



HAL
open science

Ajustements de fonctionnelles de Skyrme généralisées

Robin Jodon

► **To cite this version:**

Robin Jodon. Ajustements de fonctionnelles de Skyrme généralisées. Physique Nucléaire Expérimentale [nucl-ex]. Université Claude Bernard - Lyon I, 2014. Français. NNT: 2014LYO10170 . tel-01158085v2

HAL Id: tel-01158085

<https://hal.in2p3.fr/tel-01158085v2>

Submitted on 30 Jan 2018

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

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

Thèse

présentée devant

l'Université Claude Bernard Lyon 1

École Doctorale de Physique et d'Astrophysique

pour l'obtention du

DIPLÔME de DOCTORAT
Spécialité : Physique théorique

(arrêté du 7 août 2006)

par

Robin Jodon

Ajustements de fonctionnelles de
Skyrme généralisées

Soutenue le 26 septembre 2014
devant la Commission d'Examen

Jury :

M.	G.	Chanfray	Président du jury
Mme	H.	Goutte	Rapporteur
M.	P.-H.	Heenen	Rapporteur
M..	K.	Bennaceur	Directeur de thèse
M.	D.	Davesne	Co-Directeur de thèse
M.	B.	Gall	Membre
M.	M.	Bender	Membre

Ajustements de fonctionnelles de Skyrme généralisées

Robin Jodon
Sous la direction de Karim Bennaceur

Université Claude Bernard Lyon 1

Ajustements de fonctionnelles de Skyrme généralisées

Robin Jodon

La méthode de la fonctionnelle de la densité d'énergie (Energy Density Functional, EDF) est une approche phénoménologique permettant de calculer les propriétés élémentaires des noyaux atomiques (masses, dimensions et formes) à l'approximation du champ moyen. Elle permet également d'obtenir les spectres correspondants à certains états collectifs (vibrationnels et rotationnels) en mettant en œuvre des calculs « au-delà » du champ moyen (avec la méthode de la coordonnée génératrice (GCM) ou le mécanisme de brisure/restauration de symétries). Cette méthode, applicable sur toute la charte des noyaux hormis les plus légers, connaît un regain d'intérêt avec le développement de nouveaux faisceaux radioactifs tels SPIRAL2 au GANIL. Des travaux récents ont montré qu'une description des états collectifs des noyaux nécessitait la modification et la généralisation des formes habituellement utilisées pour la fonctionnelle de la densité d'énergie, notamment avec la suppression de termes dépendants de la densité. Il a également été montré que les fonctionnelles de Skyrme pouvaient conduire à des instabilités et transitions de phases non physiques dans la matière nucléaire et les noyaux, en particulier lorsque le système est autorisé à briser des symétries.

Le but de ce travail de thèse a été d'achever la construction de la fonctionnelle de Skyrme généralisée, initiée par J. Sadoudi (*Constraints on the nuclear energy density functional and new possible analytical forms.*, CEA Saclay, 2011), puis d'en ajuster les paramètres. Le terme dépendant de la densité est remplacé par un potentiel d'interaction à 3 et 4 corps et la fonctionnelle associée est utilisée pour décrire le champ moyen et le champ d'appariement. Il a été nécessaire de construire un nouveau protocole d'ajustement afin de contraindre les paramètres de cette fonctionnelle. En particulier, l'ajustement est fait avec des contraintes sur les instabilités précédemment mentionnées.

Parallèlement à la construction du protocole d'ajustement, l'utilisation de techniques d'analyse covariante a permis, dans un premier temps, d'estimer les erreurs statistiques associées à chaque paramètre ajusté et les barres d'erreurs des observables calculées. Dans un second temps, nous avons étu-

dié les corrélations existantes entre les différentes contraintes choisies dans le protocole, ce qui a permis de mettre en évidence certains défauts de ces nouvelles interactions généralisées.

Enfin, dans un travail annexe, nous avons utilisé des méthodes semi-classiques de type Thomas-Fermi modifiées (MTF) afin de dériver une formule analytique permettant d'estimer la valeur du coefficient d'énergie de surface d'une interaction de Skyrme généralisée. En réajustant les paramètres de la fonctionnelle SLy5 avec une contrainte sur ce coefficient, nous avons montré qu'il était fortement corrélé aux propriétés de fission des actinides. Nous aurons ainsi à notre disposition, grâce à cette estimation du coefficient d'énergie de surface, un outil simple à mettre en œuvre dans des protocoles d'ajustements futurs qui permettra de contraindre les propriétés de fission des noyaux.

Remerciements

Mes premiers remerciements vont à Karim Bennaceur qui a accepté d'encadrer ce travail de thèse. Sa grande disponibilité, sa patience, sa passion pour la recherche, ses encouragements constants et ses qualités humaines m'ont permis de passer trois années à la fois agréables et enrichissantes à l'IPNL. Merci également pour la confiance que tu m'as accordée dès mon premier stage de M1.

Je tiens ensuite à remercier Jacques Meyer pour tous les échanges, parfois très longs, que nous avons pu avoir au cours de ce travail ainsi que pour sa gentillesse sans limites.

Enfin, pour terminer avec les membres de l'équipe de structure nucléaire : merci pour tout Dany. Je devrais commencer par la L3 où tu m'as transmis le virus de la physique avec la mécanique des fluides puis le M2 où tu as pris un malin plaisir à nous faire fondre le cervelet avec la théorie de Ginzburg-Landau, la RPA, le groupe de renormalisation. . . Grâce à toi, je peux désormais briller au PMU du coin en débattant de l'approche de Gibbs ou de Landau sur les transitions de phase. Je ne passerai pas en revue ma découverte de la « vraie » course à pied, celle où on court vite, sans pouvoir se parler, et où l'on passe un sale après-midi à essayer de s'en remettre. Mais ça, c'était le passé, j'ai depuis pu goûter aux joies des podiums, encore une fois, grâce à toi.

Quel plaisir d'avoir fait partie intégrante de cette équipe, que ce soit pour le travail, ou pour les petits « à côté » comme les repas improvisés (saucissons, crottins de chèvres et autres lyonnaiseries. . .) Vous me manquez.

Je remercie doublement Guy Chanfray, d'abord pour l'honneur qu'il m'a fait de présider mon jury mais également pour ses qualités exceptionnelles de pédagogue.

Je tiens à exprimer ma gratitude envers Héloïse Goutte et Paul-Henri Heenen pour avoir accepté la difficile mission d'être rapporteurs de ma thèse. Merci également à Benoît Gall d'avoir accepté d'être membre de mon jury et d'avoir bravé la grève des transports pour être présent le jour de la soutenance.

Pour conclure avec mon jury, je remercie Michael Bender pour sa relecture très (trop) attentive de ce manuscrit. Je suis toujours venu à Bordeaux avec plaisir (on ne peut pas dire ça de toutes les destinations phares de la physique nucléaire : Saclay, Jyväskylä. . .). Quel agréable moment que celui de travailler dans ce splendide bâtiment du CENBG, à l'intérieur duquel le climat Sibérien est un excellent test de résistance pour chaque nouveau venu dans la *dream team* Bordeaux-Saclay-Lyon.

Je dois aussi remercier les thésards de 11h40 : Martin, Jaybee, Seb++, Anne-Laure, Louhiggs, Guillaume, Chris. Je n'oublie pas non plus les chimistes : Gwen, Nico et Mael, même si à eux trois ils comptent à peine pour un physicien. Vous avez sûrement remarqué que j'oubliais Messieurs Pantel et Chasserat, qui du fait de leur lenteur symptomatique de mastication-déglutition ont trop souvent été à l'origine d'une certaine tension nerveuse en fin de repas. Rien de tel pour garder son andouillette-frites sur le ventre jusqu'à 18h.

Pierre-Alexandre, mon presque co-bureau, merci d'avoir supporté mes remarques et questions idiotes. Je trouve qu'on a été assez complémentaires sur nos connaissances de L^AT_EX, du Bash et de notre bon vieux f90. . . Je n'oublierai jamais notre séjour en amoureux au B&B de Gif-sur-Yvette : la

vue sur les embouteillages de la RN118, le petit-déjeuner avec toi en contemplant la pluie, presque quotidienne, tomber sur ce plat et morne pays qu'est le plateau de Saclay.

Il est temps de passer à l'équipe des coureurs avec qui j'ai passé l'autre bonne partie de mes midis : Dany, Patrice, Bruno, Didier, Claude, Yannick, Cyrille, Momo, Nathalie, Olivier, Aldo et bien évidemment Mr. Alain Barracuda. Merci à vous tous. De nombreuses séances resteront gravées à jamais dans ma mémoire.

Avant de terminer avec les membres de l'IPNL, je voudrais remercier Sylvie Florès et les membres du service informatique : Ziane, Clément, Yoan, Martin et Maître SkyAWKer : Noël Giraud.

Merci à l'éminent cardiologue Marc Badoz pour ces six mois de colocation. Tu n'as malheureusement pas choisi la meilleure période pour venir découvrir Lyon. Mon humeur aurait été bien plus festive si tu étais venu lors de ma première ou deuxième année de thèse. Le cri de guerre « Appéééroo » résonne à nouveau au 14 rue C.

Le dernier mot sera évidemment à Flore qui a eu le courage de surmonter avec moi les moments difficiles qu'une thèse peut faire vivre.

Table des matières

Introduction	xi
I. Théories de champ moyen et au-delà	1
1.1. Introduction générale	1
1.1.1. Position du problème	2
1.1.2. Modèle de la goutte liquide	2
1.2. Approches microscopiques et problème à N corps nucléaire	3
1.2.1. Le problème à N corps nucléaire	3
1.2.2. Méthodes <i>ab initio</i>	4
1.2.3. Modèle en couches	4
1.2.4. Approximations du champ moyen et au-delà	5
1.3. Les méthodes du champ moyen	5
1.3.1. La théorie Hartree-Fock (HF)	5
1.3.2. La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)	7
1.3.3. Champ moyen avec contraintes sur la déformation (CHF)	11
1.4. Au-delà du champ moyen	14
1.4.1. L'interaction résiduelle	14
1.4.2. Modes collectifs dans les noyaux	14
1.4.3. La GCM dans un mouchoir de poche	14
II. Interactions et fonctionnelles de Skyrme	17
2.1. Interaction de Skyrme standard	17
2.1.1. Définition	18
2.1.2. Fonctionnelle de Skyrme standard	18
2.1.3. État de l'art - Succès et échecs	21
2.2. Nouvelles interactions de Skyrme généralisées	23
2.2.1. Pseudo-potential avec termes d'interaction à 2, 3 et 4 corps	23
2.2.2. Nouvelle forme de la fonctionnelle	24
2.3. Conclusion	25

III. Protocole d'ajustement des paramètres	27
3.1. Introduction	27
3.1.1. Stratégie	28
3.1.2. Méthode des moindres carrés	29
3.1.3. Algorithmes de minimisation	30
3.2. Contraintes	32
3.2.1. Matière nucléaire infinie symétrique (INM)	32
3.2.2. Matière nucléaire infinie asymétrique (AINM)	36
3.2.3. Matière de neutrons (PNM)	38
3.2.4. Matière infinie polarisée	39
3.2.5. Instabilités dans la matière infinie	39
3.2.6. Noyaux	43
3.2.7. Appariement	45
3.3. Protocole d'ajustement : épilogue	46
IV. Estimation des erreurs dans un modèle physique	49
4.1. Motivations	49
4.2. Définition des différents types d'erreurs	50
4.2.1. Erreur statistique	50
4.2.2. Erreur systématique	51
4.3. Formalisme de l'analyse covariante	51
4.3.1. Hypothèses initiales	51
4.3.2. Matrice de covariance	52
4.3.3. Matrice de corrélation	52
4.4. Modèle simplifié d'ajustement des paramètres	53
4.4.1. Présentation du modèle	53
4.4.2. Ajustement avec un modèle exact	53
4.4.3. Ajustement avec un modèle approché	55
4.4.4. Conclusion	56
V. Propriétés de surface de l'interaction de Skyrme	59
5.1. Introduction	60
5.1.1. La matière nucléaire semi-infinie (SINM)	60
5.1.2. Énergie de surface	61
5.2. Formalisme de Skyrme Hartree-Fock dans la matière semi-infinie	62
5.2.1. Équations de Hartree-Fock	62
5.2.2. Densités	63
5.2.3. Solutions des équations de Skyrme Hartree-Fock	63
5.2.4. Extraction de l'énergie de surface	64
5.3. Méthodes semi-classiques	65
5.3.1. Motivations	65
5.3.2. Méthode de Thomas-Fermi étendue (ETF)	65
5.3.3. Méthode de Thomas-Fermi modifiée (MTF)	68
5.4. Résultats	71
5.4.1. Comparatifs MTF vs HF et ETF4	71
5.4.2. Masse effective et renormalisation du développement MTF	73
5.4.3. Corrélations entre énergie de surface et barrières de fission	75
5.5. Conclusion	77

