De mêmes les éléments de matrice d'appariement sont développés dans une base d'oscillateur en faisant usage de la séparabilité de l'interaction choisie [TMR09], les éléments de matrices d'appariement sont développés en annexe. @ANNEXE

### Optimisations numériques

Une fois l'ensemble de ces éléments calculés la procédure itérative commence, et permet d'obtenir les états fondamentaux des noyaux pairs-pairs de la carte, c'est ce qui est réalisées dans le cadre des codes [NPVR14]. D'importantes réécritures et optimisation de ces codes ont été réalisé pendant cette thèse, en particulier pour inclure des états octupolaires et pour garantir l'obtention du véritable état fondamental du système. Ainsi il important de noter qu'afin de déterminer correctement un minimum global, il faut procéder à l'optimisation des paramètres de la base pour réaliser une véritable minimisation de la fonctionnelle. Cette optimisation est réalisée en initialisant la procédure de résolution pour plusieurs valeurs des paramètres de base, au bout d'une dizaine d'itérations, on sélectionne un sous-ensemble des ces valeurs, ayant amorcé les chemins d'énergies les plus basses dans l'espace variationnel, on réitère ce procédé sélectif afin de ne conserver qu'un seul jeu de paramètres de base, permettant d'optimiser la recherche d'un minimum global correspondant à

l'état fondamental. Les intégrales dont le calcul est nécessaire aux éléments de matrices sont évaluées par méthode de quadrature de Gauss-Laguerre pour les intégrales bidimensionnelles selon  $\eta$  tandis que les intégrales axiales selon  $\xi$  sont évaluées par quadrature de Gauss-l'Hermite. Pour obtenir une précision satisfaisante tout en présentant un temps de calcul raisonnable les intégrales s'effectuent sur un réseau de taille  $N_{\text{Herm}} \times N_{\text{Lag}}$  où  $N_{\text{Herm}} = N_{\text{Lag}} = 48$  pour l'ensemble des intégrales rentrant en jeu dans la résolution des équations de champ-moyen. Enfin le nombre de couches d'oscillateurs pour les développements des champs fermioniques est choisi afin de minimiser le temps de calcul tout en préservant une précision optimale quand aux observables à un-corps. Typiquement pour les noyaux légers ( $A < 40$ ) on choisira un nombre de couches  $N_f = 8$  tandis que pour les noyaux les plus lourds on choisira usuellement  $N_f = 10$ . Pour l'ensemble des résultats présentés dans le cadre de ce travail le nombre de couches à été choisi noyau par noyau en étudiant les variations des observables avec le nombre de couches.

### Résultats pour l'Uranium 234

Pour illustrer les variables et observables issues des codes relativistes développés et optimisés dans le cadre de cette étude on se focalise sur l'exemple d'un noyau lourd dont la description axiale de l'état fondamental est satisfaisante l' $^{234}\text{U}$ . Ainsi l'état d'énergie minimale, correspondant au niveau RHB, à une déformation *prolate*, dont le moment quadripolaire adimensionnée vaut  $\beta_2 = 0.23$ . L'énergie de liaison totale de cet état calculée vaut  $E_{\text{RHB}} = -1775.6$  MeV, valeur à comparer à la valeur expérimentale [WAK+17]  $E_{\text{Exp}} = -1778.0$  MeV, soit un écart relatif inférieur à 0.2%. Cet excellent accord entre notre modèle et les valeurs expérimentales rendent compte de la puissance et de la simplicité des approches de type champ-moyen relativiste, bien qu'en toute rigueur il faille encore restaurer la symétrie rotationnelle brisée. La densité de matière dans le référentiel intrinsèque du noyau peut être représentée dans le plan ( $Oxy$ ) en 3.5. En sus des résultats concernant l'état fondamental

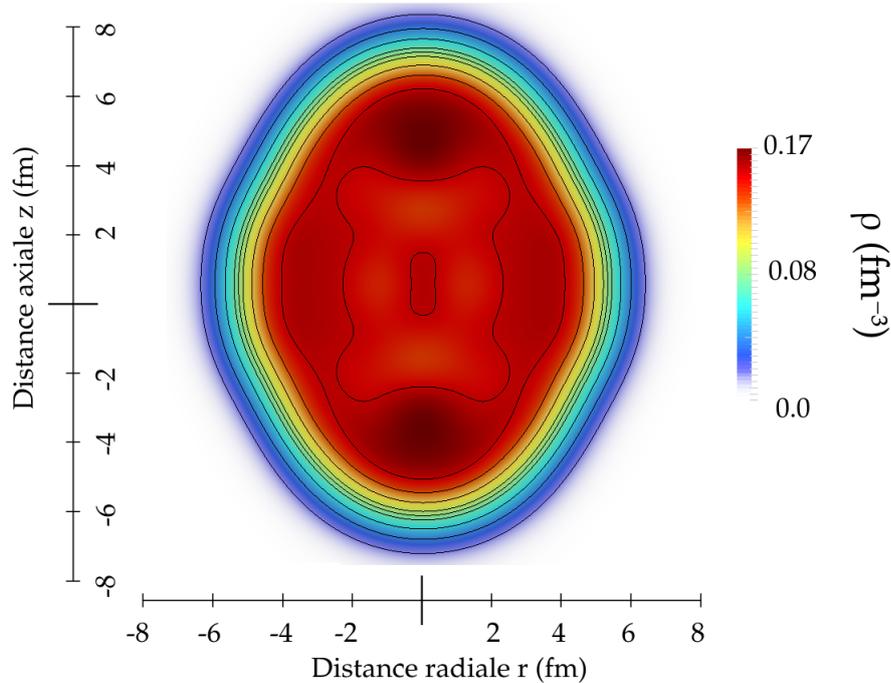


FIGURE 3.5 – Coupe de la densité de l'état fondamental de l'Uranium 234 dans le référentiel intrinsèque obtenue dans le cadre d'une approche relativiste

il est intéressant de comprendre comment réagit le noyau lorsque l'on lui impose une déformation. Dans les faits on utilise la méthode du Lagrangien augmenté[SSBN10] pour implémenter la contrainte (3.32). Pour obtenir et optimiser le chemin variationnel permettant d'obtenir l'état contraint on adapte la valeur du multiplicateur de Lagrange  $\Lambda_{20}$ , chose aisée dans le cas d'une unique contrainte, mais qui posera plusieurs problèmes algorithmiques et numériques dans un cas plus général comme nous le verrons plus tard. Dans le cas de l'Uranium 234 à déformation axiale, on fait varier le paramètre  $\beta_2$  et on obtient la réponse du système à la déformation en Figure 3.6

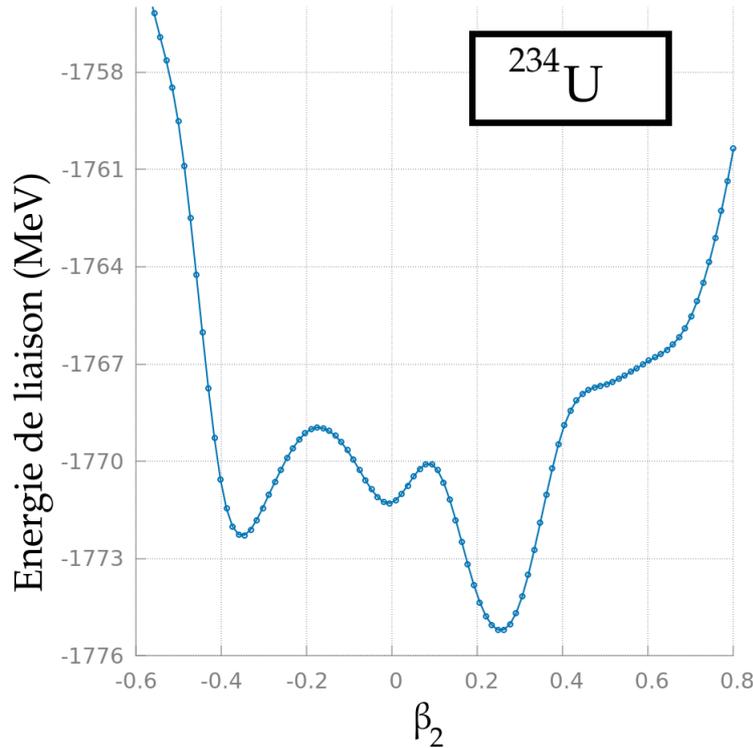


FIGURE 3.6 – Énergie totale de l' $^{234}\text{U}$  vis-à-vis du moment quadripolaire  $\beta_2$

Sur cette figure 3.6, apparaît clairement que la déformation *prolate* ( $\beta_2 > 0$ ) est plus favorisée énergétiquement que la déformation *oblate* ( $\beta_2 < 0$ ), et en particulier on retrouve bien pour l'état fondamental une déformation  $\beta_2^{(GS)} = 0.23$ . D'un point de vue numérique une convergence pour une précision  $\epsilon = 10^{-10}$  est obtenue sur un QuadCore INTEL i7-6820HQ cadencé à 2.7GHz en 1.4 minutes pour l'état fondamental. Dans le cas de ce noyau il semble évident qu'une description en tant que système à déformation axiale suffit à encoder la physique du système, ce n'est toutefois pas toujours le cas.

### 3.2.2 Systèmes octupolaires

#### Motivation

Si le degré de déformation axiale semble être le plus évident à prendre en compte, certains noyaux ne sauraient être décrits dans ce cadre. Un exemple frappant de cette insuffisance peut-être trouvé en étudiant le comportement du Radium 224 comme proposé dans [BN96]-[AAR16]. Considérons donc en Fig 3.7 la réponse en énergie de cet isotope vis-à-vis d'une déformation purement axiale

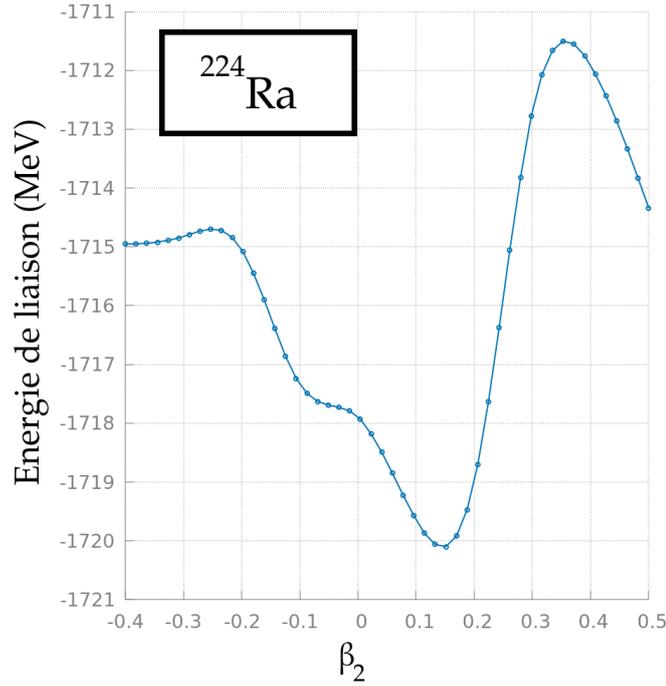


FIGURE 3.7 – Énergie totale de l' $^{224}\text{Ra}$  vis-à-vis du moment quadripolaire  $\beta_2$

Dans le cadre de cette approximation, l'état fondamental serait légèrement déformé *oblate* avec une déformation  $\beta_2^{(GS)} = 0.15$ . L'énergie associée à cet état est  $E_{\text{RHB}}^{(\text{Axial})} = -1720.1$  MeV, ce qui est assez éloigné de l'énergie expérimentale [WAK<sup>+</sup>17]  $E_{\text{exp}} = -1729.1$  MeV. Plusieurs indications expérimentales [But16]-[GRJ<sup>+</sup>15] tendent à prouver l'influence d'une contribution octupolaire à l'état fondamental du  $^{224}\text{Ra}$ .

### Extension formelle

La prise en compte de déformations octupolaires passe par la levée de la symétrie de réflexion imposée dans le cadre des systèmes axiaux. Dans les faits on lève la condition  $f_i(r, z) = f_i(r, -z)$  implicite utilisée dans les codes axiaux concernant les fonctions d'ondes spinorielles. Numériquement l'ensemble des intégrales axiales intervenant dans les équations (3.52) et (3.53) selon

$$2 \int_0^{\infty} f_i(r, \xi) d\xi \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} f_i(r, \xi) d\xi \quad (3.61)$$

Plus notablement la structure diagonale par bloc de spin-parité défini se modifie, les contributions de parité positive et négative se mélangeant. Ainsi les états de la mer de Fermi n'ont plus de parité bien définie, ce qui permet la déformation en "poire" du noyau atomique

### Résultats pour le Radium 224

En levant la condition sur la parité, on permet l'obtention de solutions plus générales, pouvant être d'énergie plus basse. C'est le cas pour le Radium dont l'état fondamental présente de fait une déformation axiale  $\beta_2^{(GS)} = 0.2$  mais également une déformation octupolaire  $\beta_3^{(GS)} = 0.13$ . L'énergie de liaison dans le cadre où l'on autorise cette nouvelle brisure de symétrie est  $E_{\text{RHB}}^{(\text{Axial+Octupole})} = -1726.8$  MeV, permettant effectivement d'obtenir une énergie plus basse et plus proche de la valeur

expérimentale que celle prédite dans un cas où l'on se limite à des solutions axiales. La densité associée dans le référentiel intrinsèque du noyau est représentée en Figure 3.8.

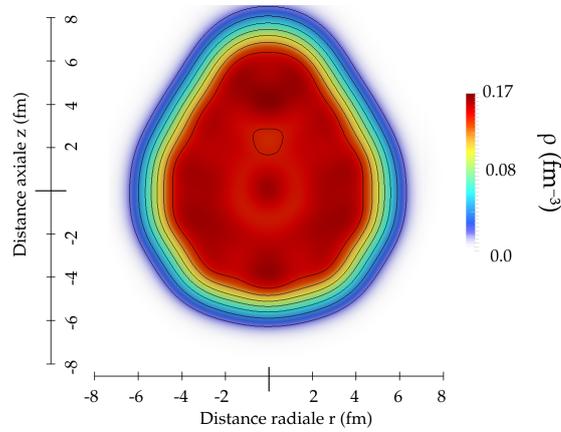


FIGURE 3.8 – Représentation spatiale de la densité du Radium 224 dans le référentiel intrinsèque du noyau, la contribution octupolaire est responsable de la forme en "poire" de ce noyau.

Pour s'assurer de la bonne obtention d'un minimum correspondant il faut également étudier la réponse du système aux déformations axiales et octupolaires simultanément, on parle de *PES (Potential Energy Surface)*. Pour obtenir une PES il faut en suivant la procédure décrite par l'équation (3.32) mais cette fois avec deux contraintes. Il faut par conséquent deux multiplicateurs de Lagrange à optimiser, pour d'une part obtenir un résultat convergé, mais plus pragmatiquement pour optimiser le temps de convergence nécessaire à l'obtention de la configuration souhaitée. Dans le cas du  $^{224}\text{Ra}$  la PES dans l'espace des moments quadripolaires et octupolaires est obtenue en Figure (3.9).