VI. Résultats	79
6.1. Introduction	80
6.2. Analyse covariante et étude de sensibilité	80
6.2.1. Paramétrisation SLyMR1 $_{\beta}$	80
6.2.2. Corrélations entre les paramètres de la force	81
6.2.3. Analyse de sensibilité	84
6.3. Construction de nouvelles paramétrisations	91
6.3.1. Les échecs de SLyMR1 $_{\beta}$	91
6.3.2. Amélioration du protocole d'ajustement	92
6.3.3. Paramétrisations SLyMR1 et SLyMR1 $_{3B}$	93
6.4. Matière nucléaire infinie	95
6.4.1. Matière symétrique	97
6.4.2. Matière de neutrons	99
6.4.3. Matières polarisées	99
6.4.4. Instabilités	99
6.5. Matière nucléaire semi-infinie	100
6.5.1. Champs de la fonctionnelle	100
6.5.2. Énergie de surface	102
6.6. Propriétés des noyaux	102
6.6.1. Densités	102
6.6.2. Champs	102
6.6.3. Énergies de liaison	103
6.6.4. Prédications dans les noyaux riches en neutrons	106
6.6.5. Gaps d'appariement	106
6.6.6. Énergies des particules individuelles	108
Conclusion et perspectives	111
A. Constantes de couplage de la fonctionnelle de Skyrme	115
B. Densité de spin-orbite $J_{\mu\nu}(\vec{r})$ dans la matière nucléaire semi-infinie	119
C. Propriétés des interactions SLy5sX	121
Bibliographie	127

Introduction

La physique nucléaire est née à la suite de la découverte d'un noyau atomique chargé par Rutherford [1] en 1911. Quelques années plus tard, il identifia le proton, mais il a fallu attendre 1932 pour que Chadwick mette en évidence l'existence du neutron [2]. Une fois les constituants du noyau identifiés, les physiciens ont alors commencé à proposer des modèles théoriques pour décrire ses propriétés statiques et dynamiques. Il y a tout d'abord eu le modèle de la goutte liquide [3] offrant une description satisfaisante des masses et également capable de donner une première interprétation à la fission des noyaux. Ensuite, la première approche microscopique vit le jour : le modèle en couches [4]. C'est le premier modèle à reposer sur l'hypothèse de particules quantiques indépendantes. Il a permis l'interprétation des « nombres magiques ». Cependant, le noyau étant considéré comme statique, le modèle en couches ne pouvait pas reproduire les données expérimentales liées aux mouvements collectifs au sein du noyau. Ensuite, des années cinquante à nos jours, des modèles utilisant des interactions effectives (ou lagrangiens) ont été développés. On peut citer, par exemple, les interactions de Skyrme [5], Gogny [6], les modèles de Walecka [7] et FSUGold [8].

Une description quantique du noyau est nécessaire à l'interprétation des nombreux phénomènes rencontrés en physique nucléaire, mais une telle représentation réaliste et complète de l'interaction entre les nucléons est impossible, et ce, pour plusieurs raisons : (i) la forme exacte du potentiel nucléaire entre les nucléons n'est pas connue ; (ii) le noyau forme un système de N particules en interaction or nous savons que la résolution exacte du problème à N corps demeure impossible. Il faut donc, dans le cas général, utiliser des méthodes approchées afin de pouvoir le résoudre. Parmi elles, les méthodes *ab initio* faisant appel à l'utilisation d'interactions nucléon-nucléon (NN) nues sont très vite limitées théoriquement et numériquement à cause du nombre important de nucléons dans le noyau. Par ailleurs, les méthodes de la physique statistique sont peu efficaces à cause des effets de taille finie. Les théories reposant sur l'utilisation d'une interaction effective dans le contexte de l'approximation du champ moyen apparaissent alors comme des outils robustes permettant une description dans son ensemble des propriétés nucléaires. Une interaction sera dite « effective » en opposition aux interactions NN nues, construites à partir de déphasages mesurés sur des expériences de diffusions à deux nucléons. Une interaction effective est, quant à elle, construite phénoménologiquement et, de par sa structure simple, permettra de surmonter les difficultés techniques liées à l'utilisation d'un potentiel NN nu.

La méthode dite de la fonctionnelle de la densité d'énergie (EDF) est l'une de ces théories effectives. Elle est également nommée « méthode du champ moyen auto-cohérent » [9] et peut,

à la fois, être utilisée avec des interactions relativistes ou non relativistes. Grâce à elle, les propriétés statiques telles que l'énergie de liaison, le rayon des noyaux, peuvent être décrites dans le cadre des approximations Hartree-Fock (HF) ou Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) [10]. Il en va de même pour les propriétés dynamiques du noyau comme les spectres d'excitations collectives, la fission et la dynamique des collisions. Comme nous aurons l'occasion de le voir, il est, toutefois, nécessaire d'aller au-delà de l'approximation du champ moyen pour obtenir une description plus complète.

La force de Skyrme, citée précédemment, est actuellement parmi les potentiels effectifs les plus utilisés. Ses paramètres sont ajustés une fois pour toutes sur un ensemble de données expérimentales et de pseudo-données extrapolées de calculs réalistes ou extraites dans des milieux idéaux [11]. Depuis les premiers calculs effectués par Vautherin et Brink [12], les connaissances sur les propriétés et phénomènes nucléaires se sont étoffées. En conséquence, une véritable expertise a été acquise dans la construction de protocoles d'ajustement des paramètres de l'interaction de Skyrme [13–18]. Cette expertise, combinée aux mesures expérimentales de plus en plus fines, a conduit à une amélioration notable de la précision des calculs avec la fonctionnelle.

La méthode EDF complète est formulée en deux étapes consistant à briser puis à restaurer les symétries du hamiltonien nucléaire. Les calculs EDF peuvent être classés en deux familles : (i) ceux effectués à l'approximation du champ du moyen, appelés calculs *simple référence* (SR-EDF) et (ii) les calculs au-delà du champ moyen, *multi-références* (MR-EDF) fondés sur un mélange de configurations. Au cours des dix dernières années, il a été montré que l'utilisation des forces de Skyrme pour effectuer des calculs au-delà du champ moyen associés à des techniques de restauration des symétries brisées [19–21] pouvait conduire à des résultats non physiques. Les origines de ces pathologies sont multiples : (i) l'utilisation de pseudo-potentiels avec une dépendance en densité et (ii) l'usage de deux interactions différentes dans le canal normal et le canal d'appariement. Certains auteurs ont proposé des techniques de régularisation pour les calculs MR-EDF [22], mais elles ne sont utilisables que dans le cas où la dépendance en densité de la fonctionnelle est entière. L'unique possibilité permettant d'effectuer des calculs au-delà du champ moyen avec une interaction de Skyrme et d'obtenir des résultats exempts de pathologies semble donc d'utiliser une fonctionnelle dérivant d'un vrai potentiel d'interaction, identique pour le canal normal et le canal d'appariement.

Durant sa thèse, J. Sadoudi [23] a construit un potentiel de Skyrme à 3 corps jusqu'à l'ordre 2 en gradients et sa fonctionnelle correspondante en prenant en compte les corrélations d'appariement. L'ajustement n'a été fait que pour la partie normale de la fonctionnelle. Le sujet de cette thèse s'inscrit dans la continuité de ce travail. Plus précisément, nous avons achevé la construction du potentiel de la fonctionnelle en ajoutant un potentiel à 4 corps de contact [24]. L'objectif principal a été ensuite d'ajuster les paramètres de cette nouvelle interaction généralisée de Skyrme. La forme du potentiel ayant subi beaucoup de modifications, nous avons effectué un travail d'analyse exploratoire sur une forme simplifiée de l'interaction contenant uniquement un terme de contact pour les couplages à 3 et 4 corps. Cette force, SLyMR0 [24], a servi de test pour valider les formules dérivées de la fonctionnelle, leur implémentation dans les codes de simulation, mais également pour comprendre le rôle que jouent ces nouveaux termes d'interaction.

L'ajustement des paramètres d'une interaction dont la forme est complètement nouvelle est un projet ambitieux. Il l'est d'autant plus lorsque l'on souhaite qu'elle soit en mesure de décrire les corrélations d'appariement. De plus, suite à une série de travaux [25–29], initiée

dans le travail de Lesinski *et al.* [30], il a été montré qu'une grande partie des paramétrisations de Skyrme présentes dans la littérature généraient à des instabilités dans les noyaux. Ces instabilités sont également observées dans la matière nucléaire infinie [29]. Cependant, grâce à tous ces travaux, nous bénéficions d'outils de diagnostic efficaces permettant de construire des forces sans instabilités.

Pour terminer, nous nous sommes penchés sur la question du pouvoir prédictif des interactions de Skyrme. À l'aide d'outils simples [31], nous fournirons les paramétrisations des nouvelles interactions avec des barres d'erreur sur les paramètres ajustés ainsi que sur les observables de notre choix.

Ce manuscrit est composé de six chapitres. Les chapitres I et II sont introductifs et servent à donner au lecteur une image globale de ce que sont les méthodes du champ moyen auto-cohérent et à introduire les nouvelles interactions de Skyrme sur lesquelles porteront ce travail de thèse. Le chapitre III donne une description complète et détaillée du protocole d'ajustement des paramètres de ces nouvelles forces. Le chapitre IV introduit brièvement les outils d'analyse covariante utilisables dans le cadre d'un problème d'optimisation. Nous présentons dans le chapitre V des travaux annexes sur les propriétés de surface de l'interaction de Skyrme dans le cadre d'une approche semi-classique. Nous mettrons également en lumière les corrélations entre ces propriétés de surface et celles de fission/déformation des noyaux lourds. Nous terminerons dans le chapitre VI avec la présentation de tous les résultats obtenus : de l'obtention d'une paramétrisation à une étude préliminaire sur des calculs effectués sur des noyaux sphériques en passant par une analyse de sensibilité des paramètres de l'interaction.

Théories de champ moyen et au-delà

Résumé : Cette première partie introductive contient tous les outils théoriques utiles à la compréhension de ce manuscrit. Il y sera passé en revue quelques concepts fondamentaux en physique nucléaire puis seront présentées les méthodes de champ moyen et au-delà appliquées dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité d'énergie.

Sommaire

1.1. Introduction générale	1
1.1.1. Position du problème	2
1.1.2. Modèle de la goutte liquide	2
1.2. Approches microscopiques et problème à N corps nucléaire	3
1.2.1. Le problème à N corps nucléaire	3
1.2.2. Méthodes <i>ab initio</i>	4
1.2.3. Modèle en couches	4
1.2.4. Approximations du champ moyen et au-delà	5
1.3. Les méthodes du champ moyen	5
1.3.1. La théorie Hartree-Fock (HF)	5
1.3.2. La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)	7
1.3.3. Champ moyen avec contraintes sur la déformation (CHF)	11
1.4. Au-delà du champ moyen	14
1.4.1. L'interaction résiduelle	14
1.4.2. Modes collectifs dans les noyaux	14
1.4.3. La GCM dans un mouchoir de poche	14

1.1. Introduction générale

Le noyau est un milieu fini constitué de A nucléons (Z protons et N neutrons). Les nucléons sont des particules composites qui interagissent entre elles *via* deux interactions fondamentales : l'interaction forte (QCD), intense et de courte portée, responsable de l'attraction entre les nucléons ; l'interaction électromagnétique (QED), peu intense, mais de portée infinie. La compétition entre ces deux interactions est à l'origine de la limite de taille maximale des noyaux et du mécanisme de fission. Les propriétés statiques du noyau, comme son spectre quantifié en énergie, le phénomène de superfluidité nucléaire, mais aussi ses propriétés dyna-

miques, illustrées par des mouvements collectifs des nucléons, des réactions nucléaires, sont autant de preuves de la nature complexe de cet objet. On peut le modéliser à l'aide d'approches microscopiques. Cependant, il est bien connu que la résolution exacte de l'équation de Schrödinger d'un système à A corps, où $A \gg 1$, est impossible. Pour résoudre un tel problème, il faudra faire appel à des modèles comme ceux fondés sur des théories effectives, combinés aux méthodes de calculs à N corps reposant sur des approximations de type champ moyen que sont les théories Hartree-Fock (HF) et Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) [10]. Ces dernières n'étant pas toujours satisfaisantes pour décrire l'ensemble des noyaux existants, nous devons avoir recours à des techniques plus complexes dites « au-delà du champ moyen », comme la méthode de la coordonnée génératrice (GCM) [32–34] ou encore l'approximation des phases aléatoires (RPA) [35–37]. Ces méthodes au-delà du champ moyen prennent en compte les fluctuations du champ moyen, négligées aux approximations HF ou HFB, et donnent pas conséquent accès à l'ensemble de la spectroscopie du noyau.

1.1.1. Position du problème

Une vision simplifiée du noyau établit que les nucléons se meuvent sur des orbites dont les énergies sont quantifiées. Le spectre dépend de la profondeur du puits du potentiel nucléaire et donc du nombre total de nucléons. Le remplissage des orbites donne une structure interne unique à chaque noyau. L'ajout d'un nucléon peut alors provoquer un changement brutal dans sa structure. À l'instar des cortèges électroniques des atomes, les niveaux d'énergies du noyau sont hiérarchisés en couches. Lorsque sa dernière couche est fermée, le nombre de neutrons/protons correspondant sera dit « magique » et le noyau sera plus fortement lié que lorsqu'il possède une couche ouverte. Un noyau avec un nombre magique de protons ou de neutrons sera dit « simplement magique ». Dans le cas où il possède un nombre magique pour les deux espèces, il sera dit « doublement magique ».

En s'éloignant des cas magiques, les noyaux se déforment et prennent diverses formes : *oblate*, *prolate*, triaxiale, pyriforme... Il est également capable d'entrer en rotation, de vibrer. On observe des mouvements collectifs de nucléons, de grandes amplitudes dans les noyaux « mous », de plus faibles amplitudes dans les noyaux « rigides ». Les éléments instables pourront se désintégrer, fissionner.

L'étude des noyaux relève d'un véritable défi : l'interaction entre les nucléons est trop forte pour être traitée perturbativement comme on peut le faire en physique atomique ou en QCD lorsque le couplage entre les quarks est faible. Une autre particularité de la force nucléaire est qu'elle n'est pas simplement à 2 corps, mais est composée d'une somme d'interactions à deux, trois, quatre, ..., N corps. Il est ainsi nécessaire de développer des techniques de résolution propres au problème à N corps nucléaire.

1.1.2. Première description du noyau : le modèle de la goutte liquide

Depuis l'avènement de la physique nucléaire dans les années 30, une quantité notable de modèles du noyau a vu le jour. Commençons par le modèle de la goutte liquide (LDM) [3], qui malgré son ancienneté et sa simplicité, permet d'excellentes prédictions sur les masses des noyaux. L'interprétation physique de ce modèle permet de bien comprendre les fonde-

ments des propriétés de la matière nucléaire. C'est également le premier modèle à donner une interprétation de la fission [38].

La goutte liquide est une approche semi-empirique interprétant le noyau comme une sphère de liquide visqueux incompressible, composé de nucléons interagissant *via* l'interaction nucléaire et coulombienne (pour les protons). L'énergie de liaison totale dépend du nombre de protons et neutrons Z et N :

$$B(N,Z) = a_v A + a_s A^{2/3} + a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} + a_I \frac{(N-Z)^2}{A} - \delta(A), \quad (1.1)$$

où les a_x correspondent respectivement aux coefficients d'énergie :

- de volume a_v ;
- de surface a_s ;
- coulombienne a_c ;
- de symétrie a_I , sans laquelle la matière de neutron serait favorisée énergétiquement.

Le dernier terme $\delta(A)$ favorisera en énergie les noyaux à nombres pairs de neutrons et protons et pénalisera les autres cas possibles :

$$\delta(A) = \begin{cases} 34 A^{-3/4} & \text{pour les noyaux pairs-pairs,} \\ 0 & \text{pour les noyaux pairs-impairs,} \\ -34 A^{-3/4} & \text{pour les noyaux impairs-impairs.} \end{cases} \quad (1.2)$$

Ce terme permet de prendre en compte les corrélations d'appariement. Les valeurs des coefficients sont ajustées sur des masses mesurées [34]. Elles sont données, ci-dessous, en MeV :

$$a_v = -15,7; \quad a_s = 18,6; \quad a_c = 0,7; \quad a_I = 28,1. \quad (1.3)$$

Ce modèle, enrichi depuis, est encore utilisé aujourd'hui comme une formule de masses (voir par exemple les travaux de G. Royer [39–41] dont les meilleurs résultats prédisent des masses de noyaux avec une déviation standard $\sigma = 0,58$ MeV [41]).

1.2. Approches microscopiques et problème à N corps nucléaire

1.2.1. Le problème à N corps nucléaire

On considère un système de A nucléons en interaction. Le hamiltonien nucléaire s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^A \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j=1}^A \hat{v}_{ij} + \sum_{i<j<k=1}^A \hat{v}_{ijk} + \dots, \quad (1.4)$$

où le premier terme du hamiltonien est l'opérateur à 1 corps de l'énergie cinétique. Les termes suivants correspondent respectivement aux opérateurs décrivant les interactions à 2, 3, ..., A corps entre les nucléons. On cherche à résoudre l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\hat{H} |\psi(x_1, \dots, x_A)\rangle = E |\psi(x_1, \dots, x_A)\rangle, \quad (1.5)$$

où les nombres $[x_1, \dots, x_A]$ représentent les degrés de liberté associés aux nucléons. Dans le cas où l'on s'intéresse à un système dynamique, il faut résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$\hat{H} |\psi(t; x_1, \dots, x_A)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t; x_1, \dots, x_A)\rangle . \quad (1.6)$$

La résolution analytique des équations (1.5) et (1.6) est impossible lorsque $A > 2$. De plus, comme il a déjà été dit dans la partie 1.1.1, la forme exacte des interactions nucléaires v_{ij} , v_{ijk} , \dots , n'est pas connue.

Il existe, entre autres, trois méthodes pour tenter de résoudre le problème à N corps nucléaire avec une interaction microscopique : les techniques *ab initio*, le modèle en couches et les techniques basées sur la théorie du champ moyen et au-delà. Seules les méthodes du champ moyen nous intéressent dans le cadre de ce travail. Nous ne ferons qu'évoquer succinctement les deux autres.

1.2.2. Méthodes *ab initio*

Les méthodes *ab initio* permettent une résolution numérique exacte de l'équation de Schrödinger^[a]. Elles sont basées sur l'hypothèse que le potentiel d'interaction entre les nucléons est connu. Pour cela, on fait appel à des interactions NN nues. Parmi les plus utilisées, il y a : les potentiels de Nijmegen I, II [42] ; CD-Bonn [43] ; Argonne AV18 [44]. La fonction d'onde du système possède la forme la plus générale possible et prend en compte les corrélations à N corps entre les nucléons dans le milieu. En dépit de l'élégance qui caractérise ces calculs exacts, les méthodes *ab initio* sont victimes de deux limitations de taille :

- puisqu'elles sont très complexes, elles seront très rapidement limitées par le nombre de particules dans le système. Aujourd'hui, il est envisageable d'effectuer des calculs jusqu'à $A \simeq 16$ [45] ;
- la majorité des potentiels d'interaction « réalistes » ne prennent en compte que la contribution à 2 corps de l'interaction, car, expérimentalement, il est impossible d'effectuer une diffusion à plus de deux nucléons. Le manque de termes d'interaction à 3 corps dégradera fortement les propriétés de saturation de la matière nucléaire et les résultats obtenus seront très décevants. Il existe quelques forces nues incluant un terme d'interaction à 3 corps phénoménologique, par exemple, les potentiels d'Urbana [46].

1.2.3. Modèle en couches

Le modèle en couches [47,48] repose sur l'hypothèse que l'on peut reproduire les propriétés de basse énergie des noyaux en considérant uniquement quelques nucléons de valence situés sur des orbites au-dessus d'un cœur inerte. Le nombre de couches de valence accessibles est un paramètre du modèle et doit être limité. Les nucléons baignent alors dans un champ moyen $v(r)$ engendré par l'ensemble des constituants du système et interagissent entre eux par le biais d'une interaction résiduelle V_{res} . Généralement, le champ moyen $v(r)$ sera modélisé par un potentiel harmonique dont on connaît les états et valeurs propres. L'interaction résiduelle,

[a]. Un exposé, clair et détaillé, des méthodes de résolution *ab initio* est fait dans le cours de J.F. Berger donné en M2 NPAC à Paris XI.

quant à elle, sera calculée ou ajustée afin de décrire au mieux les spectres des noyaux connus. Le modèle en couches permet d'obtenir des résultats très précis sur la spectroscopie des noyaux et fournit tous les états excités appartenant à l'espace engendré par l'espace de valence. Il va de soi que le nombre de configurations excitées à déterminer devient très vite gigantesque avec l'augmentation de la taille de l'espace de valence. Ceci explique pourquoi son domaine d'application est limité à $A \lesssim 100$ ou aux noyaux au voisinage immédiat de couches fermées.

1.2.4. Approximations du champ moyen et au-delà

Une autre stratégie envisageable pour résoudre le problème à N corps nucléaire est d'utiliser la théorie du champ moyen, applicable dans le cadre d'une formulation hamiltonienne ou avec la théorie de fonctionnelle de la densité d'énergie (EDF). Nous reviendrons plus tard sur ce qu'est la théorie de la fonctionnelle de la densité. Dans ce qui suit, nous nous concentrerons uniquement sur les différentes approximations du champ moyen et au-delà.

À l'inverse du modèle en couches, la théorie de champ moyen ne donne pas immédiatement accès aux états excités du noyau. Pour obtenir un résultat précis, il faudra procéder par étapes, correspondant chacune à un degré de raffinement de plus en plus élevé. Le principal succès de cette théorie est qu'elle permet de décrire l'ensemble des éléments de la charte des noyaux, à l'exception des noyaux très légers ($A \lesssim 20$) pour lesquels l'approximation du champ moyen est trop grossière. On peut également l'utiliser pour faire des calculs sur d'hypothétiques éléments super-lourds. Une autre qualité, qui l'oppose là aussi au modèle en couches, est que tous les nucléons sont traités sur un pied d'égalité puisque l'on ne considère pas de cœur inerte.

1.3. Les méthodes du champ moyen

Le noyau, dans le cadre de la théorie du champ moyen, est vu comme un ensemble de quasi-particules se déplaçant indépendamment dans un champ moyen qu'elles créent collectivement. Ces quasi-particules correspondent aux nucléons « habillés » de leurs interactions.

1.3.1. La théorie Hartree-Fock (HF)

Un zeste de formalisme

La fonction d'onde de l'état fondamental du noyau ψ_{HF} est recherchée sous la forme d'un déterminant de Slater, construit à partir des fonctions d'ondes individuelles ϕ_{α_i} des nucléons considérés comme indépendants :

$$\psi_{\text{HF}}(x_1, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det |\phi_{\alpha_1}(x_1) \cdots \phi_{\alpha_A}(x_A)|, \quad (1.7)$$

les variables x_i correspondent aux degrés de liberté des nucléons. Les fonctions d'ondes individuelles ϕ_{α} sont obtenues après l'application d'un principe variationnel visant à minimiser

l'énergie totale du noyau :

$$E_{\text{HF}} = \frac{\langle \psi_{\text{HF}} | \hat{H} | \psi_{\text{HF}} \rangle}{\langle \psi_{\text{HF}} | \psi_{\text{HF}} \rangle}, \quad (1.8)$$

où \hat{H} est un opérateur hamiltonien, $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$. La minimisation nous conduit à un système d'équations couplées non linéaires auto cohérentes, les équations de Hartree-Fock :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mathcal{U}_{\text{HF}}[\phi_\alpha] \right\} \phi_{\alpha_i} = \varepsilon_{\alpha_i} \phi_{\alpha_i}, \quad (1.9)$$

où \mathcal{U}_{HF} le champ moyen, est *a priori* local et dépend des fonctions d'ondes individuelles. Ces équations sont résolues numériquement, de façon itérative. Une fois la convergence atteinte, les énergies et fonctions d'ondes individuelles ε_α , ϕ_α , le champ moyen \mathcal{U}_{HF} et l'énergie de liaison totale HF E_{HF} seront déterminés.

Limitations de la théorie HF

Lorsque les couches d'un noyau ne sont pas fermées, l'énergie du niveau de Fermi des nucléons ε_F , énergie du dernier état individuel occupé, est très proche de celle des premiers états vides ε_p sur cette couche ouverte (voir FIG. 1.1). Il y aura de très fortes corrélations entre l'état fondamental et les premières configurations particule-trou. Il sera donc nécessaire de remplacer le déterminant de Slater par une fonction d'onde plus riche, capable de prendre en compte ces corrélations. On ne pourra donc pas décrire correctement l'état fondamental des noyaux non magiques ou simplement magiques avec une fonction d'onde de type Hartree-Fock.