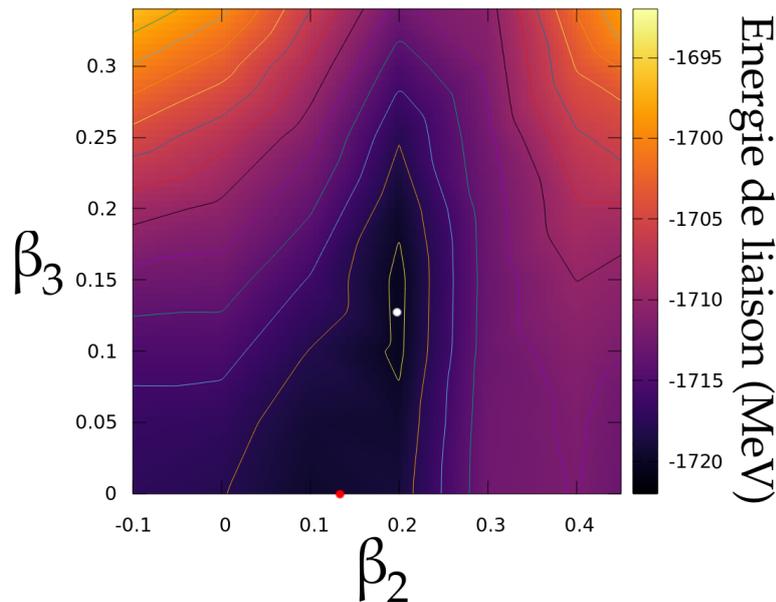


FIGURE 3.9 – PES du Radium 224 dans l'espace des moments quadripolaire  $\beta_2$  et octupolaires  $\beta_3$ . Le point rouge indique le minima obtenu en imposant une symétrie axiale, le point blanc indique le vrai minimum en énergie, présentant une déformation axiale et octupolaire.

Toutefois le fait de rajouter ce degré de liberté a un coût numérique, lié d'une part à un plus grand espace variationnel à explorer mais également à la perte partielle de la structure diagonalisable par bloc du Hamiltonien de champ-moyen. En moyenne pour obtenir l'état fondamental du Radium 224, il faut, avec la même architecture que celle utilisée précédemment, 4.2 minutes. Toutefois pour une description encore plus générale du comportement collectif du noyau, la brisure de la parité couplée aux déformations axiales ne suffit pas, il faut une nouvelle fois lever une autre symétrie spatiale.

### 3.2.3 Systèmes triaxialement déformés

Certains noyaux peuvent présenter des structures moins usuelles, en particulier certains isotopes du Germanium, du Platine ou encore de l'Hafnium présentent des structures spectrales singulières. En particulier les rapports des moments quadripolaires électriques des bandes rotationnelles de ces isotopes semblent compatibles avec des déformations tétraédriques [KBD<sup>+</sup>76][GMR07] [LVI<sup>+</sup>09] [Tas11]. Pour décrire ce nouveau type de déformation, les changements sont plus profonds que les précédents. Il faut de nouveau étendre notre espace variationnel [PMRZ08] mais également changer la base utilisée ainsi que le système de coordonnées [NPVR14].

#### Réalisation formelle

Tout d'abord, on se place dans un système de coordonnées cartésiennes et la base dans laquelle on développera les états du système sera à présent la base des états propres d'un oscillateur harmonique déformé, tridimensionnel.

$$V_{OH}^{3D} = \frac{1}{2}m \left( \omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2 \right) \quad (3.62)$$

On notera les longueurs d'oscillateurs  $b_{\{x,y,z\}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\{x,y,z\}}}}$ . La conservation du volume du noyau, traduite par la relation,  $b_x b_y b_z = b_0^3$ , a pour effet de contraindre les trois fréquences de l'oscillateur (3.62). Ainsi en introduisant les paramètres caractérisant la déformation de la base  $\beta_0$  et  $\gamma_0$  on peut proposer la paramétrisation

$$\hbar\omega_x = \hbar\omega_0 e^{-\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\beta_0 \cos(\gamma_0 - \frac{2\pi}{3})} \quad (3.63)$$

$$\hbar\omega_y = \hbar\omega_0 e^{-\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\beta_0 \cos(\gamma_0 + \frac{2\pi}{3})} \quad (3.64)$$

$$\hbar\omega_z = \hbar\omega_0 e^{-\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\beta_0 \cos \gamma_0} \quad (3.65)$$

Ainsi la base est cette fois totalement déterminée par trois constantes, une de plus que dans le cas axial,  $\hbar\omega_0$ ,  $\beta_0$  et  $\gamma_0$ . Les états de cette base s'expriment comme le produit de trois fonctions d'ondes d'oscillateur harmonique unidimensionnel et des facteurs de spins et d'isospin

$$\Phi_\alpha(\mathbf{r}, s, \tau) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)\chi_\Sigma(s)\chi_T(\tau) \quad (3.66)$$

Avec

$$\psi_{n_\mu}(\mu) = \sqrt{\beta_\mu} \psi_{n_\mu}(\xi_\mu) = \sqrt{\beta_\mu} N_{n_\mu} H_{n_\mu}(\xi_\mu) e^{-\frac{\xi_\mu^2}{2}} \quad \text{avec } \mu \in \{x, y, z\}. \quad (3.67)$$

Où on a introduit le jeu de coordonnées auxiliaires  $\xi_\mu = z\beta_\mu$  tandis que le facteur de normalisation vaut  $N_{n_\mu} = \sqrt{\sqrt{\pi} 2^{n_\mu} n!}$  et  $H_{n_\mu}(\xi_\mu)$  est un polynôme de l'Hermite.

Néanmoins pour limiter le coût numérique d'un tel calcul on impose une unique symétrie, dite symétrie *x-simplex*[LS84] définie par l'opérateur discret

$$S_x = P e^{-i\pi J_x} \quad (3.68)$$

Où  $P$  est l'opérateur parité et  $J_x$  le moment angulaire selon l'axe ( $Ox$ ). On limite le développement des états  $|\alpha\rangle = |n_x, n_y, n_z, m_s\rangle$  aux états propres de l'opérateur (3.68), états propres s'exprimant

$$|n_x, n_x, n_x\rangle^+ = \frac{i^{n_y}}{\sqrt{2}} [|\uparrow\rangle - (-1)^{n_x} |\downarrow\rangle] |n_x, n_y, n_z\rangle \quad (3.69)$$

Et

$$|n_x, n_x, n_x\rangle^- = \frac{i^{n_y}}{\sqrt{2}} (-1)^{n_x+n_y+1} [|\uparrow\rangle + (-1)^{n_x} |\downarrow\rangle] |n_x, n_y, n_z\rangle \quad (3.70)$$

Ces deux états de simplex positifs et négatifs sont reliés par l'opérateur de renversement du sens du temps  $\mathcal{T}$

$$|n_x, n_x, n_x\rangle^- = \mathcal{T} |n_x, n_x, n_x\rangle^+ \quad (3.71)$$

Où dans le cadre de notre formalisme covariant une représentation possible est  $\mathcal{T} = i\Sigma K$  Avec  $K$  l'opérateur conjugaison complexe et  $\Sigma \in \mathcal{M}_8(\mathbb{C})$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} \quad (3.72)$$

Où  $\sigma_2$  est une des matrices de Pauli. A présent les spineurs de Dirac peuvent être développés sur la base d'oscillateur :

$$f_i(\mathbf{r}, \pm) = \sum_{\alpha}^{\alpha_{\max}} f_i^{\alpha} \Phi_{\alpha}(\mathbf{r}, \pm), \quad g_i(\mathbf{r}, \pm) = \sum_{\tilde{\alpha}}^{\tilde{\alpha}_{\max}} g_i^{\tilde{\alpha}} \Phi_{\tilde{\alpha}}(\mathbf{r}, \pm) \quad (3.73)$$

Pour achever la construction de ce modèle, nous supposons aussi que les champs sont symétriques par rapports aux plans  $Oyz, Oxz$  et  $Oxy$ . Dans ce cadre les éléments de matrices du Hamiltonien de Dirac deviennent

$$A_{\alpha, \alpha'} = (-1)^{\frac{n_y+n'_y}{2}} \prod_{u=\{x,y,z\}} \delta_{n_u+n'_u} \langle n_x n_y n_z | M^*(x, y, z) + V(x, y, z) | n'_x n'_y n'_z \rangle \quad (3.74)$$

Et

$$C_{\alpha, \alpha'} = (-1)^{\frac{n_y+n'_y}{2}} \prod_{u=\{x,y,z\}} \delta_{n_u+n'_u} \langle n_x n_y n_z | M^*(x, y, z) - V(x, y, z) | n'_x n'_y n'_z \rangle \quad (3.75)$$

Enfin

$$\begin{aligned} B_{\alpha, \alpha'} = & \frac{\beta_x}{\sqrt{2}} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} (-1)^{n_x+n_y} \left[ \sqrt{n_x} \delta_{n_x n'_x+1} - \sqrt{n'_x} \delta_{n_x n'_x-1} \right] \\ & + \frac{\beta_y}{\sqrt{2}} \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_z n'_z} (-1)^{n_y} \left[ \sqrt{n_y} \delta_{n_y n'_y+1} - \sqrt{n'_y} \delta_{n_y n'_y-1} \right] \\ & + \frac{\beta_z}{\sqrt{2}} \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} (-1)^{n_x+n_y} \left[ \sqrt{n_z} \delta_{n_z n'_z+1} - \sqrt{n'_z} \delta_{n_z n'_z-1} \right] \end{aligned} \quad (3.76)$$

Les autres contributions s'expriment de manière analogue dans la base tridimensionnelle, et sont présentés en annexe @ANNEXE. Dans le cas où l'on impose la conservation de la parité on peut scinder le Hamiltonien en 4 blocs de simplex-parité, toutefois contrairement à (??) nous avons étendu notre implémentation pour permettre

la brisure de parité, dans ce cas le Hamiltonien n'exhibe plus que deux blocs (de simplex positif et négatif) ce qui augmente considérablement le temps de calcul. En moyenne et sur une même architecture, on passe de quelques minutes de calcul à plusieurs heures pour les configurations triaxiales voir plusieurs dizaines d'heures pour les configuration triaxiales brisant la parité.

### Résultats pour le Platine 190

Un cas particulièrement marquant quand à l'importance de degré de liberté triaxiaux, peut-être le  $^{190}\text{Pt}$ . Cet isotope du platine n'est pas correctement décrit dans le cadre d'une description axiale, on peut étudier en Figure 3.10 l'évolution axiale de l'énergie de liaison de cette isotope.

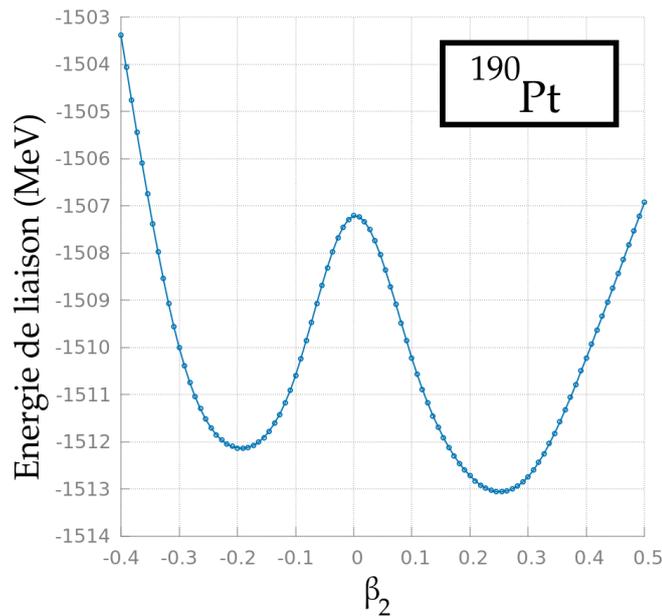


FIGURE 3.10 – Évolution de l'énergie de liaison totale du  $^{190}\text{Pt}$  en fonction du moment quadripolaire  $\beta_2$

Le minimum de ce profil en énergie situé en  $\beta_2 = 0.25$  correspond à une énergie  $E_{\text{RHB}}^{(\text{Axial})} = -1513.0$  MeV tandis que l'énergie de liaison expérimentale  $E_{\text{Exp}} = 1524.9$  MeV, encore une fois il est possible qu'en restreignant les symétries du système on ne puisse pas capturer les corrélations responsables de l'énergie de liaison supplémentaire. De prime abord, on autorise les états à peupler des états présentant une déformation octupolaire, on peut voir en Figure 3.11 la PES associée, les états octupolaires ne sont pas favorisés énergétiquement, il faut donc lever la contrainte quand au peuplement d'états triaxiaux.

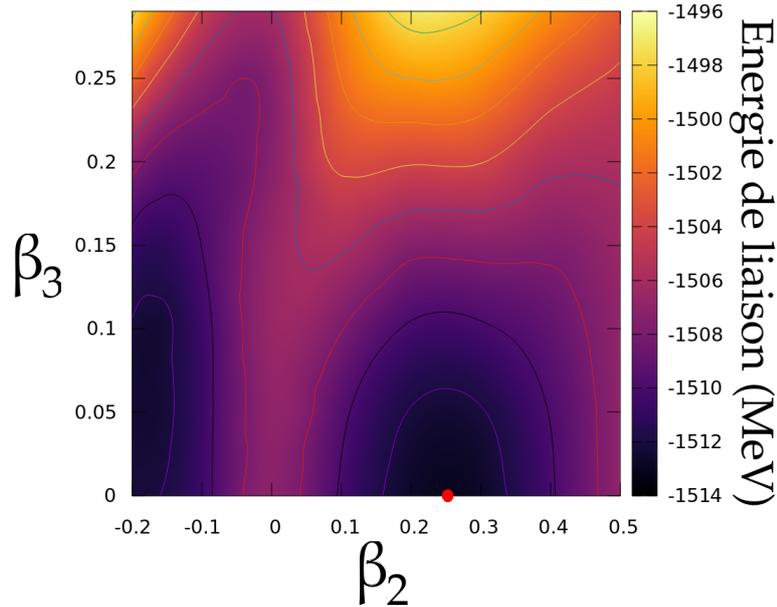


FIGURE 3.11 – PES du Platine 190 dans l’espace des moments quadripolaire  $\beta_2$  et octupolaires  $\beta_3$ . Le point rouge indique le minimum global de cette carte.

En appliquant l’extension triaxiale précédente on se doit d’explorer à présent le plan  $(\beta_2, \gamma)$  ou  $\gamma$  est l’angle (en degré) caractérisant la triaxialité du système, un système est dit de triaxialité maximale lorsque  $\gamma = 30^\circ$ . Dans le cas du Platine, on peut obtenir dans ce plan l’évolution de l’énergie en Figure 3.12. Ainsi l’état fonde-

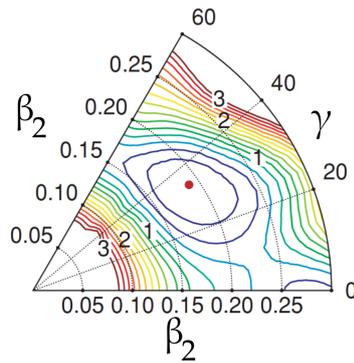


FIGURE 3.12 – Énergies de liaison dans le plan  $(\beta_2, \gamma)$  les contours indiquent les lignes isoénergétiques, le minimum global de cette surface est indiqué par le point rouge, figure issue de [NcvacRV<sup>+</sup>10]

tal du  $^{190}\text{Pt}$  correspond à la configuration  $(\beta_2 = 0.16, \gamma = 35^\circ)$  dont l’énergie vaut  $E_{\text{RHB}}^{(\text{Triaxial})} = -1521.6 \text{ MeV}$ , valeur très proche de la valeur expérimentale [WAK<sup>+</sup>17]  $E_{\text{Exp}} = -1524.9$ . Il est intéressant de représenter la densité de cet isotope pour se rendre compte de l’effet de cette brisure de symétrie sur la distribution de matière en Figure 3.13

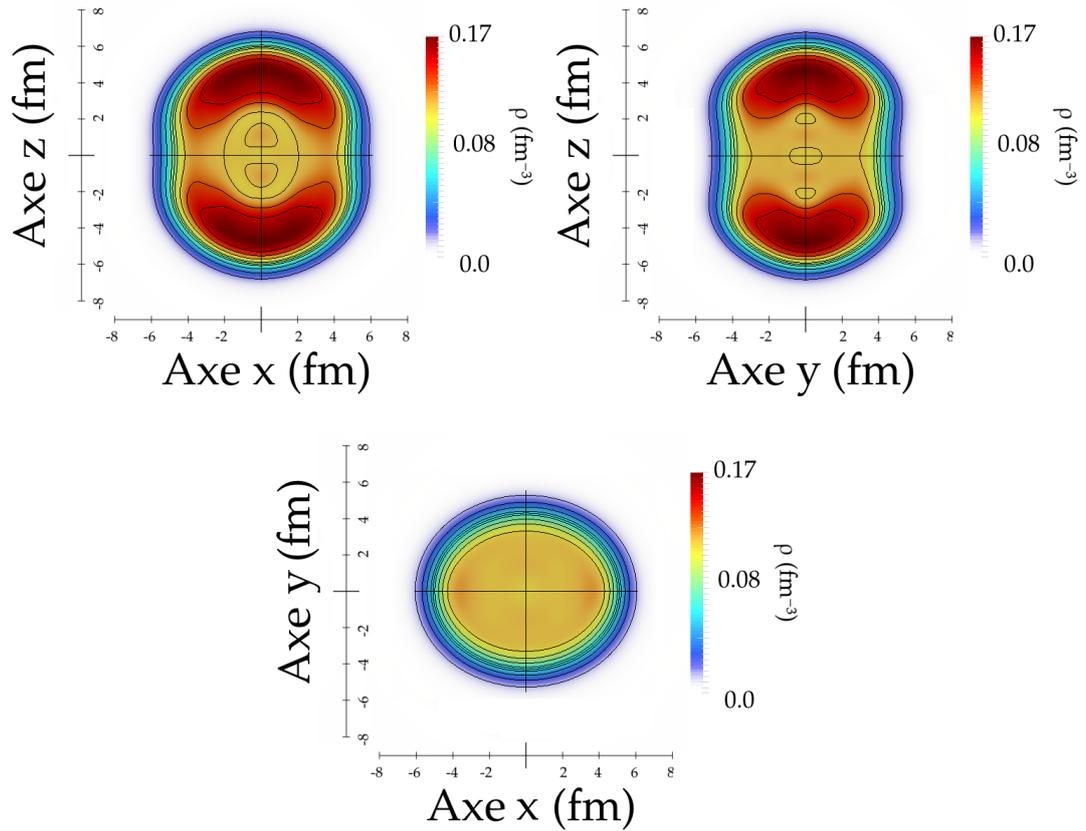


FIGURE 3.13 – Densité du  $^{190}\text{Pt}$  dans le référentiel intrinsèque du noyau en vue de coupe selon les  $Ozx$  (en haut à gauche)  $Ozy$  (en haut à droite) et  $Oyx$  (en bas)

Que l'on peut représenter en trois dimensions, pour avoir une idée plus claire de la répartition spatiale de la densité nucléaire en Figure 3.14.

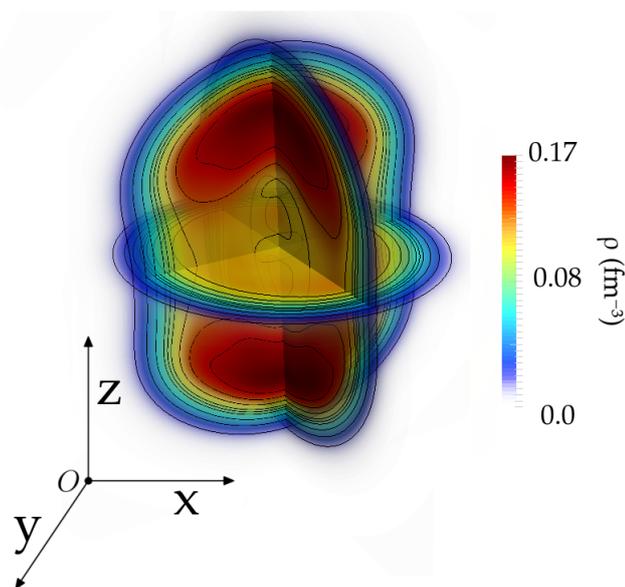


FIGURE 3.14 – Densité du  $^{190}\text{Pt}$  dans le référentiel intrinsèque du noyau en représentation tridimensionnelle

## Conclusions

A ce stade, nous disposons donc des outils formels et avons développé des outils numériques permettant de rendre compte des effets de la déformation sur l'ensemble des noyaux atomiques au niveau champ-moyen. Toutefois il est important de noter que la configuration réelle d'un noyau atomique ne peut-être obtenue qu'après restauration des symétries brisées ???. Ainsi des méthodes de type GCM peuvent *in-fine* induire dans le référentiel intrinsèque des déformations différentes que celle prédite au seul niveau champ-moyen. Les codes utilisés dans ce cadre ont été massivement parallélisés afin de produire plus rapidement et efficacement des PES correctement convergées. De plus la prise en compte de l'ensemble de ces déformations permet de rendre correctement compte de la richesse phénoménologique du noyau atomique. Néanmoins l'obtention de configurations spécifiques, implique d'être à même de déterminer des chemins de convergence optimaux sous un nombre particulièrement élevé de contraintes, dans la section suivante nous proposons une nouvelle méthode pour minimiser le nombre d'itération et donc le temps de calcul pour obtenir des configuration sur-contraintes.

## 3.3 Champ-moyen sous contraintes multiples

### 3.3.1 Problématique

Comme nous l'avons vu précédemment pour imposer une déformation à notre champ-moyen, on rajoute des contraintes, chacune de ces contraintes est caractérisée par un paramètre de Lagrange (3.32). Or en ayant étendu la portée de nos codes à des systèmes à la fois triaxiaux et octupolaires nous pouvons à présent contraindre plusieurs degrés de liberté ( $d$ ) de la fonctionnelle, principalement

1. Le rayon
2. Le moment quadripolaire  $\beta_2$
3. Le moment octupolaire  $\beta_3$
4. Le moment triaxial  $\gamma$
5. Le moment tétraédrique  $\beta_{32}$

Or pour chacune de ces contraintes il faut déterminer pour chaque contrainte, une constante  $c_{qad}^{(d)}$  (que l'on nommera constante de rappel par analogie avec les systèmes mécanique) exprimant l'intensité de la contrainte sur le champ-moyen. Le choix de ce jeu de constantes est primordial pour obtenir la configuration souhaitée. Un mauvais choix de ces constantes entraînera au mieux une convergence très lente, au pire empêchera la procédure itérative de résolutions des équations de champ-moyen de converger. Le choix actuel de ces constantes est purement empirique et ne repose pas sur une réalisation algorithmique précise. Nous proposons une solution à ce problème permettant de trouver les jeux de constantes optimales pour obtenir en un temps minimal les configuration de champ-moyen d'intérêt.

### 3.3.2 Algorithmes bio-mimétiques

Formellement la détermination de ces jeux de contraintes n'est rien d'autre qu'un problème classique d'optimisation sous contraintes multiples. Toutefois les comportements vis-à-vis des contraintes varient très fortement d'un noyau sur l'autre, ce qui empêche de prime abord la détermination d'une heuristique. De plus une méthode d'analyse statistique des contraintes est peu indiquée en raison des temps de calculs considérables nécessaires pour chacune des configurations échantillonnées. Aussi il est possible d'envisager une approche différente, permettant de définir une stratégie

universelle pour déterminée de manière approchée les meilleurs jeux de contraintes possibles. Le principe de cette méthode repose sur les notions d'algorithmes évolutifs et génétiques[McC05]. Présentons brièvement les principes de bases de ces algorithmes[Mit98].

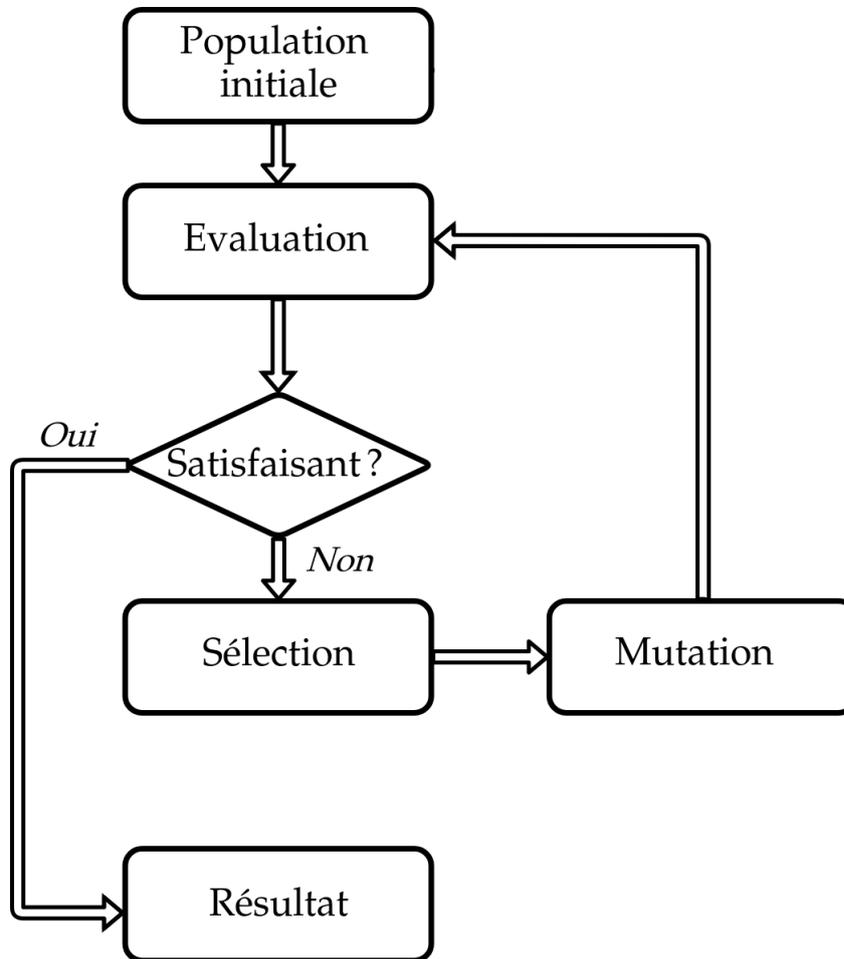


FIGURE 3.15 – Représentation schématique d'un algorithme génétique usuel.

### Bio-mimétisme

Le concept d'algorithmes bio-mimétique est de s'inspirer des fonctionnements de base des principes d'évolution et de mutation pour résoudre un problème d'optimisation. Dans la nature, le concept d'évolution traduit le fait qu'une population d'individus génère à partir de croisements et mutations de leurs génome des population filles différentes et plus diverses que la population initiale. Un algorithme peut reprendre ce principe comme indiqué en Figure 3.15. La "population" est constituée de l'ensemble des variables du problème à optimiser, le principe est d'évaluer cette population à chaque nouvelle génération et de conserver les solutions d'élite, qui seront solutions (approchées) du problème initial. Plus précisément dans notre cas les individus qui constitue la population sont les constantes associées à chaque contrainte

appliquée. Initialement chaque individu se définit par son "code génétique" selon :

$$I^{(i)} = \begin{pmatrix} c_{\text{Rayon}}^{(i)} \\ c_{Q_{20}}^{(i)} \\ c_{Q_{30}}^{(i)} \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \\ c_{\gamma}^{(i)} \end{pmatrix} \quad (3.77)$$

La population est composé d'un ensemble d'individus (3.77) dont les caractéristiques sont tirés aléatoirement

$$P = \{I^{(0)}, \dots, I^{(i)}, \dots, I^{(n)}\} \quad (3.78)$$

On peut ensuite procéder à la réalisation des différentes étapes de l'algorithme 3.15.

#### 1. Évaluation

L'étape d'évaluation permet de quantifier l'adaptation d'un individu à l'environnement, autrement dit à quel point l'individu concerné est performant. Dans les faits il s'agit de construire une fonction de coût permettant d'attribuer un poids à chaque individu. Dans le cadre de notre implémentation nous utilisons la métrique la plus simple et intuitive à savoir la norme de la différence entre l'énergie de l'itération  $n$  et  $n - 1$  de la procédure de champ-moyen. Plus un individu est adapté plus cette différence sera faible, par définition la configuration est atteinte quand cette différence est inférieure à la précision requise.

#### 2. Sélection

L'étape de sélection est cruciale pour maximiser les performances d'un algorithme évolutif. Il existe plusieurs stratégies d'évolution. Nous nous sommes principalement focalisés sur les sélection par "tournoi". Le principe étant de comparer au sein de la population tous les individus deux à deux. On attribue à l'individu le plus performant une probabilité  $P_s$  d'être sélectionné, tandis que la probabilité de sélection  $1 - P_s$  est associée au perdant. La fonction de sélection peut s'écrire pour tout couple d'individus (3.77) à l'itération  $n$  de l'algorithme de champ-moyen

$$\mathcal{F}(I^{(a)}, I^{(b)}) = \min \begin{pmatrix} |\epsilon_n^{(a)} - \epsilon_{n-1}^{(a)}| \\ |\epsilon_n^{(b)} - \epsilon_{n-1}^{(b)}| \end{pmatrix} \quad (3.79)$$

#### 3. Mutation

Il s'agit d'une étape fondamentale de l'algorithme, le principe est de faire muter au hasard les caractéristiques des individus sélectionnés. Usuellement les taux de mutations  $\tau_m$  doivent être inférieurs à 5% pour permettre de maintenir une population diversifiée, mais dont l'élite reste favorisée. On peut illustrer une mutation d'un individu

$$I^{(i)} = \begin{pmatrix} c_{\text{Rayon}}^{(i)} \\ c_{Q_{20}}^{(i)} \\ c_{Q_{30}}^{(i)} \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \\ c_{\gamma}^{(i)} \end{pmatrix} \xrightarrow[\text{aléatoire}]{\text{Mutation}} \tilde{I}^{(i)} = \begin{pmatrix} c_{\text{Rayon}}^{(i)} \\ c_{Q_{20}}^{(i)} \\ c_{Q_{30}}^{(i)} \cdot \tau_m \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \\ c_{\gamma}^{(i)} \end{pmatrix} \quad (3.80)$$

#### 4. Itération

On réinjecte la nouvelle population de contraintes dans nos équations de champ-moyen et on répète le processus, jusqu'à ce qu'un des individus de notre population atteigne la convergence finale de notre code.

Taille de la population	$P_s$ et $\tau_m$		Nombre d'itérations
100	0.75	0.01	581
100	0.8	0.02	456
100	0.9	0.01	654
100	0.75	0.02	421
300	0.75	0.02	373
300	0.8	0.02	392

TABLEAU 3.1 – Tableau récapitulatif de l'impact des paramètres d'un algorithme génétique sur l'efficacité mesurée par le nombre d'itérations avant convergence

Ainsi au lieu de fixer les constantes contraignant les déformations en amont du code de résolution des équations RHB, on rend le choix de ces constantes dynamique, ainsi elles évoluent au fur et à mesure de la procédure de convergence. Cette modification nécessite de prime abord plus de puissance de calcul, puisqu'il faut réaliser pour chaque individu de notre population un calcul de champ moyen, au lieu d'un seul, toutefois cette technique permet d'explorer l'espace variationnel de manière bien plus optimale, pour peu que les paramètres de sélection  $P_s$  et le taux de mutation  $\tau_m$  soient bien choisis. Dans le cadre de cette étude nous avons procédé par tâtonnement pour déterminer ces deux paramètres, mais on pourrait aisément considérer une extension permettant de déterminer le couple  $\{P_s, \tau_m\}$  optimal. La taille de la population est également importante pour maximiser l'efficacité de l'algorithme évolutif, typiquement dans nos simulations la population était composée de plusieurs centaines d'individus (300 en général). On peut résumer nos choix à l'aide d'un tableau comparatif du nombre d'itération global nécessaire à l'obtention de la configuration d'intérêt. Pour ce test nous imposons 4 contraintes à un noyau d'Oxygène 16, dont on veut fixer

- Le rayon  $R = 5$  fm
- Le moment axial  $\beta_2 = 0.5$
- Le moment octupolaire  $\beta_3 = 0$
- Le paramètre triaxial  $\gamma = 0$

Dans le tableau 3.1 on peut constater l'impact des paramètres précédents sur l'efficacité de l'algorithme global.