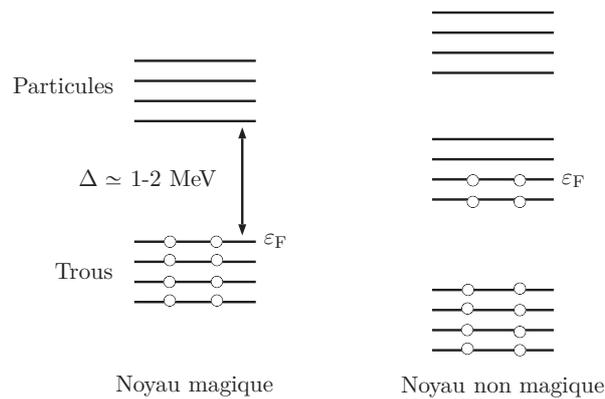


FIG. 1.1 : Représentation schématique des états de particules et de trous dans le spectre HF d'un noyau magique (gauche) et un non magique (droite). Dans le cas où le niveau de Fermi ε_F se situe à la fermeture de couche, il existe un gap important entre celui-ci et l'énergie du premier état individuel vide. Ce n'est pas le cas pour un noyau non magique, les premières configurations à une particule-un trou sont quasiment dégénérées avec l'état fondamental.

1.3.2. La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)

Pour décrire les noyaux à couches ouvertes, il faut prendre en compte les corrélations d'appariement. Parmi la multitude de preuves expérimentales mettant en évidence leur existence, on peut citer :

- les oscillations d'énergie de liaison (ou de séparation d'un nucléon) entre les noyaux pairs-pairs et pairs-impairs. Cette énergie pour un pair-impair sera toujours plus faible que la moyenne des deux noyaux pairs-pairs les plus proches ;
- le défaut de moment d'inertie mesuré dans les noyaux en rotation par rapport au moment d'inertie calculé à l'approximation HF ;
- les différences entre les barrières de fission des isotopes pairs et impairs de l'uranium [49].

Transformation de Bogoliubov générale

La prise en compte de ces corrélations d'appariement se fait grâce à la théorie Hartree-Fock-Bogoliubov dans laquelle on passe d'un état HF de particules indépendantes à un état HFB de quasi-particules (état de paires corrélées), elles aussi indépendantes. Cet état HFB est une généralisation des états BCS introduits par Bardeen, Cooper et Schrieffer [50] en physique du solide. On définit les opérateurs de création et annihilation de quasi-particules fermioniques $\{\hat{\beta}^\dagger, \hat{\beta}\}$. Ils peuvent être exprimés en fonction des créateurs et annihilateurs de particules indépendantes $\{\hat{a}^\dagger, \hat{a}\}$ dans une base quelconque à l'aide d'une transformation de Bogoliubov [10] :

$$\begin{pmatrix} \hat{\beta} \\ \hat{\beta}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{W} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

La matrice de passage \mathcal{W} respecte les relations d'anticommuation des opérateurs dans la base des quasi-particules et la transformation doit être unitaire :

$$\mathcal{W}J_2\mathcal{W}^\dagger = J_2, \quad \mathcal{W}\mathcal{W}^\dagger = \mathcal{W}^\dagger\mathcal{W} = \mathbb{1}, \quad \text{avec } J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.11)$$

Du fait des règles de commutations fermioniques des opérateurs de quasi-particules $\{\hat{\beta}^\dagger, \hat{\beta}\}$, on peut déduire quatre relations entre les vecteurs U et V :

$$\sum_i U_i^{m*} U_i^n + V_i^{m*} V_i^n = \delta_{mn}, \quad \sum_m U_i^{m*} U_j^m + V_i^{m*} V_j^m = \delta_{ij}, \quad (1.12a)$$

$$\sum_i U_i^m U_i^n + V_i^m V_i^n = 0, \quad \sum_m U_i^m U_j^m + V_i^m V_j^m = 0, \quad (1.12b)$$

Vide de quasi-particules

L'état fondamental HFB $|\Phi_0\rangle$, correspondant au vide d'excitations, est défini par :

$$\hat{\beta}_i |\Phi_0\rangle = 0, \quad \forall i. \quad (1.13)$$

Nous allons voir dans la partie qui suit que le vide est composé d'une superposition d'états à $N \pm 2p$ particules où $N \geq 0$. Par conséquent, la théorie HFB brise la symétrie $U(1)$ associée au nombre de particules. Ce dernier ne sera pas une quantité conservée dans le système.

Base canonique

Le théorème de Bloch-Messiah, donné en annexe de [34], stipule qu'il est possible de décomposer la matrice \mathcal{W} selon :

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U} & \bar{V} \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & C^* \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

La transformation unitaire D permet de passer de la base initiale des particules $\{\hat{a}^\dagger, \hat{a}\}$ vers une nouvelle base appelée *base canonique*, caractérisée par les opérateurs $\{\hat{c}^\dagger, \hat{c}\}$. On effectue une transformation de Bogoliubov particulière :

$$\hat{\alpha}_p^\dagger = u_p \hat{c}_p^\dagger - v_p \hat{c}_{\bar{p}}, \quad (1.15a)$$

$$\hat{\alpha}_{\bar{p}}^\dagger = u_p \hat{c}_{\bar{p}}^\dagger + v_p \hat{c}_p, \quad (1.15b)$$

$$(1.15c)$$

qui permet de distinguer les états appariés ($u_p v_p > 0$), des états occupés ($v_i = 1$ et $u_i = 0$) ou vides ($v_m = 0$ et $u_m = 1$) :

$$\hat{\alpha}_i^\dagger = \hat{c}_i, \quad \hat{\alpha}_m^\dagger = \hat{c}_m^\dagger, \quad (1.16a)$$

$$\hat{\alpha}_i = \hat{c}_i^\dagger, \quad \hat{\alpha}_m = \hat{c}_m. \quad (1.16b)$$

Les matrices \bar{U} et \bar{V} sont définies par :

$$\bar{U} = \begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & u \end{pmatrix}, \quad \bar{V} = \begin{pmatrix} 0 & v \\ -v & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

C'est une transformation vers une base de quasi-particules $\{\hat{\beta}^\dagger, \hat{\beta}\}$. Cette transformation peut être quelconque sans que cela affecte la validité du théorème de Bloch-Messiah. Néanmoins, nous allons voir dans la partie 1.3.2 que l'on peut faire un choix judicieux afin de construire une base de quasi-particules dans laquelle la matrice du champ particules-trous h (1.32b) sera diagonale. Ce théorème permet de voir que la transformation de Bogoliubov peut toujours s'exprimer comme une transformation BCS dans la base canonique, obtenue par la transformation D . Dans cette base, le vide de quasi-particules s'exprime alors :

$$|\Phi_0\rangle = \prod_p \left(u_p + v_p \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_{\bar{p}}^\dagger \right) |-\rangle, \quad (1.18)$$

où cette fois $|-\rangle$ coïncide avec le vide de particules. L'opérateur $(u_p + v_p \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_{\bar{p}}^\dagger)$ est un créateur de paires de Cooper de la théorie BCS. L'état fondamental HFB est aussi un déterminant de Slater, la prise en compte des corrélations d'appariement reste donc une approximation de type champ moyen.

Densité normale et tenseur d'appariement

Une fois le vide de notre théorie connu, on peut définir la matrice densité du système :

$$\rho_{ij} = \langle \Phi_0 | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \Phi_0 \rangle = \sum_m V_i^{m*} V_j^m. \quad (1.19)$$

La densité ρ est une observable, elle est donc hermitienne, soit : $\rho^\dagger = \rho$.

La trace de la matrice densité correspond au nombre total de particules qu'il contient :

$$N = \text{Tr}[\rho] = \sum_{im} V_i^{m*} V_i^m. \quad (1.20)$$

La norme du vecteur V_i donne la contribution des quasi-particules au nombre total de particules N dans le système. Lorsque $|V_i|^2 > 1/2$, c'est un état de trou et lorsque $|V_i|^2 < 1/2$ c'est un état de particule, en moyenne.

L'énergie moyenne $\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$ ne s'exprime plus uniquement en fonction de la densité, comme c'est le cas dans la théorie HF, mais fait également intervenir une nouvelle quantité, le tenseur d'appariement :

$$\kappa_{ij} = \langle \Phi_0 | \hat{a}_j \hat{a}_i | \Phi_0 \rangle = \sum_m V_i^{m*} U_j^m. \quad (1.21)$$

On peut l'interpréter comme un paramètre d'ordre indiquant la quantité d'appariement dans le milieu. Il est différent de zéro lorsque les états sont des superpositions à nombre de particules différents causées par le mélange des particules et des trous induit par la transformation de Bogoliubov. Ce tenseur est antisymétrique $\kappa^\dagger = -\kappa^*$.

On peut également définir une matrice densité généralisée \mathcal{R} caractérisant entièrement le vide HFB. Elle réunit la densité normale et le tenseur d'appariement. Elle est définie à l'aide des créateurs et annihilateurs de quasi-particules de Bogoliubov :

$$\mathcal{R}_{ij} = \langle \Phi_0 | \hat{\alpha}_j^\dagger \hat{\alpha}_i | \Phi_0 \rangle, \quad (1.22)$$

avec :

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V^* V^t & V^* U^t \\ U^* V^t & U^* U^t \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

À l'approximation du champ du moyen, les quasi-particules sont indépendantes. Dans ce cas toutes les matrices densités sont idempotentes et hermitiennes. On a donc :

$$\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}, \quad \mathcal{R}^\dagger = \mathcal{R}. \quad (1.24)$$

Conservation du nombre de particules

D'après l'expression du vide d'excitations $|\Phi_0\rangle$ dans la base canonique (1.18), on constate deux choses marquantes : (i) ce vide est similaire à un état BCS [50] avec des nucléons appariés ; (ii) il correspond à une superposition d'états avec des nombres de particules pairs

différents. On aura alors un vide HFB composé d'états à 0, 2, ..., 2N particules. La théorie HFB brise donc la symétrie $U(1)$ reliée à la conservation du nombre de particules. Il est néanmoins possible d'imposer la conservation du nombre moyen de particules dans le système en ajoutant des contraintes à l'aide de multiplicateurs de Lagrange associés aux nombres moyens de protons et neutrons dans le système :

$$\hat{H} = \hat{H} - \lambda_p \hat{Z} - \lambda_n \hat{N}. \quad (1.25)$$

L'énergie à minimiser est renormalisée et devient alors :

$$\bar{E} = E - \lambda_p Z - \lambda_n N. \quad (1.26)$$

λ_p et λ_n sont les multiplicateurs de Lagrange correspondant respectivement aux potentiels chimiques des neutrons et protons :

$$\lambda_p = \frac{\delta E}{\delta Z}, \quad \lambda_n = \frac{\delta E}{\delta N}. \quad (1.27)$$

Le seul moyen existant pour restaurer cette symétrie dans le système sera de projeter les fonctions d'ondes HFB sur le bon nombre de particules [51, 52].

Équations HFB

Soit un Hamiltonien comportant un terme d'énergie cinétique et un terme quelconque d'interaction à 2 corps :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{T} + \hat{V}, \\ &= \sum_{ij} t_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_\ell \hat{c}_k, \end{aligned} \quad (1.28)$$

avec \bar{v}_{ijkl} , les éléments de matrice de l'interaction NN antisymétrisée :

$$\bar{v}_{ijkl} = \langle ij | \hat{V} | k\ell \rangle - \langle ij | \hat{V} | \ell k \rangle. \quad (1.29)$$

Pour un état HFB $|\Phi\rangle$ donné, l'énergie moyenne E_{HFB} de cette configuration sera donnée par :

$$E_{\text{HFB}} = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \left[\rho_{ki} \rho_{\ell j} + \frac{1}{2} \kappa_{ij}^* \kappa_{k\ell} \right], \quad (1.30)$$

où le terme en $\kappa^* \kappa$ sera la contribution à l'énergie des corrélations d'appariement. Dans la limite où l'appariement est nul, on retrouve l'énergie moyenne de la théorie HF.

On minimise l'énergie E_{HFB} de la même manière que pour HF, en utilisant un principe variationnel. Cependant, comme nous l'avons déjà dit dans la partie 1.3.2, la transformation de Bogoliubov mélange une infinité d'états avec des nombres de particules différents. Il faut donc minimiser l'énergie \bar{E}_{HFB} obtenue en contraignant la conservation du nombre moyen de protons et neutrons (voir EQ. (1.26)). On obtient alors les équations HFB qui s'écrivent sous

forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix}, \quad (1.31a)$$

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k^* \\ V_k^* \end{pmatrix} = -E_k \begin{pmatrix} U_k^* \\ V_k^* \end{pmatrix}, \quad (1.31b)$$

où h est le champ particule-trou (champ HF) et Δ le champ d'appariement dont les éléments de matrices sont définis par :

$$h_{ik} = \frac{\delta \bar{E}}{\delta \rho_{ki}} = h_{ki}^*, \quad (1.32a)$$

$$\Delta_{ij} = \frac{\delta \bar{E}}{\delta \kappa_{ji}^*} = -\Delta_{ji}, \quad (1.32b)$$

ce qui donne pour une force à deux corps ne dépendant pas de la densité, d'après la définition du Hamiltonien nucléaire (1.28) :

$$h_{ik} = t_{ik} + \sum_{j\ell} \bar{v}_{ijkl} \rho_{\ell j}, \quad (1.33a)$$

$$\Delta_{ij} = -\frac{1}{2} \sum_{k\ell} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{k\ell}. \quad (1.33b)$$

Les deux équations matricielles (1.31) sont équivalentes. Dobaczewski *et al.* [53] ont montré que la résolution de (1.31a) pour des quasi-particules d'énergie $E_k > 0$, en utilisant les propriétés de symétries des matrices densités, suffisait à résoudre complètement le problème HFB.

Pour conclure, la théorie HFB permet d'améliorer la fonction d'onde approchant l'état fondamental dans les noyaux non magiques grâce à la prise en compte des corrélations d'appariement. Comme on peut le voir schématiquement sur la figure 1.2, on régénère un gap au-dessus du niveau de Fermi à l'instar de celui observé dans les noyaux magiques à l'approximation HF par le biais d'une transformation de Bogoliubov (voir FIG. 1.1).

1.3.3. Champ moyen avec contraintes sur la déformation (CHF)

Afin d'explorer les propriétés de déformation des noyaux, nous pouvons faire appel à des calculs de champ moyen avec une contrainte sur la déformation que l'on souhaite étudier. Les ingrédients de base restent les mêmes que pour un calcul HF/HFB. Il suffit d'ajouter au hamiltonien \hat{H} des « champs extérieurs » \hat{Q}_j servant à contraindre la déformation souhaitée pour le noyau. On obtient alors le Routhien suivant :

$$\hat{H}_{\text{contr}} = \hat{H} + \frac{1}{2} \sum_j \lambda_j (\hat{Q}_j - Q_j^{(0)})^2, \quad (1.34)$$

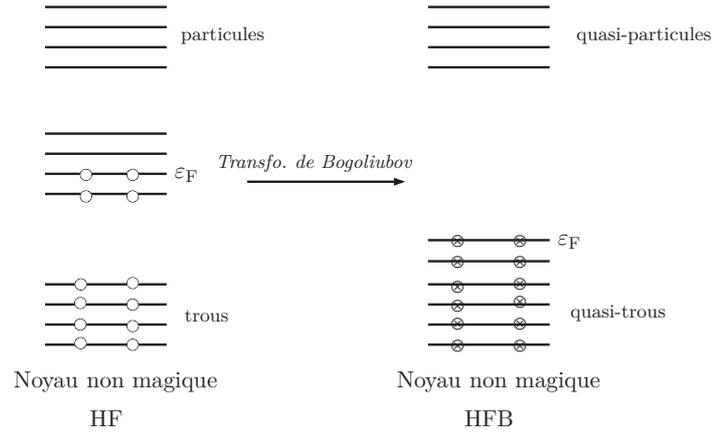


FIG. 1.2 : Représentation schématique du spectre d'un noyau non magique traité avec la théorie HF (gauche) et avec HFB (droite). On voit qu'avec HFB, nous n'avons plus à faire avec des particules et des trous (cercles blancs), mais à des quasi-particules et quasi-trous (cercles avec une croix noire). Un gap entre les états de quasi-trous et quasi-particules est généré via la transformation de Bogoliubov.

où les $\{\lambda_j\}$, $\{\hat{Q}_j\}$ correspondent respectivement aux multiplicateurs de Lagrange et opérateurs de déformation agissant sur la fonction d'onde du système. $Q_j^{(0)}$ correspond aux valeurs contraintes pour chaque coordonnée collective. L'expression de l'énergie du Routhien prend la forme suivante :

$$E_{\text{contr}} = E - \frac{1}{2} \sum_j \lambda_j \langle \Phi_0 | (\hat{Q}_j - Q_j^{(0)})^2 | \Phi_0 \rangle . \quad (1.35)$$

En minimisant cette nouvelle fonctionnelle E_{contr} , nous accéderons aux énergies du noyau hors de son état d'équilibre. En explorant un ensemble de déformations suivant un paramètre $Q_j^{(0)}$, nous obtiendrons des courbes d'énergie potentielle. Nous constaterons alors souvent que l'état sphérique n'est pas la configuration minimisant l'énergie du noyau ce qui signifiera que le noyau est déformé dans son état fondamental. On pourra aussi trouver plusieurs *minima* locaux correspondant à différents états déformés ou super-déformés. Dans le cas où ces *minima* possèdent des énergies proches, les corrélations de l'état fondamental seront capables de coupler ces différentes configurations. Le choix des opérateurs de coordonnées collectives \hat{Q}_j doit être judicieusement effectué. La figure 1.3 illustre une surface d'énergie potentielle calculée suivant les paramètres de déformation quadrupolaire Q_{20} et octupolaire Q_{30} du Plomb ^{194}Pb . En fonction des résultats obtenus à l'aide de ces calculs avec contraintes, nous classifions les noyaux en deux catégories : les noyaux « mous » et les noyaux « rigides ». Le critère de sélection se fera sur la valeur du rapport de recouvrement des fonctions d'ondes d'états pris pour des paramètres de déformation voisins.

Noyaux rigides : ils sont difficilement déformables. Leurs modes collectifs de vibration se situent généralement à des énergies supérieures à celles des premières excitations particule-trou. Le couplage induit par ces effets collectifs peut être négligé et l'on pourra se satisfaire d'un calcul CHF. Sur la figure 1.4, les courbes d'énergie potentielle des noyaux de ^{20}Mg et

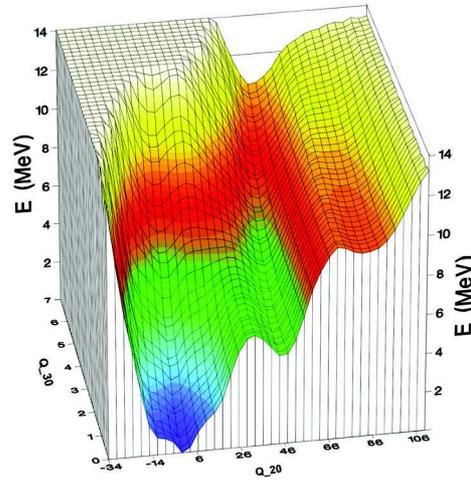


FIG. 1.3 : Surface d'énergie potentielle en fonction des paramètres de déformation quadrupolaire Q_{20} et octupolaire Q_{30} calculées avec la fonctionnelle SkM* [54] pour un noyau de ^{194}Pb . Figure tirée de l'article [55].

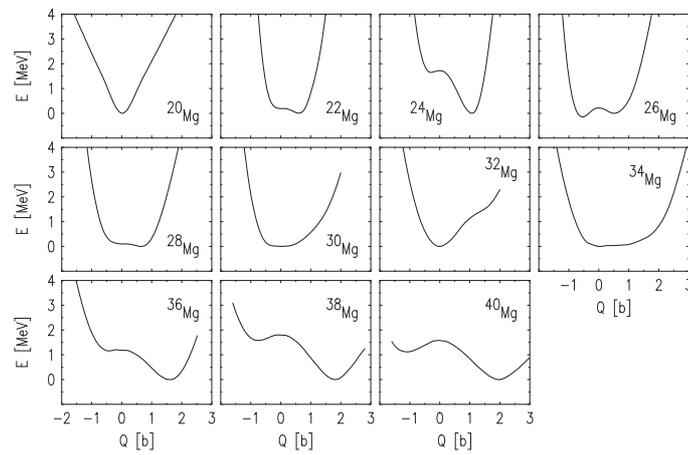


FIG. 1.4 : Énergie en fonction du moment quadrupolaire Q_{20} pour des isotopes du magnésium. L'énergie de l'état fondamental est prise comme zéro d'origine. Ces figures sont tirées de l'article de Terasaki *et al.* [56].

^{24}Mg montre un minimum d'énergie très distinct, au fond d'un « puits étroit ». Ces noyaux sont rigides et les corrélations du fondamental y seront ainsi peu importantes.

Noyaux mous : ils sont, par définition, facilement déformables. Leurs énergies de vibrations sont bien inférieures à leurs premières excitations particules-trous. Dans ce cas, la prise en compte des effets collectifs est nécessaire. L'isotope 34 du magnésium est un bon exemple de noyau mou (cf. FIG. 1.4). Dans ce cas, on constate que le puits formé possède un large « fond plat » dans lequel les mélanges d'états seront nombreux.

1.4. Au-delà du champ moyen

Jusqu'ici, les deux approches de champ moyen que nous avons étudiées reposent sur l'application d'un principe variationnel avec comme états initiaux :

- Un déterminant de Slater $|\psi_{\text{HF}}\rangle$ pour la théorie HF ;
- Un état BCS $|\Phi_0\rangle$ pour la théorie HFB qui est également un déterminant de Slater.

Les états finaux obtenus, solutions de la minimisation de l'énergie totale, sont des approximations du « véritable » état fondamental du système. Or $|\psi_{\text{HF}}\rangle$ et $|\Phi_0\rangle$ sont seulement états propres du hamiltonien effectif \hat{H} utilisé.

1.4.1. L'interaction résiduelle

L'interaction résiduelle, \hat{V}_{res} , contient tous les termes de couplages négligés dans les différents hamiltoniens effectifs \hat{H} utilisés pour résoudre le problème à N corps. Son contenu est non univoque et la hiérarchie d'approximations utilisées dans les différentes théories de champ moyen consiste à minimiser l'importance de \hat{V}_{res} .

Les calculs prenant en compte des corrélations supplémentaires à celles d'appariement, traitées avec HFB, seront considérés comme des calculs allant « au-delà » du champ moyen. La question qui se pose à nous est de savoir si négliger l'interaction résiduelle comme on le fait à l'approximation HFB est une bonne ou mauvaise approximation. Malheureusement, la réponse n'est pas catégorique et dépendra du noyau à étudier.

1.4.2. Modes collectifs dans les noyaux

En général, l'unique prise en compte des corrélations d'appariement n'est pas suffisante pour rendre le rôle de l'interaction résiduelle négligeable. Il existe, par exemple, des modes d'excitations collectives qui ne peuvent pas être décrits en considérant le champ moyen statique comme c'est le cas dans les théories HF ou HFB. En prenant en compte la partie de l'interaction résiduelle responsable des excitations collectives, \hat{V}_{coll} , on autorisera le champ moyen à osciller. Ces oscillations seront également présentes dans la fonction d'onde du fondamental et qui seront à l'origine des corrélations dans l'état fondamental.

1.4.3. La GCM dans un mouchoir de poche

La méthode de la coordonnée génératrice (GCM) [33] est une technique de calcul allant au-delà de l'approximation du champ moyen. Elle est basée sur le mélange de différentes configurations pour décrire l'état fondamental d'un noyau, ce qui est particulièrement adapté pour la description des noyaux mous. Les ingrédients de base pour appliquer cette méthode sont au nombre de deux :

- un ensemble de fonctions d'ondes à N corps $\{|\Phi(q)\rangle\}$ déterminées, pour une ou plusieurs coordonnées collectives $\{q\}$;
- un hamiltonien \hat{H} . On choisit le même que celui utilisé pour déterminer l'ensemble de fonctions d'ondes cité ci-dessus.

On peut, par exemple, utiliser des calculs CHF pour construire l'ensemble des fonctions d'ondes $\{|\Phi(q)\rangle\}$. Dans ce cas, les coordonnées collectives les plus simples à choisir pour contraindre les calculs CHF sont les moments quadru- et octupolaires.

Le mélange des configurations consiste à envisager l'état fondamental $|\bar{\Phi}_k\rangle$ comme un mélange de tous les $|\Phi(q)\rangle$, états propres du hamiltonien \hat{H} (HF ou HFB) pris pour une valeur d'un ensemble de coordonnées collectives q donné. On effectue alors un calcul *multi-références* (MR-EDF). Par opposition, les calculs HF, HFB, CHF seront dits *simple-référence* (SR-EDF). La fonction d'essai pour l'état fondamental GCM est donnée par :

$$|\bar{\Phi}_k\rangle = \int dq f_k(q) |\Phi(q)\rangle, \quad (1.36)$$

où $f_k(q)$ est la distribution pondérant la contribution de chaque fonction d'onde HFB $|\Phi(q)\rangle$ au mélange de configurations. En ce sens, $|\bar{\Phi}_k\rangle$ n'est plus un déterminant de Slater justifiant l'appellation « au-delà » du champ moyen. Afin de construire cette fonction d'onde $\bar{\Phi}_k$, nous appliquerons un principe variationnel sur l'énergie totale du système avec $f_k(q)$ comme inconnue à déterminer. La fonctionnelle $E_k[\bar{\Phi}]$ s'écrit :

$$E_k[\bar{\Phi}] = \frac{\langle \bar{\Phi}_k | \hat{H} | \bar{\Phi}_k \rangle}{\langle \bar{\Phi}_k | \bar{\Phi}_k \rangle} = \int dq_1 dq_2 f_k^*(q_2) f_k(q_1) \frac{\langle \Phi(q_2) | \hat{H} | \Phi(q_1) \rangle}{\langle \Phi(q_2) | \Phi(q_1) \rangle}. \quad (1.37)$$

La minimisation de cette énergie moyenne E_k conduit alors à l'équation de Hill-Wheeler [32] :

$$\int dq_1 f(q_1) \langle \Phi(q_2) | \hat{H} - E_k | \Phi(q_1) \rangle = 0. \quad (1.38)$$

Les fonctions d'ondes HFB servant à construire l'ensemble d'états fondamentaux $|\Phi(q)\rangle$ n'étant pas états propres des opérateurs du nombre de protons \hat{Z} et neutrons \hat{N} , la solution de l'équation de Hill-Wheeler (1.38) ne le sera pas également. Les états HFB d'énergie E_{def} sont construits avec une contrainte sur le nombre moyen de particules. Malgré cela, rien ne garantit que l'état GCM défini Eq. (1.36) aura le bon nombre moyen de particules. L'énergie de liaison augmentant avec le nombre moyen de particules, la condition de stationnarité associée au principe variationnel conduisant à l'équation de Hill-Wheeler sera satisfaite avec un nombre moyen de particules plus grand que les nombres respectifs aux états HFB, ingrédients du mélange de configuration. Il faudra une seconde fois contraindre les nombres moyens de particules lors de la minimisation de l'énergie E_k [9].