### 3.3.3 Résultats

Il est fondamental de comparer l'efficacité de l'approche bio-mimétique par rapport à l'approche classique. Pour ce faire on peut comparer pour plusieurs noyaux et plusieurs type de configurations le nombre d'itérations nécessaire pour obtenir la configuration souhaitée. Pour chaque calcul test, le meilleur jeu de paramètres  $P_s$  et  $\tau_m$  a été sélectionné, la taille de la population est fixée à 100 individus. Les tests ont été effectués sur une grille de calcul *OpenMP* permettant de lancer en parallèle l'ensemble des calculs champ moyen pour chaque individu d'une population.

Noyau et contraintes	Nombre d'itéra- tions (code clas- sique)	Nombre d'itéra- tions (code bio- mimétique)
$^{16}\text{O} \{R = 4\text{fm}, \beta_2 = 0.3, \beta_3 = 0.1\}$	1281	1513
$^{16}\text{O} \{R = 4\text{fm}, \beta_2 = 0.3, \beta_3 = 0.1, \gamma = 0\}$	1281	421
$^{16}\text{O} \{R = 4\text{fm}, \beta_2 = 0.3, \beta_3 = 0.1, \gamma = 0, \beta_{32} = 0.3\}$	1542	530
$^{120}\text{Sn} \{R = 4\text{fm}, \beta_2 = 0.3, \beta_3 = 0.1\}$	938	1119
$^{120}\text{Sn} \{R = 4\text{fm}, \beta_2 = 0.3, \beta_3 = 0.1, \gamma = 0\}$	2362	576
$^{120}\text{Sn} \{R = 4\text{fm}, \beta_2 = 0.3, \beta_3 = 0.1, \gamma = 0, \beta_{32} = 0.3\}$	2729	613

TABLEAU 3.2 – Tableau récapitulatif de l'efficacité en terme de nombre d'itérations des algorithmes biomimétiques par rapport à l'approche classique.

Le tableau 3.2 permet de constater la puissance et donc l'intérêt des approches génétiques. On peut avec une population assez faible, obtenir une accélération de la convergence de plus de 300%. Il est intéressant de remarquer que l'efficacité n'est réelle que lorsque l'on impose un nombre suffisant de contraintes, pour moins de 4 contraintes les algorithmes bio-mimétiques sont de fait moins efficaces que l'approche classique. On peut espérer en augmentant la taille des populations et en optimisant les paramètres de l'algorithme gagner un ordre de grandeur complet quant au temps de calcul de *PES*. Mais plus pragmatiquement pour cette étude un outil pour permettre une étude rapide de configuration d'intérêt physique.

## 3.4 Agrégation nucléaire

### 3.4.1 Introduction

Jusqu'à présent nous avons porté notre attention sur des noyaux lourds, avec le formalisme et les outils numériques mis en place et décrits dans les précédentes sections nous pouvons nous tourner vers l'étude de noyaux plus légers. Jusqu'à présent nous avons pu constater que la distribution de matière au sein des noyaux peut-être, profondément anisotrope, néanmoins en première approximation les noyaux lourds semblent homogènes. Toutefois cette homogénéité est fortuite et ne relève d'aucun principe fondamental. En effet l'Univers à différentes échelles d'observation peut, pour respecter le principe de minimisation de l'énergie, faire émerger des sous-structure agrégées, qui brisent l'homogénéité du système considéré mais abaissent son énergie. On peut notamment citer l'apparition d'amas localisés de galaxies aux échelles cosmologiques [Pea01], à l'échelle macroscopique la scission d'une goutte d'eau sphérique en deux plus petites, ou encore, aux échelles subatomiques le confinement de 2 ou 3 quarks au sein de mésons ou de hadrons. Le noyau atomique ne fait pas exception et des agrégats de nucléons, que nous appellerons *clusters* peuvent se former. L'idée de la présence de clusters dans les systèmes nucléaires apparaît très tôt [HT38] et est initialement motivée par une volonté de comprendre les mécanismes à l'origine de la radioactivité alpha. Un agrégat de deux neutrons et deux protons se préformerait dans le noyau avant d'être émis dans le continuum sous forme d'une particule  $\alpha$ . De plus un deuxième type d'observations expérimentales était l'idée d'une structure composite du noyau. Ainsi l'énergie de liaison totale ramenée au nombre de nucléons est plus élevée pour les noyaux pairs-pairs dont le nombre de protons

est égal au nombre de neutrons comme on peut le voir en Figure 3.16, ce qui tend à accréditer un modèle de noyau dont les degrés de liberté effectifs seraient des clusters à 4 nucléons, autrement dit des particules  $\alpha$ .

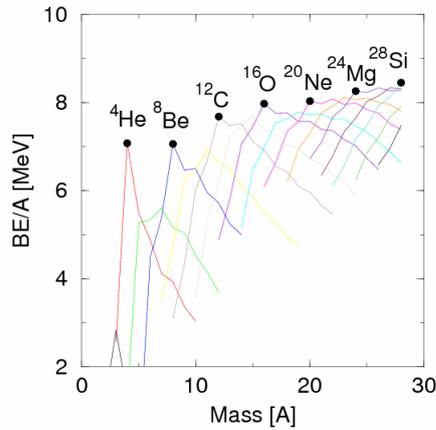


FIGURE 3.16 – Évolution de l'énergie de liaison rapportée au nombre de nucléons, pour plusieurs éléments légers. Les noyaux  $N=Z$  sont plus liés que leurs isotopes respectifs

Plus encore, la découverte de la radioactivité cluster [RJ84] semble conforter l'hypothèse de préformation d'agrégats dans le noyau. Toutefois il faut garder à l'esprit que les preuves expérimentales de cette présence de clusters sont usuellement indirectes, principalement lors de réactions de *breakup* ou lors de diffusions de deux noyaux présentant des clusters (par exemple  $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ ) [BW97]. Dans cette optique de nombreux modèles théoriques ont eu pour objet de prédire les structures d'agencement des clusters et ont engrangé quelques succès pour reproduire certains résultats expérimentaux [vOFKE06]. Ainsi les modèles de type *AMD* (*Antisymmetrized Molecular Dynamics*) [KEKH03] ou de type *FMD* (*Fermionic Molecular Dynamics*) permettent de rendre compte de la structure rotationnelle spécifique des spectres de noyaux présentant des agrégats nucléaires. Cependant ces approches favorisent certaines configurations en imposant des paquets d'ondes gaussiennes nucléoniques, et ne se rattachent pas à une théorie dont les degrés de liberté élémentaires seraient les nucléons dans le milieu. Dans le cadre cette étude nous conserverons notre approche de type champ-moyen relativiste sans préjuger de la présence de clusters, ce qui nous permet d'étudier en détail le mécanisme d'émergence des clusters.

### 3.4.2 Champ-moyen relativiste et clusters

L'avantage des méthodes de type *EDF* réside dans leur universalité, comme nous l'avons vu, avec un faible nombre de paramètres nous sommes à même de décrire la quasi intégralité des éléments de la carte nucléaire. Aussi si notre description est correcte nous serons à même de décrire avec un même formalisme aussi bien les états de type liquide quantiques que de type cluster. Tout d'abord considérons le Néon 20, élément fréquemment étudié dans le cadre de la physique des clusters, dans le cadre d'une description axiale. On peut tout d'abord au niveau du champ-moyen identifier la déformation prolate axiale de l'état fondamental, facilement identifiable en Figure 3.17, correspond à  $\beta_2^{(GS)} = 0.54$ . Énergétiquement le minimum  $E_{(RHB)}^{(GS)} = -163.1$  MeV reproduit correctement l'énergie expérimentale  $E_{(Exp)}^{(GS)} = -160.6$  MeV. On peut représenter la densité associée à l'état fondamental du Néon dans le référentiel intrinsèque du noyau en Figure 3.18. Dans cette représentation, on voit émerger deux

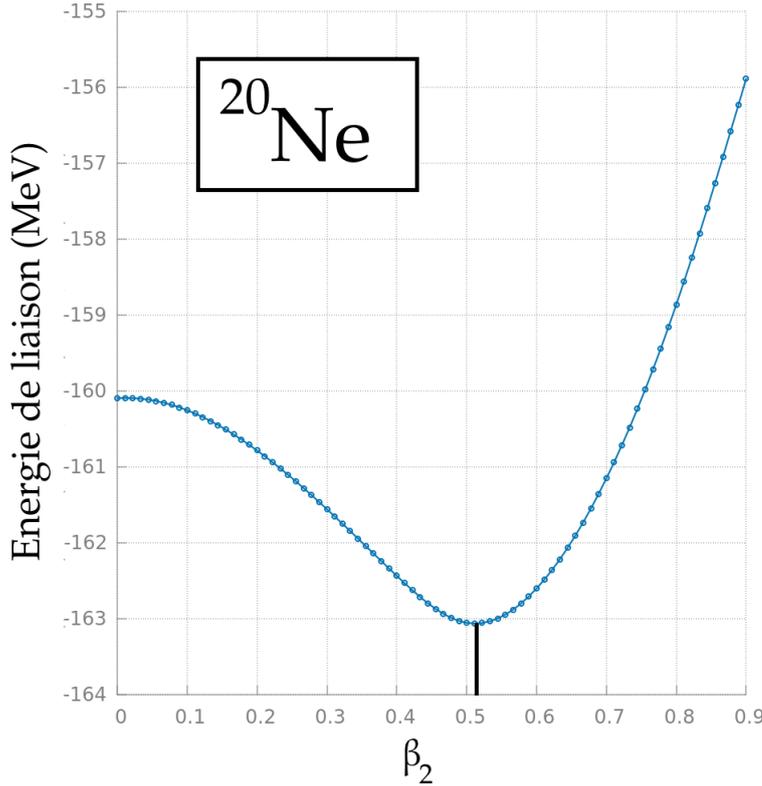


FIGURE 3.17 – Réponse en énergie du  $^{20}\text{Ne}$  vis-à-vis d’une déformation axiale, l’état fondamental est indiqué par le segment noir.

structures denses sur l’axe de symétrie  $Oz$ . Ces structures correspondent à des agrégats nucléoniques spatialement localisés, autrement dit dans un cadre relativiste les clusters émergent naturellement d’une description où les nucléons sont le degré de liberté fondamental[EKNV12]. Toutefois il est important de déterminer une mesure quantifiant l’émergence de ces agrégats, une simple étude de la densité à un-corps ne suffisant pas forcément.

### 3.4.3 Mesure de localisation

En s’inspirant des études de densités électroniques [BE90] on peut assez facilement construire une mesure de la localisation de sous-structures éventuellement présentes, en adaptant l’approche présentées en [RMUO11] pour une *EDF* relativiste. Le concept fondamental de cette mesure réside dans la construction de la probabilité  $P_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  de trouver deux nucléons de même spin  $\sigma$ , en deux point de l’espace  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r}'$ , à isospin  $\tau$  fixé. Comme nous l’avons vu dans les chapitres précédents dans le cadre d’une approche de type Hartree-Fock ou Hartree-bogolioubov, toute la physique du système est encodée dans la matrice densité à un corps  $\rho_{\tau\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ . A partir de cette matrice on peut construire :

$$P_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r})\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}') - |\rho_{\tau\sigma\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 \quad (3.81)$$

Où l’on note  $\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \rho_{\tau\sigma\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  la densité locale. On peut ainsi construire la probabilité conditionnelle  $R_{\tau\sigma}$  de trouver un nucléon en  $\mathbf{r}'$  connaissant la position d’un nucléon de même spin et isospin en  $\mathbf{r}$ .

$$R_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}') - \frac{|\rho_{\tau\sigma\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2}{\rho_{\tau\sigma}} \quad (3.82)$$

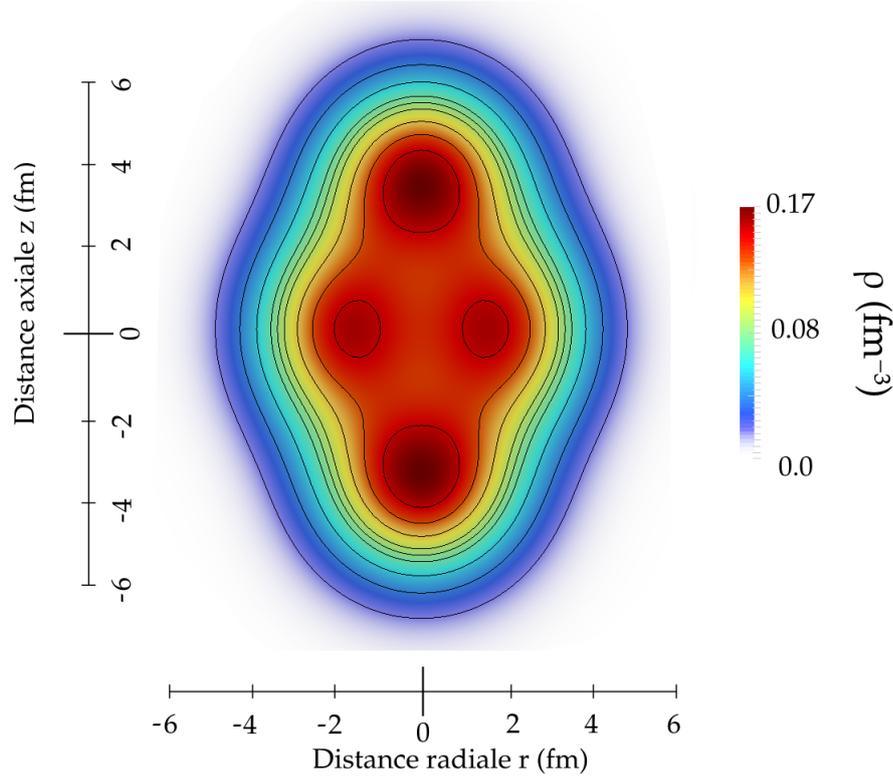


FIGURE 3.18 – Densité dans le référentiel intrinsèque du  $^{20}\text{Ne}$ , on note l'apparition de deux agrégats de densité qui correspondent à des clusters.

Etant donné que nous nous intéressons uniquement aux propriétés de localisation de la probabilité (3.82), il suffit de considérer la partie locale de cette probabilité conditionnelle. On peut réaliser cette approximation en prenant la moyenne des orbitales de rayon  $\delta_r$  autour d'un point  $\mathbf{r}$  et en ne conservant que les premiers termes du développement de Taylor de cette moyenne.

$$R_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \delta_r) = \frac{1}{3} \left( \tau_{\tau\sigma} - \frac{1}{4} \frac{(\nabla \rho_{\tau\sigma})^2}{\rho_{\tau\sigma}} \right) \delta_r^2 + O(\delta_r^3) \quad (3.83)$$

Où  $\tau_{\tau\sigma}$  est la densité d'énergie cinétique que l'on calcule à partir des fonctions d'ondes  $\Phi_\alpha$  du système

$$\tau_{\tau\sigma} = \sum_{\alpha} |\nabla \Phi_{\alpha}(\mathbf{r}\sigma)|^2 \quad (3.84)$$

Et  $\nabla \rho_{\tau\sigma}$  indiquant la dérivée spatiale de la densité

$$\nabla \rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = 2 \sum_{\alpha} \text{Re}[\Phi_{\alpha}^*(\mathbf{r}\sigma) \nabla \Phi_{\alpha}(\mathbf{r}\sigma)] \quad (3.85)$$

Le terme traduisant la mesure de localisation  $D_{\tau\sigma}$  peut s'écrire<sup>1</sup>

$$D_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \left( \tau_{\tau\sigma} - \frac{1}{4} \frac{(\nabla \rho_{\tau\sigma})^2}{\rho_{\tau\sigma}} \right) \quad (3.86)$$

Toutefois (3.86) est une probabilité inversée, au sens où plus la probabilité de trouver deux particules de même spin dans un voisinage propre plus  $D_{\tau\sigma}(\mathbf{r})$  est petit. Aussi

1. A noter qu'un terme supplémentaire construit à partir des courants apparaît en régime dynamique

pour simplifier l'interprétation on inversera cette quantité et on la normalisera.

$$C_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \left[ 1 + \left( \frac{\tau_{\tau\sigma}\rho_{\tau\sigma} - \frac{1}{4}[\nabla\rho_{\tau\sigma}]^2}{\rho_{\tau\sigma}\tau_{\tau\sigma}^{\text{TF}}} \right)^2 \right]^{-1} \quad (3.87)$$

Où l'on choisit comme facteur de normalisation la densité de Thomas-Fermi, ce choix est fondé par la nécessité de définir une échelle naturelle de densité.

$$\tau_{\tau\sigma}^{\text{TF}} = \frac{3}{5}(6\pi^2)^{\frac{2}{3}}\rho_{\tau\sigma}^{\frac{5}{3}} \quad (3.88)$$

On peut dans le cadre des codes développés et présentés précédemment étudier cette quantité en regard de la simple densité à 1-corps. Ainsi dans le cas du Néon 20 on peut de nouveau représenter la densité nucléaire dans le référentiel intrinsèque ainsi que la mesure de localisation (3.87) en Figure 3.19.

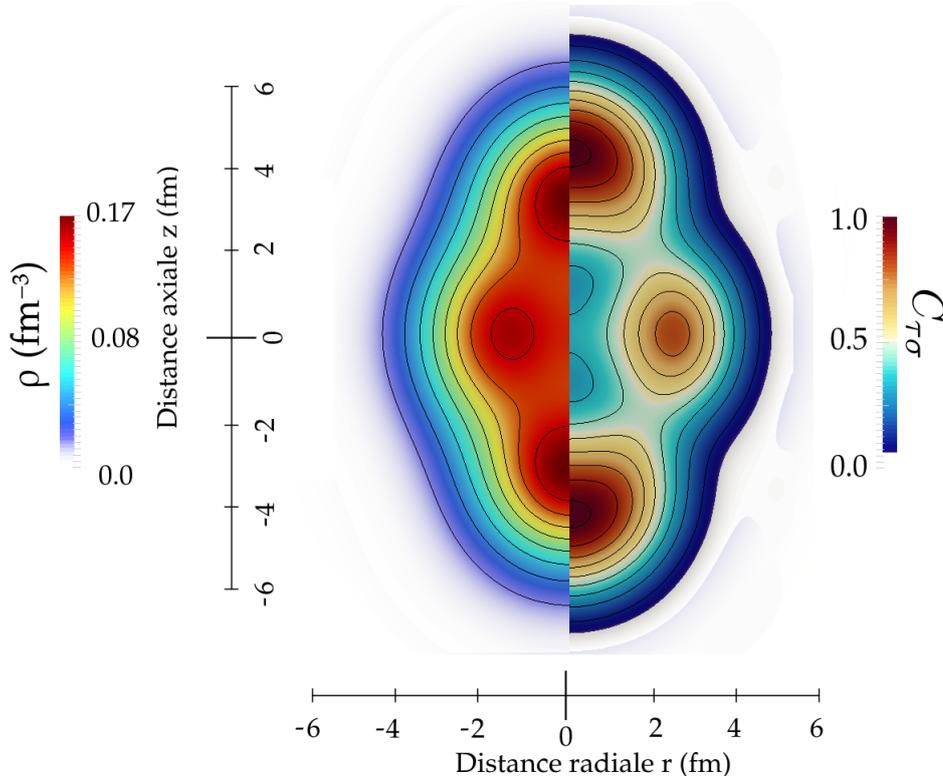


FIGURE 3.19 – Densité dans le référentiel intrinsèque du  $^{20}\text{Ne}$  à droite, mesure de localisation associée au même élément à droite.

Sur cette dernière figure on remarque que notre conclusion initiale quand à la présence de deux clusters est renforcée par cette nouvelle mesure de localisation. Cette distribution de probabilité est maximale dans les zones où la densité l'est aussi, ce qui nous permet de conclure que dans le cadre d'une formalisme *EDF* covariant au niveau champ-moyen on peut naturellement rendre compte de l'émergence d'agrégats nucléoniques. On peut également s'interroger quand à la nature des clusters mis en évidence. Cependant pour être à même d'étudier les propriétés physiques de ces agrégats, il nous faut aller au delà du champ-moyen et étudier l'état fondamental vrai prédit après restauration des symétries brisées[MacEK<sup>+</sup>18]. Pour l'état fondamental  $J = 0^+$  la déformation de l'état collectif correspondant au minimum en énergie de la Figure 3.20 correspond à un état oblate  $\beta_2 = 0.47$ , déformé octupolairement  $\beta_3 = 0.5$ .

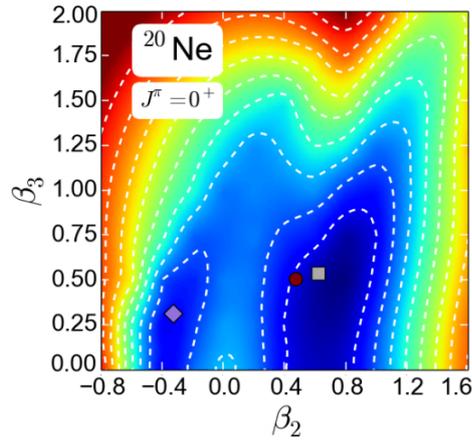


FIGURE 3.20 – Énergie totale normalisée du système dans le plan  $(\beta_2, \beta_3)$  le minimum global est indiqué par le point rouge. Figure issue de [MacEK<sup>+</sup>18]

La densité correspondante ainsi que la mesure de localisation (3.87) peuvent être représentées en Figure 3.21.

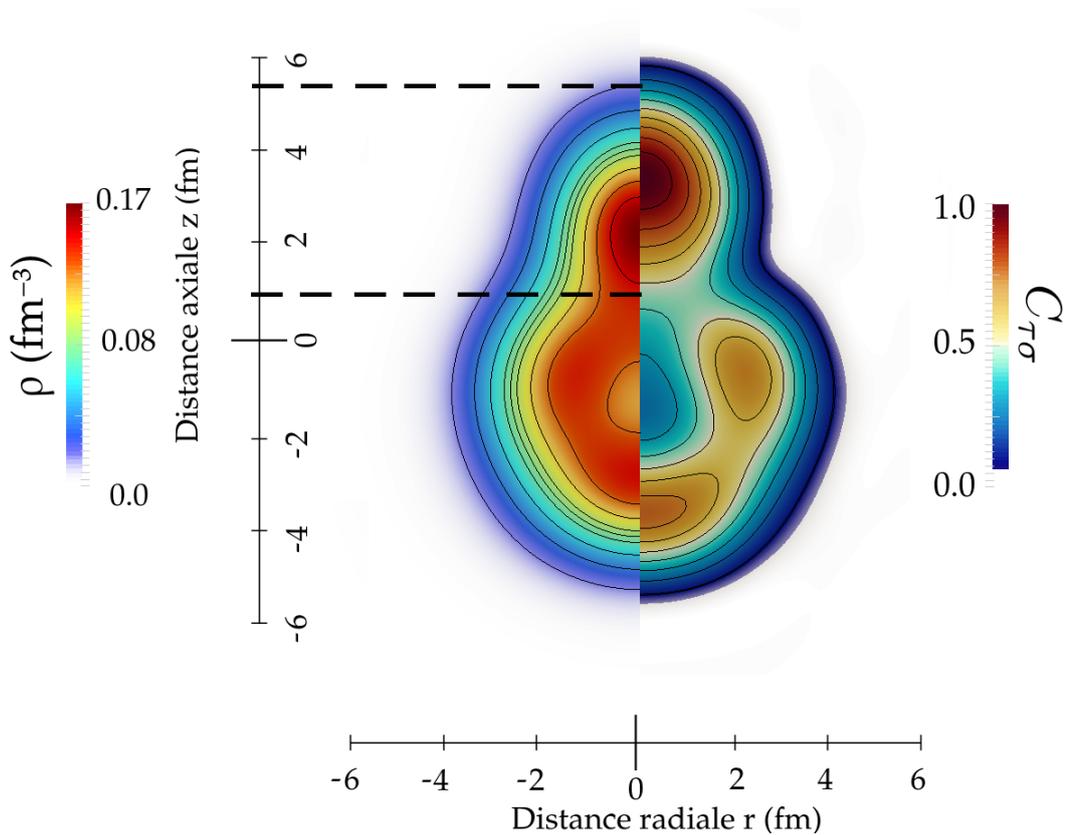


FIGURE 3.21 – Densité dans le référentiel intrinsèque de l'état  $J = 0^+$  du  $^{20}\text{Ne}$  (à droite), mesure de localisation associée (à droite). Le cluster est localisé entre les traits en pointillés.

Cette configuration présente une séparation claire d'une part d'un cœur surmonté d'autre part d'un agrégat. En intégrant la densité de ce cluster on peut déterminer le nombre de nucléons contribuant à l'agrégat et ainsi conclure quant à sa nature. Dans le cas de la densité présenté en Figure 3.21 les bornes d'intégration sont déterminées à partir de la mesure de localisation et sont indiquées par les segments brisés, on

obtient  $N_{\text{Nucléons}}^{(\text{Cluster})} \simeq 4.06$  nucléons. Le néon 20 serait donc une superposition d'un cœur d'Oxygène 16 et d'une particule  $\alpha$  ce qui fait écho à l'intuition de formation de cluster  $\alpha$  dans les noyaux  $N=Z$ . De plus on note que ce même cœur d' $^{16}\text{O}$  semble lui-même présenter un début de clusterisation, particulièrement visible dans la mesure de localisation, cet élément fera l'objet d'une étude plus fine dans une section ultérieure. Ainsi muni de cette mesure de localisation et des outils numériques exposés précédemment on peut quantifier l'émergence des clusters et conjecturer leur nature physique. Nonobstant ces résultats, il faut encore comprendre le mécanisme à l'origine de l'agrégation.

### 3.4.4 Origines de l'agrégation nucléaire

Pour comprendre l'origine de ces clusters il est intéressant de comparer les résultats issus des codes relativistes et non-relativiste, en effet les deux approches permettent de reproduire correctement les énergies de liaison tout en présentant des densités différentes. On peut comparer en Figure 3.22 différentes paramétrisations relativistes de portée nulle (DD-PC1) ou de portée finie (DD-ME2) et non relativistes de portée nulle (SLy4) ou de portée finie (D1S)[PSL<sup>+</sup>17].

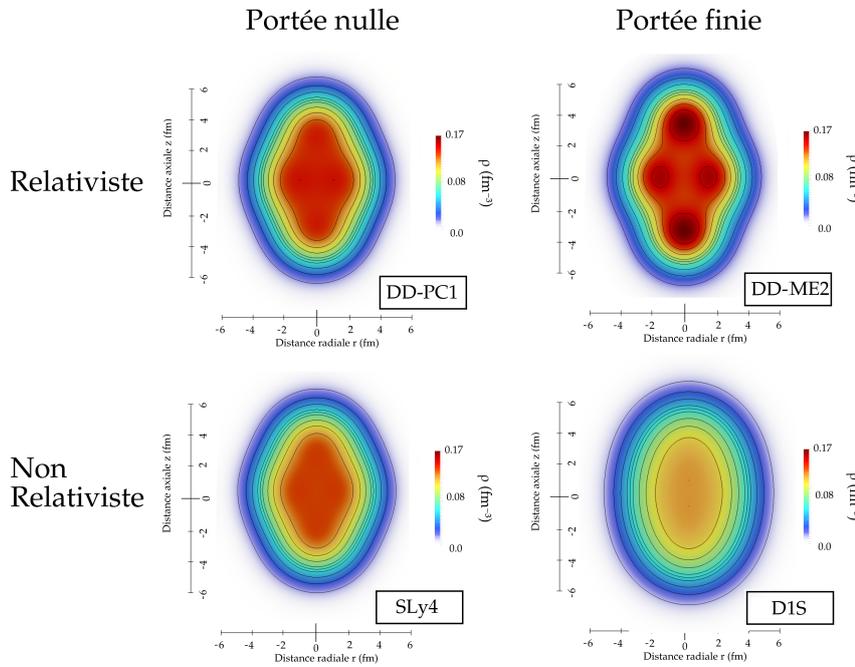


FIGURE 3.22 – Densités dans le référentiel intrinsèque du  $^{20}\text{Ne}$ , pour des paramétrisations relativistes et non-relativiste de portée nulle et de portée finie.

Il est flagrant que les clusters n'émergent que dans le cadre d'une approche relativiste, la compréhension de la différence entre ces deux approches peut être la clé de la compréhension du mécanisme d'agrégation. La différence majeure entre les deux approches est la structure du spectre de particules indépendantes<sup>2</sup> qui diffère profondément d'un cas à l'autre. Les états de particules-indépendantes du dernier état occupé sont ceux qui contribuent le plus au cluster, ces états sont plus prononcés et moins dispersés dans le cas relativiste, car plus liés que dans le cas non relativiste[EKNV12]. Cette différence s'explique par le fait qu'à déformations et rayons égaux la profondeur des potentiels relativistes est plus grande que dans les cas

2. Il ne s'agit pas à proprement parler d'un spectre au sens où il ne s'agit pas d'une observable[DHHS15] mais bien d'une variable discriminante dans notre cas

classiques ( $V_{\text{pot}}^{(DD-ME2)}(r=0) = -77.4\text{MeV}$ ,  $V_{\text{pot}}^{(SLy4)}(r=0) = -68.3\text{MeV}$ ). Cette différence provient elle-même de la différence de traitement du terme de *spin-orbite* entre les deux approches. Dans le cas relativiste la profondeur du potentiel est fixée par la différence entre le potentiel scalaire attractif de Lorentz et le potentiel vecteur répulsif. Le choix de ces deux potentiels est contraint par le fait que leur somme fixe le potentiel de *spin-orbite* qui émerge naturellement du formalisme covariant. Dans le cas classique le terme *spin-orbite* est un ajout purement phénoménologique et par conséquent il est décorrélé des potentiels à l'origine du champ-moyen, ce qui implique que la profondeur moyenne du potentiel totale est plus faible que dans le cas relativiste où le potentiel est plus profond. Ainsi la structure et l'agencement des fonctions d'ondes de particules élémentaires encode la physique responsable de l'agrégation, le paramètre différenciant les régimes clusters des régimes liquides est relié à l'extension spatiale des fonctions d'ondes individuelles. En fonction de l'extension spatiale de ces états un système fermionique peut exhiber une phase de cristal quantique ou *a contrario* de liquide quantique.