Conclusion sur la GCM

La résolution de (1.38) donne accès aux fonctions d'ondes GCM caractérisant les états du noyau (1.36). Le choix des coordonnées collectives à contraindre pour les calculs CHF doit être judicieux. On peut généraliser l'équation de Hill-Wheeler en prenant plusieurs coordonnées collectives différentes, représentant des axes de déformations différents (déformation axiale, quadrupolaire, triaxiale. . .). Cependant, chaque degré de liberté supplémentaire impliquera une augmentation non négligeable du temps de calcul pour déterminer les éléments de matrice présents dans l'EQ. (1.37).



Interactions & fonctionnelles de Skyrme

Résumé : Pour terminer la description des outils utilisés en structure nucléaire théorique, nous allons présenter l'interaction de Skyrme en passant en revue rapide son historique depuis sa première utilisation en 1972 [12] jusqu'au développement d'une nouvelle génération d'interactions généralisées incluant des termes d'interaction à 3 et 4 corps [23,24,57] – interactions dont nous chercherons à ajuster les paramètres.

Sommaire

2.1. Interaction de Skyrme standard	17
2.1.1. Définition	18
2.1.2. Fonctionnelle de Skyrme standard	18
2.1.3. État de l'art - Succès et échecs	21
2.2. Nouvelles interactions de Skyrme généralisées	23
2.2.1. Pseudo-potentiel avec termes d'interaction à 2, 3 et 4 corps	23
2.2.2. Nouvelle forme de la fonctionnelle	24
2.3. Conclusion	25

2.1. Interaction de Skyrme standard

La force de Skyrme [5] est un modèle d'interaction effective servant à décrire l'interaction entre les nucléons dans les milieux nucléaires. Elle est de portée nulle et dépend des vitesses relatives des nucléons. Dans sa forme la plus utilisée jusqu'à aujourd'hui, elle dépend de la densité du milieu comme on peut le voir dans le travail original de Vautherin et Brink [12], dans les forces SIII [13] ou encore SLy5 [14].

2.1.1. Définition

Dans sa forme standard, le *pseudo-potentiel* v_{Sk} d'interaction entre deux nucléons s'écrit :

$$v_{\text{Sk}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = t_0 (\hat{\mathbf{1}}_2 + x_0 \hat{P}_{12}^\sigma) \hat{\delta}_{12}^r \quad (2.1a)$$

$$+ \frac{1}{2} t_1 (\hat{\mathbf{1}}_2 + x_1 \hat{P}_{12}^\sigma) (\hat{\mathbf{k}}_{12}^{\dagger 2} \hat{\delta}_{12}^r + \hat{\delta}_{12}^r \hat{\mathbf{k}}_{12}^2) \quad (2.1b)$$

$$+ t_2 (\hat{\mathbf{1}}_2 + x_2 \hat{P}_{12}^\sigma) \hat{\mathbf{k}}_{12}^\dagger \hat{\delta}_{12}^r \cdot \hat{\mathbf{k}}_{12} \quad (2.1c)$$

$$+ \frac{1}{6} t_3 (\hat{\mathbf{1}}_2 + x_3 \hat{P}_{12}^\sigma) \rho_0^\alpha(\mathbf{R}) \hat{\delta}_{12}^r \quad (2.1d)$$

$$+ iW \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{k}}_{12}^\dagger \times \hat{\delta}_{12}^r \hat{\mathbf{k}}_{12}). \quad (2.1e)$$

avec les définitions suivantes :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad (2.2a)$$

$$\hat{\delta}_{ij}^r = \hat{\delta}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2, \quad (2.2b)$$

$$\hat{\mathbf{k}}_{ij} = -\frac{i}{2}(\hat{\nabla}_{\mathbf{r}_i} - \hat{\nabla}_{\mathbf{r}_j}), \quad \hat{P}_{ij}^\sigma = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_j), \quad (2.2c)$$

où l'opérateur $\hat{\mathbf{k}}_{ij}$ agit sur les coordonnées spatiales de la fonction d'onde des nucléons et $\hat{\mathbf{k}}_{ij}^\dagger$ sur la fonction d'onde conjuguée. (2.1a) est le terme central, (2.1b) et (2.1c) simulent la non-localité de l'interaction par le biais d'une dépendance en vitesses, (2.1d) contrôle l'intensité de la dépendance en densité paramétrisée par α et enfin (2.1e) correspond au terme de couplage spin-orbite. Un « *pseudo-potentiel* » se distingue d'un potentiel par sa dépendance en vitesse. Dans le cas de l'interaction de Skyrme, on a donc un pseudo-potentiel dépendant de la densité.

Dans sa forme standard, v_{Sk} dépend de dix paramètres, mais il peut également contenir : (i) des termes d'interaction tensoriels comme la série de forces TIJ [16, 58]; (ii) des dépendances en densité supplémentaires [59]; (iii) des termes dépendants des dérivées jusqu'aux ordres quatre [60, 61] et six [61]; (iv) plusieurs couplages spin-orbites [62]. L'usage d'une interaction de portée nulle permet d'alléger considérablement les calculs analytiques et numériques. L'énergie moyenne du système étudié prendra alors la forme d'une intégrale sur \mathbf{r} d'une densité d'énergie $\mathcal{E}_{\text{Sk}}(\mathbf{r})$ et le potentiel \mathcal{U}_{HF} sera local.

2.1.2. Fonctionnelle de Skyrme standard

L'énergie moyenne d'interaction, E_{Sk} , peut se calculer sur des états HFB ou HF selon si l'on souhaite ou non prendre en compte les corrélations d'appariement :

$$E_{\text{Sk}}[\rho, \kappa] = \langle \phi | v_{\text{Sk}} | \phi \rangle = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{E}_{\text{Sk}}(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

où $|\phi\rangle$ est un déterminant de Slater. E_{Sk} est appelée fonctionnelle de la densité d'énergie de Skyrme. On décompose généralement la densité d'énergie en deux contributions, la partie normale dépendant de la densité de nucléons ρ (*cf.* EQ. (1.20)) et la partie d'appariement

dépendant du tenseur d'appariement κ dont les composantes sont définies EQ. (1.21) :

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}} = \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho} + \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa}. \quad (2.4)$$

Densités de la fonctionnelle

La fonctionnelle de la densité d'énergie s'exprime en fonction de densités et courants locaux dérivants de la matrice densité :

$$\rho(x_1, x_2) = \langle \phi | \hat{a}_{x_1}^\dagger \hat{a}_{x_2} | \phi \rangle, \quad (2.5)$$

où $x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i, q_i)$ sont les trois degrés de liberté d'espace, de spin et d'isospin associés aux nucléons. Les courants, étant impairs par renversement du temps, seront toujours nuls dans les systèmes étudiés durant ce travail. De plus, nous ne considérons que des états purs de neutrons et protons. Dans ce cas, la matrice densité générale devient diagonale dans l'espace d'isospin :

$$\rho(\mathbf{r}_1\sigma_1q_1, \mathbf{r}_2\sigma_2q_2) \equiv \rho_q(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2)\delta_{q_1q_2}, \quad (2.6)$$

et peut se décomposer en une partie scalaire (densité de nucléons) et vecteur (densité de spins) [63] :

$$\rho_q(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) = \frac{1}{2}\rho_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\delta_{\sigma_1\sigma_2} + \frac{1}{2}\mathbf{s}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \langle \sigma_2 | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \sigma_2 \rangle. \quad (2.7)$$

avec :

$$\rho_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma} \rho_q(\mathbf{r}_1\sigma, \mathbf{r}_2\sigma), \quad (2.8a)$$

$$\mathbf{s}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \rho_q(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) \cdot \langle \sigma_2 | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \sigma_1 \rangle. \quad (2.8b)$$

Les densités de la fonctionnelle font intervenir des dérivées jusqu'à l'ordre deux^[a] par rapport à \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 . Les densités locales, pour une fonctionnelle standard de Skyrme, paires par renversement du temps sont au nombre de trois :

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \rho_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2}, \quad (2.9a)$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \nabla_{\mathbf{r}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_2} \rho_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2}, \quad (2.9b)$$

$$J_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{2}(\nabla_{\mathbf{r}_1, \mu} - \nabla_{\mathbf{r}_2, \mu})s_{q,\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2}, \quad (2.9c)$$

qui correspondent respectivement à la densité locale de nucléon $\rho_q(\mathbf{r})$, la densité cinétique $\tau_q(\mathbf{r})$ et au tenseur densité de spin-orbite $\mathbb{J}_q(\mathbf{r})$.

On peut décomposer les tenseurs de rang 2 en trois contributions, celle d'un pseudo-scalaire, d'un vecteur et d'un pseudo-tenseur d'ordre deux symétrique et de trace nulle :

$$J_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{3}\delta_{\mu\nu} J^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}\sum_{\kappa} \epsilon_{\mu\nu\kappa} J_{\kappa}^{(1)}(\mathbf{r}) + J_{\mu\nu}^{(2)}(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

[a]. aussi appelé NLO pour « *next-to-leading order* » dans la littérature [61].

où $\epsilon_{\mu\nu\kappa}$ est le tenseur de Levi-Civita. Les pseudo-scalaires, vecteurs et pseudo-tenseurs sont donnés par :

$$J^{(0)}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} J_{\lambda\lambda}(\mathbf{r}), \quad (2.11a)$$

$$J_{\kappa}^{(1)}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu\nu} \epsilon_{\mu\nu\kappa} J_{\mu\nu}(\mathbf{r}), \quad (2.11b)$$

$$J_{\mu\nu}^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[J_{\mu\nu}(\mathbf{r}) + J_{\nu\mu}(\mathbf{r})] - \frac{1}{3}\delta_{\mu\nu} \sum_{\lambda} J_{\lambda\lambda}(\mathbf{r}). \quad (2.11c)$$

Dans un système caractérisé par une symétrie sphérique, les pseudo-tenseurs de tout ordre sont nuls compte tenu de leur parité associée aux transformations dans l'espace [63]. De plus, l'invariance par rotation impose aux densités de ne dépendre que de la coordonnée radiale r . Compte tenu de la décomposition EQ. (2.10), le tenseur densité de spin-orbite s'écrit dans un système à symétrie sphérique :

$$\mathbf{J}^{(1)}(\mathbf{r}) = J(r)\mathbf{e}_r. \quad (2.12)$$

Dans la matière semi-infinie, caractérisée par une invariance par translation suivant deux axes de l'espace des coordonnées (par exemple x et y) et une symétrie cylindrique, il est possible de montrer que le tenseur $\mathbb{J}_q(\mathbf{r})$ n'admet que deux composantes non nulles [63, 64] telles que :

$$J_{xy} = -J_{yx}. \quad (2.13)$$

Une démonstration est donnée dans l'annexe B. Du fait de l'invariance par translation dans le plan (x,y) , les densités ne dépendent que de z . On aura cette fois :

$$\mathbf{J}^{(1)}(z) = J(z)\mathbf{e}_z. \quad (2.14)$$

Densités locales dans le canal d'appariement

Il est utile de définir une nouvelle quantité, associée au tenseur d'appariement EQ. (1.21), que l'on nomme densité anormale. En se restreignant à des systèmes pairs par renversement du temps, cette dernière sera hermitienne et paire par renversement du temps [53]. La densité anormale $\tilde{\rho}$ est reliée au tenseur d'appariement par une simple phase :

$$\tilde{\rho}_q(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) = -2\sigma_2\kappa_q(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2 - \sigma_2). \quad (2.15)$$

Finalement, avec cette redéfinition, les densités non nulles dans la densité d'énergie d'appariement sont similaires à celles du canal normal :

$$\tilde{\rho}_q(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2}, \quad (2.16a)$$

$$\tilde{\tau}_q(\mathbf{r}) = \nabla_{\mathbf{r}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_2} \tilde{\rho}_q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2}, \quad (2.16b)$$

$$\tilde{J}_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{2}(\nabla_{\mathbf{r}_1,\mu} - \nabla_{\mathbf{r}_2,\mu})\tilde{s}_{q,\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2}, \quad (2.16c)$$

Représentation isoscalaire-isovectorielle

On adopte généralement, pour exprimer la densité d'énergie normale $\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho}$, un formalisme particulier distinguant les densités isoscalaires des densités isovectorielles. Cette notation étant plus adaptée, compacte et « symétrique » que la représentation proton/neutron, nous l'adopterons pour la partie normale $\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho}$. Les densités isoscalaires et isovectorielles sont définies par :

$$\rho_0 = \rho_n + \rho_p \quad (2.17a)$$

$$\rho_1 = \rho_n - \rho_p. \quad (2.17b)$$

La densité d'énergie d'appariement $\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa}$ sera, quant à elle, exprimée dans le formalisme proton/neutron puisque l'appariement n'est considéré que dans le canal $S = 0, T = 1$ (seuls les nucléons de même espèce s'apparient).