### Dispersion spatiale

Cette idée a été formalisée pour l'étude de la transition entre cristal et liquide par Mottelson[Mot96]. Cette démarche peut-être généralisée en considérant cette fois les états clusters comme une phase intermédiaire entre les phases cristallines et liquides. Pour traduire ce concept on peut introduire[EKNcvacV13] un paramètre adimensionné  $\alpha_{\text{loc}} = \frac{b}{r_0}$  ou  $b$  caractérise l'extension des fonctions d'ondes et  $r_0$  la distance internucléonique moyenne. Ce paramètre permet de distinguer trois régimes tous illustrés en Figure 3.23.

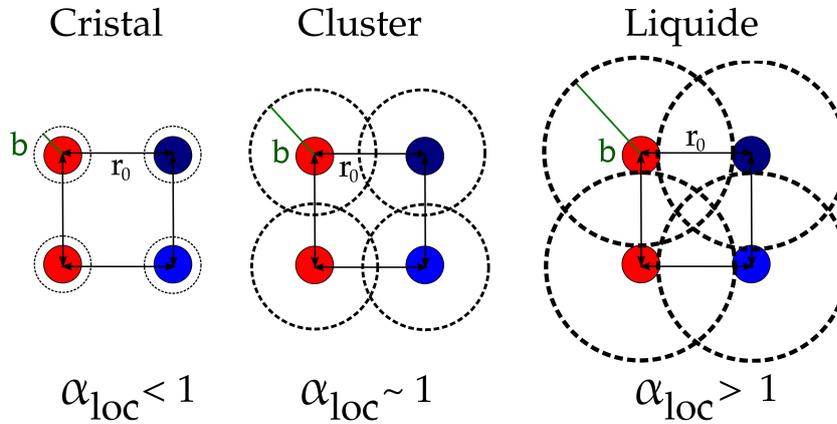


FIGURE 3.23 – Représentation schématique des trois phases possibles dans le noyau caractérisé par le paramètre  $\alpha_{\text{loc}}$ .

Pour déterminer une expression analytique approchée du paramètre de localisation on peut dans un premier temps se placer dans l'approximation où l'on considère le système comme analogue à un oscillateur harmonique sphérique, cette approximation rend correctement compte des propriétés de localisation et de clusterisation dans le noyau. Dans ce cas :

$$\alpha_{\text{loc}} = \frac{b}{r_0} = \frac{\sqrt{\hbar}A^{\frac{1}{6}}}{(2mV_0r_0^2)^{1/4}} \quad (3.89)$$

Où l'on a pris pour l'extension des fonctions d'ondes la longueur caractérisant l'oscillateur  $b = \frac{\sqrt{\hbar}}{m\omega_0}$  et on fixe  $r_0 = 1.25\text{fm}$  (correspondant à la distance moyenne entre

nucléons dans une sphère homogène de densité  $\rho = \rho_{\text{sat}} \simeq 0.16 \text{fm}^{-3}$ . Dans cette même formule  $A$  indique le nombre de nucléons,  $m$  la masse d'un nucléon et  $V_0$  la profondeur du potentiel harmonique. Les états présentant des agrégats correspondent au régime où l'extension des fonctions d'ondes individuelles est de la même taille que la distance internucléons, dans ce cas le paramètre vaut  $\alpha_{\text{loc}} \simeq 1$ . La dépendance en  $A^{1/6}$  implique que les clusters se forment préférentiellement dans les noyaux légers et que la frontière entre noyaux de type cluster et de type liquide quantique se situe autour de  $A = 20 - 30$  ce qui semble correspondre aux résultats expérimentaux. Ce premier succès nous encourage à généraliser l'expression de ce paramètre, en effet l'extension spatiale de systèmes de tailles finies dépend par définition des nombres quantiques des états de particules individuelles. De plus il est fondamental de remarquer[EKNcvacV13] que le paramètre  $b$  est directement relié à la dispersion spatiale selon

$$b = 2\Delta r \quad \text{Où} \quad \Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} \quad (3.90)$$

En se plaçant toujours dans l'approximation d'oscillateur harmonique on peut déterminer l'expression formelle de la dispersion, d'une part le terme  $\langle r^2 \rangle$  s'exprime simplement

$$\langle r^2 \rangle = b^2 \left( N + \frac{3}{2} \right) = b^2 \left( 2n' + l + \frac{3}{2} \right) \quad (3.91)$$

Ou, adoptant les notations usuelles,  $N = 2(n - 1) + l$  est le nombre quantique principal et on définit  $n' \equiv n - 1$ . Malheureusement le terme  $\langle r \rangle$  est bien plus pénible à exprimer et prend la forme

$$\frac{\langle r \rangle}{b} = \sum_{q=0}^{n'} \frac{(-1)^q (l+q+1)! \Gamma(n'-q-\frac{1}{2})}{q! (n'-q)! \Gamma(l+q+\frac{3}{2}) \Gamma(-q-\frac{1}{2})} \quad (3.92)$$

Ou  $\Gamma$  désigne la fonction d'Euler. On peut représenter en Figure 3.24  $\Delta_r$  construit à partir des équations (3.91) et (3.92) en fonction du moment orbital angulaire pour un noyau lourd, le Californium 288, afin de comprendre l'évolution de la dispersion pour de grandes plages de valeurs de  $n$  dans l'approximation d'oscillateur harmonique.

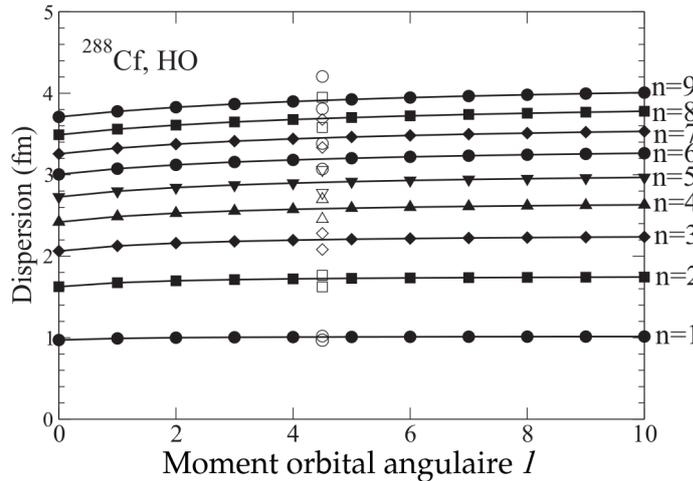


FIGURE 3.24 – Dispersion radiale des fonctions d'ondes du  $^{288}\text{Cf}$  modélisé par un oscillateur harmonique (symboles pleins). Dispersion minimale et maximale pour chaque  $n$  dans le cadre des approximations (3.94) et (3.97) (symboles vides)

Cette figure indique que la dispersion dépend principalement du nombre quantique radial  $n$ , mais peu du nombre quantique orbital  $l$ , on peut donc simplifier (3.92) en considérant deux cas de figures.

- Considérons les seuls états de  $l = 0$  l'expression (3.92) se simplifie pour devenir

$$\frac{\langle r \rangle}{b} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{(2n' + 1)!!}{(2n')!!} \quad (3.93)$$

La dispersion (3.90) pour  $l = 0$  devient donc

$$\left(\frac{\Delta r}{b}\right)^2 = \left(2 - \frac{5}{\pi}\right) n' + \left(\frac{3}{2} - \frac{4}{\pi}\right) \quad (3.94)$$

- Prenons dans ce cas la limite des grands moments orbitaux  $l$ , dans cette limite on peut utiliser l'approximation [AS64]

$$\frac{(l + q + 1)!}{\gamma(l + q + \frac{3}{2})} \simeq \sqrt{l} + \frac{1}{\sqrt{l}} \left(\frac{q}{2} + \frac{5}{8}\right) \quad (3.95)$$

Ainsi (3.92) devient

$$\frac{\langle r \rangle}{b} = \sqrt{l} + \frac{1}{\sqrt{l}} \left(\frac{3n'}{4} + \frac{5}{8}\right) \quad (3.96)$$

Et par conséquent la dispersion dans la limite des grands  $l$  devient

$$\left(\frac{\Delta r}{b}\right)^2 \simeq \frac{n'}{2} + \frac{1}{4} \quad (3.97)$$

Les dispersions extrémales correspondant aux approximation (3.94) et (3.97) sont représentées par les symboles vides sur la Figure 3.24. On constate de nouveau le faible impact du nombre quantique orbital  $l$  sur la dispersion radiale. On peut à présent obtenir à partir des équations (3.89) et (3.97) un paramètre de localisation généralisé

$$\tilde{\alpha}_{\text{loc}} \equiv \frac{b}{r_0} \sqrt{2n - 1} = \frac{\sqrt{\hbar(2n - 1)}}{(2mV_0 r_0^2)^{1/4}} A^{1/6} \quad (3.98)$$

A présent (3.98) dépend non seulement des paramètres de l'oscillateur mais surtout du nombre de nucléons ainsi que du nombre quantique radial de l'état considéré. De nouveau on note que pour les noyaux légers  $A \leq 30$  et dont le nombre quantique des états occupés vaut 1 le paramètre de localisation vaudra  $\tilde{\alpha}_{\text{loc}} \leq 1$  traduisant une forte probabilité de présence de clusters. Pour des noyaux plus lourds possédant des états de nombre quantique radial  $n > 1$  les états sphériques sont grandement délocalisés ce qui explique le comportement de type liquide quantique de ces éléments. Cette description est cohérente avec notre représentation schématique naïve présentée en Figure (3.23).

### Influence de la déformation sur la dispersion

Il est également intéressant de quantifier l'impact de la déformation nucléaire sur la dispersion, en effet la déformation favorisant la formation de cluster??, le paramètre de localisation devrait y-être sensible. On calcule cette fois le paramètre de localisation microscopiquement, dans le cadre de notre code RMF (on néglige l'appariement, pour dissocier et comprendre l'effet de la seule déformation). On se focalise sur le calcul de la seule dispersion des états de valences du noyau, états où les agrégats ont tendance à se former comme vu précédemment lors des études qualitatives des densités du Néon 20. Sur la Figure 3.25 on peut voir l'évolution des énergies de particules individuelles des états neutroniques occupés du  $^{20}\text{Ne}$  en fonction de la déformation quadripolaire, la dispersion du dernier état occupé ainsi que les densités du dernier état occupé pour les minima et maxima de la dispersion.

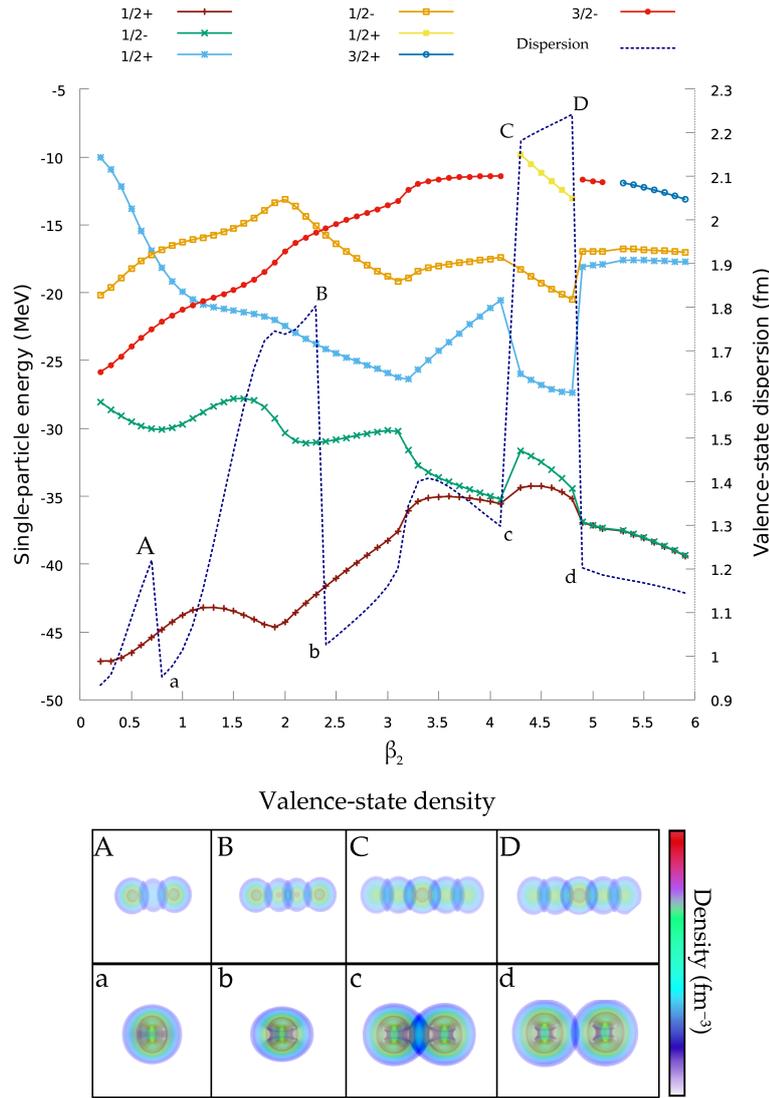


FIGURE 3.25 – Évolution des états neutroniques occupés des blocs de spin-parité du  $^{20}\text{Ne}$  dans une approche RMF (traits pleins), dispersion de la fonction d’onde du dernier état occupé (trait bleu en pointillés). Le panel du bas présente les densités des neutrons de valences pour les déformations correspondants aux minima (a,b,c,d) et maxima (A,B,C,D) de la dispersion

On remarque sur cette figure que la dispersion diminue avec la déformation jusqu’à ce que l’on arrive à un croisement de niveaux pour le dernier état occupé. La plus grande augmentation de la dispersion spatiale advient pour une déformation où l’état  $\frac{1}{2}^+$  (issu du niveau sphérique  $2s\frac{1}{2}$ ) devient occupé. La dispersion est ainsi augmentée d’un facteur  $\simeq 1.7$  ce qui correspond précisément au facteur prédit (3.97) pour la dispersion d’un état d’oscillateur harmonique lors du passage d’un niveau de  $n = 1$  à un niveau  $n = 2$  au niveau de l’oscillateur harmonique 3.98. En observant les densités de valence on remarque que la localisation est bien directement liée à la dispersion, lorsque la dispersion est faible les états sont bien localisés tandis que pour des états de dispersion plus grande (aux points C et D de la Figure 3.25 particulièrement) l’état est plus dilué spatialement. Cette étude tend à prouver que l’étude microscopique de la dispersion, prise comme une variable au niveau du champ-moyen donne une indication fiable quant à la localisation des fonctions d’ondes condition qui favorise l’apparition de clusters. On peut systématiser cette étude à l’ensemble des noyaux pairs-pairs pour déterminer quels sont les éléments où il est probable d’avoir une

préformation d'agrégats. En Figure 3.26 on représente dans le plan N-Z, les noyaux pairs-pairs que l'on étudie dans la cadre d'une approche RHB. Les noyaux dont la dispersion des états de valences<sup>3</sup> protons et neutrons est particulièrement faible (de l'ordre du fermi) sont indiqués en rouge.

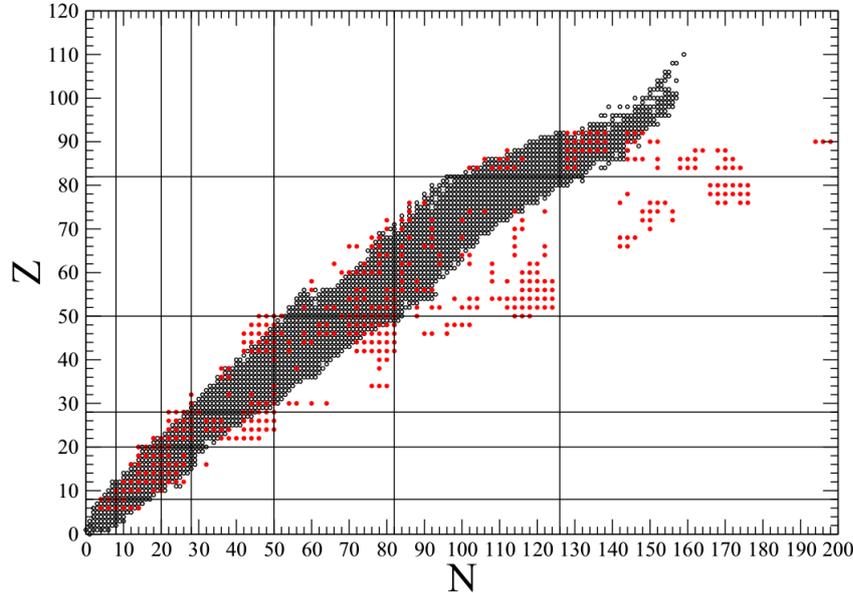


FIGURE 3.26 – Représentation où les noyaux dont la dispersion des états de valence est faible (cercles rouges) sont superposés au noyaux expérimentalement connus dans le plan N-Z. La dispersion est calculée dans le cadre d'une approche RHB axiale ou l'on adopte la paramétrisation DD-ME2 ainsi qu'une interaction d'appariement de portée finie.

On remarque sur cette figure que la condition de localisation des états de valence comprise comme une condition à la préformation de clusters, est bien valide pour les noyaux légers, ou l'on s'attend à les observer. Mais cette condition est également satisfaite pour des noyaux plus lourds en concordance avec les noyaux émetteurs  $\alpha$  ou émetteurs clusters. Ainsi on prédit dans le cadre de l'étude de notre paramètre de localisation, une préformation possible d'agrégats au sein du  $^{212}\text{Po}$  en accord avec l'expérience [APP<sup>+</sup>10]. Cette carte n'est pas à prendre comme une carte d'états clusterisés mais plus comme une preuve de principe que l'on peut, dans le cadre d'un formalisme unifié, décrire sur un pied d'égalité l'ensemble des noyaux tout en distinguant états clusters et états de type liquide quantique. Avec ce paramètre de localisation et notre mesure de localisation nous sommes à même d'étudier systématiquement les résultats d'un calcul champ-moyen et conclure quand à la probabilité d'observer des clusters. A présent que nous sommes en mesure d'identifier des possibles clusters et de connaître leur position dans le plan N-Z [EKL<sup>V</sup>18] il nous faut encore décrire le mécanisme physique à l'origine de la transition entre état cluster et état de type liquide quantique, c'est l'objet de la section suivante.

## 3.5 Transition de phases quantiques

### 3.5.1 D'une symétrie continue à une symétrie discrète

Pour comprendre en détail la transition entre phase liquide et clusters on se propose d'étudier l'Oxygène 16. De prime abord un noyau à double couche fermée

3. Dans notre cas on définit un état de valence comme un état dont le facteur d'occupation  $v^2 > 1$

comme l' $^{16}\text{O}$  devrait être sphérique dans le référentiel intrinsèque, comme vu précédemment. Toutefois structurellement, on peut imaginer dans le cadre du modèle de clusters  $\alpha$  de Bloch-Brink [D.M66] que l'Oxygène 16 est en fait une superposition de 4 clusters  $\alpha$ . L'idée à l'origine de cette modélisation réside dans la possibilité pour les nucléons de former des quartets spatialement localisés constitués de paires de protons et neutrons de moment angulaire total nul. Spatialement la structure la plus simple que l'on peut envisager pour agencer ces agrégats serait un tétraèdre régulier dont les 4 sommets sont occupés par une particule  $\alpha$ . Dans le cadre d'une approche de type champ-moyen, une telle transition de forme s'interprète comme une brisure de la symétrie rotationnelle vers une symétrie ponctuelle tétraédrique par l'intermédiaire d'une déformation prolata. En termes de théorie des groupes on interprète donc ce changement de forme comme la brisure de symétries continues en une symétrie ponctuelle, comme schématisé en Figure 3.27. Pour comprendre au mieux cette transition

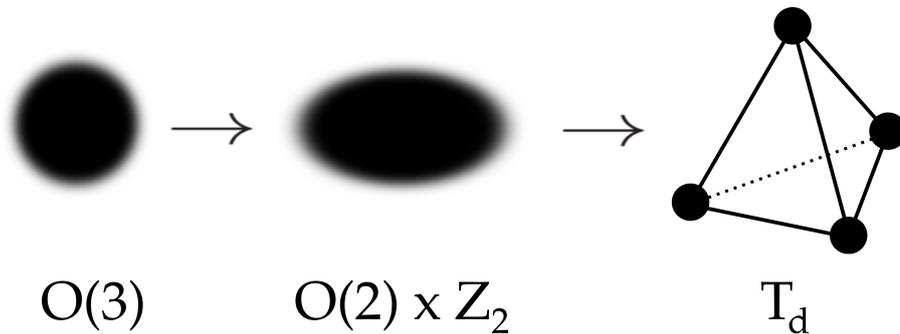


FIGURE 3.27 – Représentation schématique du passage d'une forme sphérique correspondant au groupe de rotation  $O(3)$ , au groupe ponctuel tétraédrique  $T_d$

il est nécessaire de revenir sur les propriétés spécifiques des groupes de symétries ponctuelles. Un groupe ponctuel de symétrie est un sous-groupe d'un groupe orthogonal, c'est à dire qu'il est composé d'isométries qui laissent invariantes distances et angles. Dans notre cas nous voulons exhiber le groupe décrivant la structure de plus haute symétrie ponctuelle composé de 4 sommets. Cette structure géométrique est décrite par le groupe ponctuel tétraédrique chiral,  $T_d$ . Ce groupe possède 24 éléments se scindant en 5 classes. Toutefois ce seul groupe ne suffit pas à décrire totalement le problème, en effet l'énergie d'une configuration tétraédrique est identique à celle obtenue en appliquant une transformation de parité (autrement dit une symétrie miroir) 3.28.

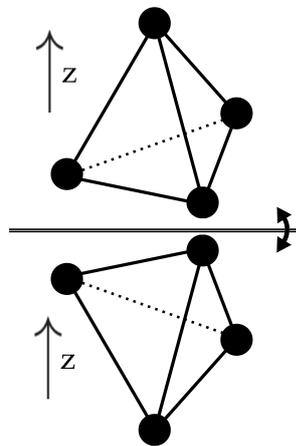


FIGURE 3.28 – Symétrie miroir appliquée à la configuration tétraédrique

Pour décrire totalement le système il faut utiliser le double groupe  $T_d$  possédant 48 éléments et se décomposant en huit classes. Cette décomposition doit trouver un écho expérimental au niveau des propriétés spectroscopiques, les dégénérescences des états occupés correspondrait à la structure de ce groupe de symétrie [DDD<sup>+</sup>07]. De nombreuses méthodes (*IBM* [*Interacting Bosonic Model*] [BI14] ou *ACM* [*Algebraic Cluster Model*] [BI17] exploitant ces considérations de symétries rendent compte avec succès des propriétés spectrales de  $^{16}\text{O}$ . Dans le cadre d'une approche de type champ-moyen relativiste toutefois, le degré de liberté fondamental étant les nucléons du milieu, on peut également étudier ce système en étudiant les formes émergentes les plus favorisés énergétiquement.

### 3.5.2 Oxygène 16 : Résultats du champ-moyen

On utilise le code triaxial octupolaire développé et décrit précédemment pour étudier l'évolution de cet isotope. L'état fondamental de ce noyau est bien une sphère dont l'énergie de liaison est  $E_{\text{RHB}}^{(GS)} = -127.7$  MeV. Pour étudier les autres formes énergétiquement favorisés on contraint le rayon du noyau ce qui permet de faire évoluer la densité du noyau. Tous les autres moments de la distribution de matière étant laissés libres le système est à même d'adopter la forme abaissant le plus son énergie de liaison totale. Les résultats de cette analyse sont présentés en Figure 3.29. Sur cette

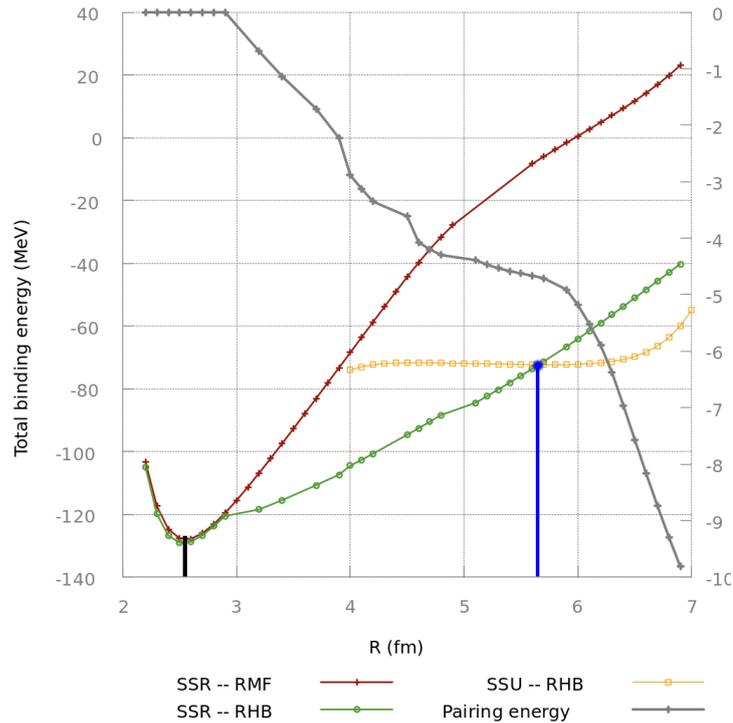


FIGURE 3.29 – Évolution de l'énergie totale de  $^{16}\text{O}$  lorsque l'on augmente son rayon. Le trait noir indique l'état fondamental du système, le trait bleu indique la transition entre distribution continue et distribution tétraédrique. Trois approches sont présentées, un calcul sphérique sans appariement (en rouge) un calcul sphérique avec appariement (en vert) l'énergie d'appariement associée est représentée en gris, un calcul où l'on n'impose aucune symétrie (en jaune)

dernière figure, on effectue trois calculs en champ-moyen relativistes différents pour différents rayon du noyau :

- Un calcul où l'on impose la sphéricité et où l'on néglige l'appariement *SSR-RMF* (*Spatial Symmetry Breaking*–RMF)

- Un calcul où la sphéricité est toujours imposée mais où l'on prend en compte l'appariement dans l'approche Bogolioubov (*SSR-RMF (Spatial Symmetry Breaking–RHB)*)
- Un calcul où l'appariement est pris en compte mais où l'on impose aucune symétrie spatiale (*SSU-RHB (Spatial Symmetry Unrestricted–RHB)*)

L'état d'énergie minimale correspond bien à une sphère de rayon  $R_{RHB}^{(GS)} = 2.7\text{fm}$  ou l'appariement, lorsque l'on augmente artificiellement le rayon on commence par conserver la sphéricité de la distribution. En continuant d'augmenter le rayon jusqu'à une valeur critique  $R_{RHB}^{(\text{Critique})} = 5.8\text{ fm}$ , il devient plus favorable énergétiquement d'adopter une configuration déformée de moments  $\beta_2$  et  $\beta_{32}$  non nuls. Les densités nucléaires qui correspondent aux rayons  $R_{\text{rms}}^{(GS)}$  et  $R_{\text{rms}}^{(\text{Critique})}$  sont tracés en Figure (3.30). Sur cette figure on constate la transition entre les formes sphériques et tétra-

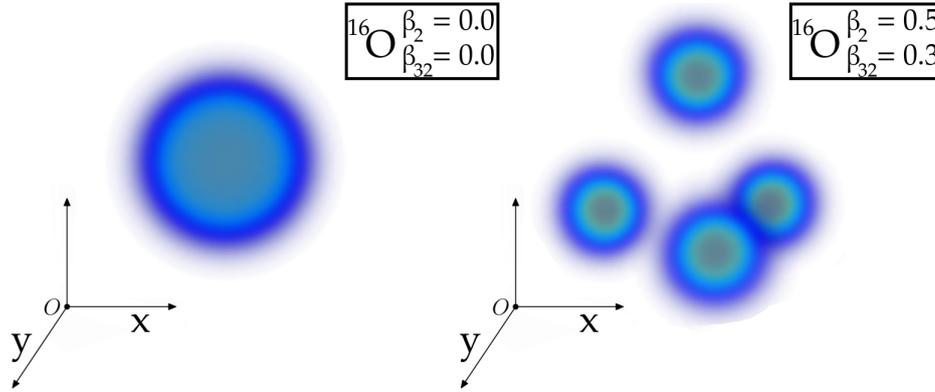


FIGURE 3.30 – Densité de l' $^{16}\text{O}$  dans le référentiel intrinsèque, à gauche densité de l'état fondamental à droite densité tétraédrique au point critique correspondant au rayon  $R_{\text{rms}}^{(\text{Critique})} = 5.9$

édriques exactement à l'image de ce que l'on pouvait attendre au vu de notre analyse en terme de théories des groupes. On peut en toute rigueur décrire cette transition de forme en termes de transition de phase quantique. La théorie des transitions de phases Mott [RSMS83] appliquée à l'étude des noyaux atomiques prédit qu'une transition de phases à lieu à un point critique en densité  $\rho^{(\text{Critique})} = \rho^{(GS)}/10$ . Avec les rayons de l'état fondamental et du point critique obtenus dans le cadre de notre approche relativiste on peut calculer le ratio

$$\frac{\rho_{RHB}^{(\text{Critique})}}{\rho_{RHB}^{(GS)}} = \left( \frac{R_{RHB}^{(GS)}}{R_{RHB}^{(\text{Critique})}} \right)^3 = \left( \frac{2.7}{5.8} \right)^3 = 0.1 \quad (3.99)$$

La transition de formes de notre modèle a ainsi exactement lieu pour la valeur du rayon nucléaire correspondant à la théorie de Mott. Le paramètre d'ordre permettant de décrire cette transition est le module du moment tétraédrique  $|Q_{32}|$ , la transition n'est pas progressive et l'on passe bien de manière discontinue de la phase sphérique à la phase tétraédrique, comme on peut le voir en Figure 3.31. Un autre point important dans ce cadre est la transition entre phases superfluides et phases non-superfluides. Comme on le voit en figure 3.29, lorsque l'on augmente le rayon, on passe très vite, pour un rayon  $R_{\text{rms}} = 3.0\text{ fm}$  dans une phase superfluide, où l'énergie d'appariement devient non nulle puis croît continuellement avec le rayon pour atteindre juste avant la transition vers le tétraèdre une valeur  $E_{\text{pair}} \simeq 4.7\text{ MeV}$ . Toutefois lorsque la distribution de matière change de forme, les corrélations d'appariement cessent de jouer un rôle et l'on repasse dans une phase non-superfluide. Cette transition se comprend

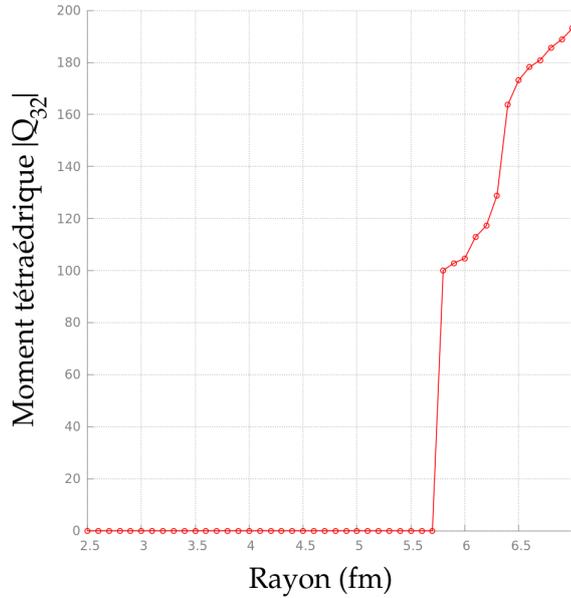


FIGURE 3.31 – Évolution du moment tétraédrique en fonction du rayon dans le cadre de l’approche RHB, la transition a lieu pour  $R_{\text{rms}}^{(\text{Critique})} = 5.9$ .

en terme énergétique, l’intensité des corrélations d’appariement étant fonction de la densité de niveaux dans le noyau lorsque la dégénérescence liée à la sphéricité est levée, cette densité de niveaux diminue et par conséquent l’appariement s’annule. C’est précisément ce que l’on observe dans le cadre de cette étude de l’Oxygène 16. Toutefois il est intéressant d’étudier plus en détail l’influence des corrélations particules-particules, et donc entre autre de l’appariement sur la structure des observables nucléaires. En particulier, leur impact, sur les propriétés de localisation et en conséquence sur l’émergence d’agrégats nucléaires, c’est l’objet du chapitre suivant.