Densité d'énergie de Skyrme

Nous donnons l'expression de la densité d'énergie \mathcal{E}_{Sk} contenant uniquement des termes pairs par renversement du temps. Les termes dépendants de $\mathbb{J}_q(\mathbf{r})$ sont exprimés et simplifiés en fonction des symétries imposées au système (symétrie sphérique ou cylindrique). Dans ces deux cas de symétries, on a :

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho} = \sum_{t=0,1} \left\{ A_t^\rho \rho_t \rho_t + A_t^{\rho,\alpha} \rho_t \rho_t + A_t^\tau \rho_t \tau_t + A_t^{\nabla\rho} \nabla \rho_t \cdot \nabla \rho_t + \frac{1}{2} A_t^J \mathbf{J}_t \cdot \mathbf{J}_t + A_t^{\nabla J} \nabla \mathbf{J}_t \cdot \rho_t \right\}, \quad (2.18)$$

où l'origine du facteur $1/2$ devant le terme en \mathbf{J}_t^2 est justifiée par l'expression EQ. (2.10). Les constantes de couplage de la fonctionnelle A_t^y sont des combinaisons des neuf paramètres (t_i, x_i, W_0) de l'interaction de Skyrme. Les constantes $A_t^{\rho,\alpha}$ contiennent une dépendance en densité contrôlée par le 10^{ème} paramètre α . Les expressions des constantes de couplage A_t^y sont fournies dans le TAB. 1.2. La partie anormale est donnée par :

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa} = \sum_{q=1,2} \left\{ A^{\tilde{\rho}} \tilde{\rho}_q \tilde{\rho}_q + A^{\tilde{\rho},\alpha} \tilde{\rho}_q \tilde{\rho}_q + A^{\tilde{\tau}} \tilde{\rho}_q \tilde{\tau}_q + A^{\nabla\tilde{\rho}} \nabla \tilde{\rho}_q \cdot \nabla \tilde{\rho}_q + \frac{1}{2} A^{\tilde{J}} \tilde{\mathbf{J}}_q \cdot \tilde{\mathbf{J}}_q + A^{\nabla\tilde{J}} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}_q \tilde{\rho}_q \right\}, \quad (2.19)$$

où l'indice d'isospin $q = 1$ correspond aux neutrons et $q = 2$ aux protons. Les constantes de couplages $A^{\tilde{y}}$ sont également données dans le TAB. 1.2. Pour une force à deux corps avec termes dérivatifs jusqu'à l'ordre deux, l'expression la plus générale de la densité d'énergie est, par exemple, donnée dans l'article de Perlinska [65].

2.1.3. État de l'art - Succès et échecs

Depuis la première paramétrisation proposée par Vautherin [12], en parallèle des évolutions techniques en physique nucléaire expérimentale, les connaissances théoriques sur les milieux nucléaires se sont étoffées. En conséquence, les théoriciens ont, non seulement, acquis au fil du temps une expertise dans la construction de protocoles d'ajustement des paramètres de la fonctionnelle de Skyrme, mais également eu à leur disposition des mesures d'observables,

sans cesse renouvelées, ainsi que de nouvelles mesures inaccessibles auparavant. Parmi ces mesures, on peut par exemple citer celles de la collaboration PREX [66] qui effectue des mesures sur les rayons de neutrons, de protons et de la peau de neutrons du ^{208}Pb . Grâce à tous ces progrès, il paraît légitime que la précision des prédictions de la fonctionnelle ait augmenté avec le temps tout comme son domaine d'application : calculs dans les noyaux stables, instables, proches de la *drip-line*, calculs en astrophysique nucléaire.

Il existe dans la littérature plus de deux cents paramétrisations de fonctionnelles de Skyrme. Nombre d'entre elles ont été uniquement construites pour décrire les états fondamentaux des noyaux. D'autres, plus élaborées, ont été ajustées spécifiquement pour décrire : (i) les barrières de fission de certains actinides [54] ; (ii) les corrélations d'appariement entre les nucléons [53] et (iii) les modes collectifs dans les noyaux, comme les résonances géantes (GMR, GDR, ...). Depuis la série de travaux [25–29,67], initiée par Lesinski [30], une attention toute particulière est portée sur la stabilité des interactions de Skyrme. Le formalisme ainsi que les détails sur ces instabilités seront introduits dans la partie 3.2.5 du chapitre III.

Hamiltoniens ou fonctionnelles ?

Concernant l'utilisation d'interactions de Skyrme, il existe deux approches différentes :

- l'approche fonctionnelle consistant à choisir *a priori* la forme de la fonctionnelle de la densité d'énergie E_{Sk} ne dérivant pas d'une interaction. On ajuste ses constantes de couplage associées (2.4). Ce sont, par exemple, les cas de : SIII [13], SKM* [54], SLy4 [14], UNEDF0,1,2 [17,18] ;
- l'approche hamiltonienne, quant à elle, consiste à partir du pseudo-potentiel v_{Sk} puis à dériver sa fonctionnelle associée E_{Sk} pour finalement ajuster la valeur des paramètres du pseudo-potentiel (2.1). SLy5 [14] ou l'ensemble des TIJ [16] dérivent d'un potentiel de Skyrme, mais ne peuvent pas être utilisées pour une approche hamiltonienne car le terme d'échange coulombien est traité à l'approximation de Slater et elles ne sont pas ajustées pour donner de l'appariement. En pratique, SLy5 donne de l'appariement mais il est beaucoup trop faible pour être réaliste. Seules les nouvelles forces que nous allons ajuster pourront être utilisées pour ce type d'approche. En considérant des forces de portée finie, la force de Gogny peut également être utilisée dans une approche hamiltonienne.

L'approche fonctionnelle paraît avantageuse puisqu'elle permet de choisir quels sont les termes d'interaction que l'on veut voir ou ne pas voir apparaître dans l'expression de l'énergie E_{Sk} . Si un terme est mal contraint, il risque de détériorer les résultats attendus. On pourra alors librement l'éliminer. Un autre exemple historique concerne la contribution des termes tenseurs $\mathbf{J}_q(\mathbf{r})$ dans la partie centrale de l'énergie. Par le passé, l'inclusion de tels termes dans la fonctionnelle était omise. De plus, leur contribution à l'énergie est relativement faible, ils ont souvent été négligés comme dans SLy4 alors qu'ils sont présents dans SLy5.

Pathologies des forces standards au-delà du champ moyen

Ces dix dernières années, il a été mis en évidence [20] que l'utilisation de forces de Skyrme standards pour effectuer des calculs MR-EDF associés à des techniques de restauration des symétries brisées [19] conduisait à des résultats non physiques qui se distinguent par deux phénomènes :

- (i) des pôles dans l'énergie projetée E_{MR} lorsque l'on cherche à restaurer, par exemple, la symétrie du bon nombre de particules. Ces divergences apparaissent lorsque, pour une valeur de déformation donnée q , un état individuel croise l'énergie de Fermi [20] ;
- (ii) des sauts « brutaux » dans la valeur de l'énergie avant et après ces pôles.

Il a été montré que les pôles sont causés par l'utilisation d'une fonctionnelle ne dérivant pas directement d'un hamiltonien [19] et donc de l'utilisation de fonctionnelles différentes dans les canaux normal et d'appariement. Généralement, jusqu'à présent, lorsque l'on voulait effectuer un calcul HFB, on choisissait une interaction ou fonctionnelle dans le canal normal et une autre interaction, simplifiée, dans le canal d'appariement [68, 69]. D'autre part, concernant les sauts brutaux, ils sont causés par la présence du terme dépendant en densité lorsque la puissance de celle-ci est fractionnaire [21, 22, 70].

En conclusion, malgré un certain succès dans la description des noyaux à l'approximation du champ moyen, les forces de Skyrme standards ne peuvent donc pas être utilisées correctement au-delà du champ moyen. C'est une limitation de taille pour l'étude des noyaux déformés, de la fission des noyaux lourds, des modes collectifs, *etc.*

2.2. Nouvelles interactions de Skyrme généralisées

Afin de ne plus être confronté aux pathologies citées dans le paragraphe précédent, il a été nécessaire de : (i) remplacer le terme dépendant en densité, simulant les corrélations à N corps dans le milieu par un pseudo-potential d'interaction à trois corps, incluant des termes en gradients jusqu'à l'ordre deux, et un potentiel d'interaction de contact à quatre corps ; (ii) calculer la fonctionnelle dérivant de ces potentiels, dans les canaux normaux et d'appariement. Ces points ont été traités lors du travail de thèse de J. Sadoudi [23] à l'exception du calcul des termes à 4 corps de la fonctionnelle qui a été effectué au début de ce travail de thèse. Le terme d'interaction à 4 corps a été introduit pour mieux satisfaire aux contraintes de stabilité imposées (voir chapitre III).

2.2.1. Pseudo-potential avec termes d'interaction à 2, 3 et 4 corps

Désormais, le pseudo-potential d'interaction se décompose en trois contributions :

$$v_{\text{Sk}} = v_{\text{Sk}}^{(2)} + v_{\text{Sk}}^{(3)} + v_{\text{Sk}}^{(4)}. \quad (2.20)$$

Les calculs détaillés sur la construction des potentiels $v_{\text{Sk}}^{(3)}$ et $v_{\text{Sk}}^{(4)}$ sont donnés dans les articles [24, 57]. Exceptée l'absence du terme dépendant de la densité, le contenu du potentiel d'interaction à 2 corps ne change pas :

$$v_{\text{Sk}}^{(2)}(\mathbf{r}) = t_0 (\hat{\mathbf{1}}_2 + x_0 \hat{P}_{12}^\sigma) \hat{\delta}_{12}^r \quad (2.21a)$$

$$+ \frac{1}{2} t_1 (\hat{\mathbf{1}}_2 + x_1 \hat{P}_{12}^\sigma) (\hat{\mathbf{k}}_{12}^{\dagger 2} \hat{\delta}_{12}^r + \hat{\delta}_{12}^r \hat{\mathbf{k}}_{12}^2) \quad (2.21b)$$

$$+ t_2 (\hat{\mathbf{1}}_2 + x_2 \hat{P}_{12}^\sigma) \hat{\mathbf{k}}_{12}^\dagger \hat{\delta}_{12}^r \cdot \hat{\mathbf{k}}_{12} \quad (2.21c)$$

$$+ iW_0 \hat{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{k}}_{12}^\dagger \times \hat{\delta}_{12}^r \hat{\mathbf{k}}_{12}). \quad (2.21d)$$

Les opérateurs ont déjà été définis en début de chapitre dans les équations (2.2). Dans sa forme finale, le potentiel d'interaction à 3 corps prend la forme :

$$v_{\text{Sk}}^{(3)}(\mathbf{r}) = u_0 \hat{\delta}_{13}^r \hat{\delta}_{23}^r \quad (2.22a)$$

$$+ \frac{1}{2} u_1 (\hat{\mathbf{1}}_3 + y_1 \hat{P}_{12}^\sigma) (\hat{\mathbf{k}}_{12}^{\dagger 2} \hat{\delta}_{13}^r \hat{\delta}_{23}^r + \hat{\delta}_{13}^r \hat{\delta}_{23}^r \hat{\mathbf{k}}_{12}^2) \quad (2.22b)$$

$$+ u_2 (\hat{\mathbf{1}}_3 + y_{21} \hat{P}_{12}^\sigma) \hat{\mathbf{k}}_{12}^\dagger \hat{\delta}_{13}^r \hat{\delta}_{23}^r \cdot \hat{\mathbf{k}}_{12} \quad (2.22c)$$

$$+ u_2 y_{22} \hat{\mathbf{k}}_{12}^\dagger \hat{\delta}_{13}^r \hat{\delta}_{23}^r \cdot \hat{\mathbf{k}}_{12}, \quad (2.22d)$$

où (2.22a) correspond au terme de contact. Les termes restants EQS. (2.22b)-(2.22d), sont des dépendances en vitesse. Pour terminer, le terme du 4 corps de contact se réduit à :

$$v_{\text{Sk}}^{(4)}(\mathbf{r}) = v_0 \hat{\delta}_{13}^r \hat{\delta}_{23}^r \hat{\delta}_{34}^r. \quad (2.23)$$