### 3.5.3 Conclusions

Dans ce chapitre nous avons introduit le formalisme nécessaire à la compréhension des phénomènes de brisures de symétries dans l’approche des méthodes fonctionnelles de la densité. L’intérêt et l’impact formel d’une telle brisure de symétrie a été discutée. En particulier le formalisme des déformations spatiales a été présenté dans le cas des systèmes axiaux, octupolaires et triaxiaux puis implémenté afin de construire un ensemble d’outils permettant de résoudre les équations de Hartree-Boglioubov dans un cadre covariant. De nombreuses optimisations numériques ont été apportées afin de s’assurer de l’obtention des solutions optimales tout en minimisant le temps de calcul. La prise en compte de contraintes spatiales permettant d’obtenir des configurations déformées et de calculer des PES a été discutée et des algorithmes bio-mimétiques ont été développés et implémentés afin de pouvoir obtenir en un temps minimal des configurations sous multiples contraintes. Dans le cadre de ce formalisme, l’émergence d’agrégats nucléaires, les clusters, a été discutée particulièrement pour les noyaux légers et une mesure de localisation a été formalisée et implémentée afin d’identifier la présence de ces clusters. Pour expliquer l’origine microscopique de l’agrégation nous avons introduit un paramètre de localisation, qui quantifie la dispersion des fonctions d’ondes individuelles au sein du noyau pouvant contribuer à l’émergence de clusters. Ce paramètre nous a permis d’identifier les noyaux pouvant potentiellement présenter une préformation d’agrégats dans l’état fondamental. Ces noyaux sont aussi bien des noyaux légers dont le

caractère "clusterisé" est connu expérimentalement que des noyaux plus lourds, ce qui tend à indiquer que la préformation d'agrégats est l'une des conditions pour qu'un noyau soit un émetteur  $\alpha$  ou un émetteur de radioactivité cluster. Enfin l'agrégation nucléaire a été étudiée en tant que transition de phase et en tant que passage d'une symétrie continue à une symétrie ponctuelle. En particulier la formation de clusters  $\alpha$  dans l'Oxygène 16 a été étudiée dans un cadre relativiste mettant en évidence une transition de phase quantique au sens de Mott au niveau de la densité à 1-corps. Cette transition de forme s'accompagne d'une transition d'une phase superfluide sphérique à une phase non-superfluide tétraédrique tendant à mettre en exergue l'impact des corrélations particules-particules sur la géométrie des systèmes nucléaires et sur la formation des clusters en particulier.

### 3.6 Références

- [AAR16] S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev, and P. Ring. Octupole deformation in the ground states of even-even nuclei : A global analysis within the covariant density functional theory. *Phys. Rev. C*, 93 :044304, Apr 2016. [80](#)
- [APP<sup>+</sup>10] A. Astier, P. Petkov, M.-G. Porquet, D. S. Delion, and P. Schuck. Novel manifestation of  $\alpha$ -clustering structures : New " $\alpha + {}^{208}\text{Pb}$ " states in  ${}^{212}\text{Po}$  revealed by their enhanced  $e1$  decays. *Phys. Rev. Lett.*, 104 :042701, Jan 2010. [103](#)
- [AS64] M. Abramovitz and I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, Mineola, NY, 1964. [101](#)
- [BBH<sup>+</sup>87] D M Brink, B Buck, R Huby, M A Nagarajan, and N Rowley. Rotational bands in deformed nuclei. *Journal of Physics G : Nuclear Physics*, 13(5) :629, 1987. [73](#)
- [BE90] A. D. Becke and K. E. Edgecombe. A simple measure of electron localization in atomic and molecular systems. *The Journal of Chemical Physics*, 92(9) :5397–5403, 1990. [94](#)
- [BHR03] Michael Bender, Paul-Henri Heenen, and Paul-Gerhard Reinhard. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. *Rev. Mod. Phys.*, 75 :121–180, Jan 2003. [v, 70](#)
- [BI14] R. Bijker and F. Iachello. Evidence for tetrahedral symmetry in  ${}^{16}\text{O}$ . *Phys. Rev. Lett.*, 112 :152501, Apr 2014. [105](#)
- [BI17] R. Bijker and F. Iachello. The algebraic cluster model : Structure of  ${}^{16}\text{O}$ . *Nuclear Physics A*, 957 :154 – 176, 2017. [105](#)
- [BN96] P. A. Butler and W. Nazarewicz. Intrinsic reflection asymmetry in atomic nuclei. *Rev. Mod. Phys.*, 68 :349–421, Apr 1996. [80](#)
- [But16] P A Butler. Octupole collectivity in nuclei. *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, 43(7) :073002, 2016. [81](#)
- [BW97] R R Betts and A H Wuosmaa. Nuclear molecules. *Reports on Progress in Physics*, 60(8) :819, 1997. [93](#)
- [DDD<sup>+</sup>07] J. DUDEK, J. DOBACZEWSKI, N. DUBRAY, A. GÓŹDŹ, V. PAN-GON, and N. SCHUNCK. Nuclei with tetrahedral symmetry. *International Journal of Modern Physics E*, 16(02) :516–532, 2007. [105](#)

- [DHHS15] T. Duguet, H. Hergert, J. D. Holt, and V. Somà. Nonobservable nature of the nuclear shell structure : Meaning, illustrations, and consequences. *Phys. Rev. C*, 92 :034313, Sep 2015. [98](#)
- [D.M66] Brink D.M. Alpha cluster model. proceedings of the international school of physics enrico fermi, 1966. [104](#)
- [EKLV18] J.-P. Ebran, E. Khan, R.-D. Lasserri, and D. Vretenar. Single-particle spatial dispersion and clusters in nuclei. *Phys. Rev. C*, 97 :061301, Jun 2018. [103](#)
- [EKNvacV13] J.-P. Ebran, E. Khan, T. Nikšić, and D. Vretenar. Localization and clustering in the nuclear fermi liquid. *Phys. Rev. C*, 87 :044307, Apr 2013. [99](#), [100](#)
- [EKNV12] J.-P. Ebran, E. Khan, T. Niksic, and D. Vretenar. How atomic nuclei cluster. *Nature*, 487 :341 EP –, Jul 2012. [94](#), [98](#)
- [GMR07] Lu Guo, J. A. Maruhn, and P.-G. Reinhard. Triaxiality and shape coexistence in germanium isotopes. *Phys. Rev. C*, 76 :034317, Sep 2007. [83](#)
- [GRJ<sup>+</sup>15] L. P. Gaffney, A. P. Robinson, D. G. Jenkins, A. N. Andreyev, M. Bender, A. Blazhev, N. Bree, B. Bruyneel, P. A. Butler, T. E. Cocolios, T. Davinson, A. N. Deacon, H. De Witte, D. DiJulio, J. Diriken, A. Ekström, Ch. Fransen, S. J. Freeman, K. Geibel, T. Grahn, B. Hadinia, M. Hass, P.-H. Heenen, H. Hess, M. Huysse, U. Jakobsson, N. Kesteloot, J. Konki, Th. Kröll, V. Kumar, O. Ivanov, S. Martin-Haugh, D. Mücher, R. Orlandi, J. Pakarinen, A. Petts, P. Peura, P. Rahkila, P. Reiter, M. Scheck, M. Seidlitz, K. Singh, J. F. Smith, J. Van de Walle, P. Van Duppen, D. Voulot, R. Wadsworth, N. Warr, F. Wenander, K. Wimmer, K. Wrzosek-Lipska, and M. Zielińska. Collectivity in the light radon nuclei measured directly via coulomb excitation. *Phys. Rev. C*, 91 :064313, Jun 2015. [81](#)
- [GRT90] Y.K Gambhir, P Ring, and A Thimet. Relativistic mean field theory for finite nuclei. *Annals of Physics*, 198(1) :132 – 179, 1990. [77](#)
- [HT38] L. R. Hafstad and E. Teller. The alpha-particle model of the nucleus. *Phys. Rev.*, 54 :681–692, Nov 1938. [92](#)
- [KBD<sup>+</sup>76] T.L. Khoo, F.M. Bernthal, C.L. Dors, M. Piiparinen, S. Saha, P.J. Daly, and J. Meyer-Ter-Vehn. Evidence for triaxial shapes in pt nuclei. *Physics Letters B*, 60(4) :341 – 343, 1976. [83](#)
- [KEKH03] Yoshiko Kanada-En’yo, Masaaki Kimura, and Hisashi Horiuchi. Antisymmetrized molecular dynamics : a new insight into the structure of nuclei. *Comptes Rendus Physique*, 4(4) :497 – 520, 2003. [93](#)
- [LS84] G.A. Leander and R.K. Sheline. Intrinsic reflection asymmetry in odd-a nuclei. *Nuclear Physics A*, 413(3) :375 – 415, 1984. [84](#)
- [LVI<sup>+</sup>09] M. Lebois, D. Verney, F. Ibrahim, S. Essabaa, F. Azaiez, M. Cheikh Mhamed, E. Cottureau, P. V. Cuong, M. Ferraton, K. Flanagan, S. Franchoo, D. Guillemaud-Mueller, F. Hammache, C. Lau, F. Le Blanc, J. F. Le Du, J. Libert, B. Mougnot, C. Petrache,

- B. Roussière, L. Sagui, N. de Séréville, I. Stefan, and B. Tastet. Experimental study of  $^{84}\text{Ga}$   $\beta$  decay : Evidence for a rapid onset of collectivity in the vicinity of  $^{78}\text{Ni}$ . *Phys. Rev. C*, 80 :044308, Oct 2009. [83](#)
- [MacEK<sup>+</sup>18] P. Marević, J.-P. Ebran, E. Khan, T. Nikšić, and D. Vretenar. Quadrupole and octupole collectivity and cluster structures in neon isotopes. *Phys. Rev. C*, 97 :024334, Feb 2018. [vi](#), [96](#), [97](#)
- [McC05] John McCall. Genetic algorithms for modelling and optimisation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 184(1) :205 – 222, 2005. Special Issue on Mathematics Applied to Immunology. [89](#)
- [Mit98] Melanie Mitchell. *An Introduction to Genetic Algorithms*. MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1998. [89](#)
- [Mot96] B. Mottelson. Nuclear structure, les houches, 1996. [99](#)
- [NcvacRV<sup>+</sup>10] T. Nikšić, P. Ring, D. Vretenar, Yuan Tian, and Zhong-yu Ma. 3d relativistic hartree-bogoliubov model with a separable pairing interaction : Triaxial ground-state shapes. *Phys. Rev. C*, 81 :054318, May 2010. [v](#), [86](#)
- [NPVR14] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, and P. Ring. Dirhb—a relativistic self-consistent mean-field framework for atomic nuclei. *Computer Physics Communications*, 185(6) :1808 – 1821, 2014. [78](#), [83](#)
- [PBM<sup>+</sup>18] Deepak Pandit, Srijit Bhattacharya, Debasish Mondal, Pratap Roy, K. Banerjee, S. Mukhopadhyay, Surajit Pal, A. De, Balaram Dey, and S. R. Banerjee. Experimental signature of collective enhancement in nuclear level density. *Phys. Rev. C*, 97 :041301, Apr 2018. [73](#)
- [Pea01] John A. at al Peacock. A measurement of the cosmological mass density from clustering in the 2df galaxy redshift survey. *Nature*, 410 :169 EP –, Mar 2001. Article. [92](#)
- [PMRZ08] J. Peng, J. Meng, P. Ring, and S. Q. Zhang. Covariant density functional theory for magnetic rotation. *Phys. Rev. C*, 78 :024313, Aug 2008. [83](#)
- [PSL<sup>+</sup>17] R. Navarro Perez, N. Schunck, R.-D. Lasserri, C. Zhang, and J. Sarich. Axially deformed solution of the skyrme–hartree–fock–bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis (iii) hfbtho (v3.00) : A new version of the program. *Computer Physics Communications*, 220 :363 – 375, 2017. [76](#), [98](#)
- [RGL97] P. Ring, Y.K. Gambhir, and G.A. Lalazissis. Computer program for the relativistic mean field description of the ground state properties of even-even axially deformed nuclei. *Computer Physics Communications*, 105(1) :77 – 97, 1997. [75](#)
- [RJ84] H. J. Rose and G. A. Jones. A new kind of natural radioactivity. *Nature*, 307 :245 EP –, Jan 1984. [93](#)

- [RMUO11] P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, A. S. Umar, and V. E. Oberacker. Localization in light nuclei. *Phys. Rev. C*, 83 :034312, Mar 2011. [94](#)
- [RSMS83] G. Röpke, M. Schmidt, L. Münchow, and H. Schulz. Particle clustering and mott transition in nuclear matter at finite temperature (ii). *Nuclear Physics A*, 399(2) :587 – 602, 1983. [106](#)
- [SDNR05] M.V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and P. Ring. Axially deformed solution of the skyrme–hartree–fock–bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis. the program hfbtho (v1.66p). *Computer Physics Communications*, 167(1) :43 – 63, 2005. [76](#)
- [SLW17] B. H. Sun, C. Y. Liu, and H. X. Wang. Correlating double-difference of charge radii with quadrupole deformation and  $b(e2)$  in atomic nuclei. *Phys. Rev. C*, 95 :014307, Jan 2017. [73](#)
- [SSBN10] A. Staszczak, M. Stoitsov, A. Baran, and W. Nazarewicz. Augmented lagrangian method for constrained nuclear density functional theory. *The European Physical Journal A*, 46(1) :85–90, Oct 2010. [80](#)
- [Tas11] Benoit Tastet. *Structure des noyaux de gallium, de germanium et d'arsenic riches en neutrons autour de  $N=50$  et Développement d'une source d'ionisation laser à ALTO*. Theses, Université Paris Sud - Paris XI, May 2011. [83](#)
- [TMR09] Yuan Tian, Zhong-yu Ma, and Peter Ring. Separable pairing force for relativistic quasiparticle random-phase approximation. *Phys. Rev. C*, 79 :064301, Jun 2009. [78](#)
- [vOFKE06] W. von Oertzen, Martin Freer, and Yoshiko Kanada-En'yo. Nuclear clusters and nuclear molecules. *Physics Reports*, 432(2) :43 – 113, 2006. [93](#)
- [WAK<sup>+</sup>17] Meng Wang, G. Audi, F.G. Kondev, W.J. Huang, S. Naimi, and Xing Xu. The ame2016 atomic mass evaluation (ii). tables, graphs and references. *Chinese Physics C*, 41(3) :030003, 2017. [79](#), [81](#), [86](#)