Cette nouvelle forme d'interaction EQ. (2.20) dépendra de quatorze paramètres :

$$\left\{ t_0, x_0, t_1, x_1, t_2, x_2, W_0, u_0, u_1, y_1, u_2, y_{21}, y_{22}, v_0 \right\}. \quad (2.24)$$

2.2.2. Nouvelle forme de la fonctionnelle

On dérive la nouvelle fonctionnelle, à partir de la formule (2.3). La densité d'énergie \mathcal{E}_{Sk} se décomposera maintenant en une somme de sept termes :

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}} = \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho} + \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho\rho} + \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho\rho\rho} + \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa} + \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa\rho} + \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa\rho\rho} + \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa\kappa\kappa}, \quad (2.25)$$

où les quatre dernières contributions sont dues aux corrélations d'appariement entre les nucléons. Les trois contributions au champ moyen sont :

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho} = \sum_{t=0,1} \left\{ A_t^\rho \rho_t \rho_t + A_t^\tau \rho_t \tau_t + A_t^{\nabla\rho} \nabla \rho_t \cdot \nabla \rho_t + \frac{1}{2} A_t^J \mathbf{J}_t \cdot \mathbf{J}_t + A_t^{\nabla J} \nabla \mathbf{J}_t \cdot \rho_t \right\}, \quad (2.26a)$$

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho\rho} = B_0^\rho \rho_0 \rho_0 \rho_0 + B_1^\rho \rho_0 \rho_1 \rho_1 \quad (2.26b)$$

$$+ B_0^\tau \tau_0 \rho_0 \rho_0 + B_{10}^\tau \tau_0 \rho_1 \rho_1 + B_1^\tau \tau_1 \rho_0 \rho_1$$

$$+ B_0^{\nabla\rho} \nabla_\mu \rho_0 \nabla_\mu \rho_0 \rho_0 + B_{10}^{\nabla\rho} \nabla_\mu \rho_0 \nabla_\mu \rho_1 \rho_1 + B_1^{\nabla\rho} \nabla_\mu \rho_1 \nabla_\mu \rho_1 \rho_0$$

$$+ B_0^J J_{0,\mu\nu} J_{0,\mu\nu} \rho_0 + B_{10}^J J_{0,\mu\nu} J_{1,\mu\nu} \rho_1 + B_1^J J_{1,\mu\nu} J_{1,\mu\nu} \rho_0,$$

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\rho\rho\rho\rho} = D_0^\rho \rho_0 \rho_0 \rho_0 \rho_0 + D_{10}^\rho \rho_0 \rho_0 \rho_1 \rho_1 + D_1^\rho \rho_1 \rho_1 \rho_1 \rho_1. \quad (2.26c)$$

Les quatre contributions dans le canal d'appariement sont :

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa} = \sum_{q=1,2} \{A^{\tilde{\rho}} \tilde{\rho}_q \tilde{\rho}_q + A^{\tilde{\tau}} \tilde{\rho}_q \tilde{\tau}_q + A^{\nabla\tilde{\rho}} \nabla \tilde{\rho}_q \cdot \nabla \tilde{\rho}_q + \frac{1}{2} A^{\tilde{J}} \tilde{J}_q \cdot \tilde{J}_q + A^{\nabla\tilde{J}} \nabla \cdot \tilde{J}_q \tilde{\rho}_q\}, \quad (2.27a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa\rho} = & \sum_{q_1=1,2} \{B^{\tau_1\tilde{\rho}_1\tilde{\rho}_1} \tau_{q_1} \tilde{\rho}_{q_1} \tilde{\rho}_{q_1} + B^{\nabla\tilde{\rho}_1\nabla\tilde{\rho}_1\rho_1} \nabla_{\mu} \tilde{\rho}_{q_1} \nabla_{\mu} \tilde{\rho}_{q_1} \rho_{q_1} + 2 B^{\nabla\tilde{\rho}_1\nabla\rho_1\tilde{\rho}_1} \nabla_{\mu} \tilde{\rho}_{q_1} \nabla_{\mu} \rho_{q_1} \tilde{\rho}_{q_1} \\ & + B^{\tilde{J}_1\tilde{J}_1\rho_1} \tilde{J}_{q_1,\mu\nu} \tilde{J}_{q_1,\mu\nu} \rho_{q_1} + 2 B^{\tilde{J}_1J_1\tilde{\rho}_1} \tilde{J}_{q_1,\mu\nu} J_{q_1,\mu\nu} \tilde{\rho}_{q_1}\} \\ & + \sum_{q_1 \neq q_2} \{B^{\tilde{\rho}_1\tilde{\rho}_1\rho_2} \tilde{\rho}_{q_1} \tilde{\rho}_{q_1} \rho_{q_2} + 2 B^{\tilde{\tau}_1\tilde{\rho}_1\rho_2} \tilde{\tau}_{q_1} \tilde{\rho}_{q_1} \rho_{q_2} + B^{\tau_2\tilde{\rho}_1\tilde{\rho}_1} \tau_{q_2} \tilde{\rho}_{q_1} \tilde{\rho}_{q_1} \\ & + B^{\nabla\tilde{\rho}_1\nabla\tilde{\rho}_1\rho_2} \nabla_{\mu} \tilde{\rho}_{q_1} \nabla_{\mu} \tilde{\rho}_{q_1} \rho_{q_2} + 2 B^{\nabla\tilde{\rho}_1\nabla\rho_2\tilde{\rho}_1} \nabla_{\mu} \tilde{\rho}_{q_1} \nabla_{\mu} \rho_{q_2} \tilde{\rho}_{q_1} \\ & + B^{\tilde{J}_1\tilde{J}_1\rho_2} \tilde{J}_{q_1,\mu\nu} \tilde{J}_{q_1,\mu\nu} \rho_{q_2} + 2 B^{\tilde{J}_1J_2\tilde{\rho}_1} \tilde{J}_{q_1,\mu\nu} J_{q_2,\mu\nu} \tilde{\rho}_{q_1}\}, \end{aligned} \quad (2.27b)$$

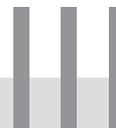
$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa\rho\rho} = \sum_{q=1,2} D^{\tilde{\rho}_1\tilde{\rho}_1\rho_2\rho_2} \tilde{\rho}_q \tilde{\rho}_q \rho_{\bar{q}} \rho_{\bar{q}}, \quad (2.27c)$$

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}^{\kappa\kappa\kappa\kappa} = \sum_{q=1,2} D^{\tilde{\rho}_1\tilde{\rho}_1\tilde{\rho}_2\tilde{\rho}_2} \tilde{\rho}_q \tilde{\rho}_q \tilde{\rho}_{\bar{q}} \tilde{\rho}_{\bar{q}}. \quad (2.27d)$$

où la notation \bar{q} sert à échanger l'indice d'isospin, soit $\bar{q} = 3 - q$. Les constantes de couplage sont toutes définies dans l'annexe A. La forme la plus générale de la fonctionnelle à trois corps, incluant les termes impairs par renversement du temps et autorisant le mélange d'états de proton et neutron, est fournie dans l'article de Sadoudi *et al.* [57]. Les expressions complètes pour le quatre corps sont données dans [24].

2.3. Conclusion

Depuis sa première publication [5] jusqu'à nos jours, l'interaction de Skyrme a été soumise à de nombreuses modifications afin de mieux reproduire les propriétés des noyaux. Nombre d'entre-elles ont été introduites pour l'étude de conditions physiques particulières : matière dense en astrophysique, rôle de l'interaction tenseur... Parmi elles, une modification profonde a été introduite [12] afin de reproduire avec satisfaction le point de saturation de la matière nucléaire. De là est né le terme dépendant en densité dans l'interaction. Cependant, il s'avère que sa présence n'est pas entièrement bénéfique pour le modèle puisqu'elle est à l'origine de plusieurs pathologies liées à l'utilisation des forces de Skyrme au-delà du champ moyen. Pour pallier ces problèmes, J.Sadoudi [23] a développé durant son travail de thèse une véritable interaction de Skyrme à 3-corps, jusqu'à l'ordre deux en gradients, substituant cette dépendance en densité. Un terme de contact à 4-corps a été ajouté pour satisfaire au mieux les diverses contraintes du modèle. Cette nouvelle interaction de Skyrme, généralisée, sera ainsi directement utilisable pour effectuer des calculs multi références (au-delà du champ moyen) sans faire appel à des techniques de régularisation [22]. Au cours de ce travail de thèse, nous avons cherché à ajuster les paramètres de ces nouvelles interactions, utilisées à la fois dans le canal normal et d'appariement.



Protocole d'ajustement des paramètres

Résumé : Nous présenterons dans ce chapitre le protocole d'ajustement des paramètres de nouvelles interactions de Skyrme. Ce protocole est basé sur des contraintes : dans la matière nucléaire infinie, dans les noyaux, ainsi que sur la stabilité des interactions.

Sommaire

3.1. Introduction	27
3.1.1. Stratégie	28
3.1.2. Méthode des moindres carrés	29
3.1.3. Algorithmes de minimisation	30
3.2. Contraintes	32
3.2.1. Matière nucléaire infinie symétrique (INM)	32
3.2.2. Matière nucléaire infinie asymétrique (AINM)	36
3.2.3. Matière de neutrons (PNM)	38
3.2.4. Matière infinie polarisée	39
3.2.5. Instabilités dans la matière infinie	39
3.2.6. Noyaux	43
3.2.7. Appariement	45
3.3. Protocole d'ajustement : épilogue	46

3.1. Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté une nouvelle forme d'interaction de Skyrme. La fonctionnelle dérive maintenant d'un pseudo-potentiel d'interaction entre les nucléons et non plus d'un pseudo-potentiel dépendant de la densité (voir chapitre II). Le nombre de paramètres libres M augmente alors sensiblement et nous chercherons maintenant à ajuster une interaction attractive dans le canal d'appariement qui ne génère pas d'instabilités dans la matière nucléaire [29]. On ne peut donc plus se satisfaire de l'ancien protocole établi pour les forces de la famille SLy [14, 16]. La construction d'un protocole d'ajustement est délicate. La qualité des prédictions issues d'une paramétrisation en dépend très fortement. Le choix des observables à contraindre est donc crucial. Dans notre cas, la structure de l'interaction est complètement nouvelle, les travaux passés pourront uniquement nous servir de base pour sa construction. L'optimisation ainsi que la finalisation du protocole devront se faire, « à

tâtons », par l'expérience, en fonction des caractéristiques des paramétrisations préliminaires obtenues.

3.1.1. Stratégie

La première chose à faire lorsque l'on veut ajuster les paramètres d'une interaction de Skyrme est de choisir un ensemble de propriétés nucléaires qui permettent de contraindre au mieux tous les termes de l'interaction. Dans cet ensemble, il faut savoir déterminer l'importance relative de chacune de celle-ci, autrement dit, leur donner un poids. Il est évident que pour un même ensemble de données, les poids relatifs joueront un rôle primordial sur la qualité de la paramétrisation.

Types d'observables

Le choix sur cet ensemble de contraintes est aussi limité par un temps de calcul très vite croissant avec le nombre et surtout le type de données choisies. On distinguera parmi ces contraintes :

- les propriétés dans des milieux idéaux comme la matière nucléaire (semi-)infinie. Elles seront appelées pseudo-observables, car elles ne sont pas mesurables expérimentalement. Elles correspondent à des valeurs extrapolées dans ces milieux à partir de l'expérience ou provenant de calculs réalistes effectués avec une interaction NN nue [11] ;
- les propriétés des noyaux (masses, rayons, ...) sont, quant à elles, des observables puisqu'elles peuvent être mesurées expérimentalement ou extraites de résultats expérimentaux de manière assez directe.

Les pseudo-observables de la matière nucléaire infinie s'expriment analytiquement, de plus elles contraignent fortement le comportement de l'interaction au cœur des noyaux (*bulk*). Ce sont donc des contraintes de choix pour un protocole d'ajustement. Le fait d'avoir des expressions analytiques permet également d'exprimer les paramètres de la force, notés p_i , directement en fonction de ces pseudo-observables \mathcal{O}_i . Ainsi nous pourrions utiliser cette expression des paramètres de la force en fonction d'un jeu d'observables afin d'initialiser l'ajustement des paramètres avec une interaction initiale satisfaisant les propriétés de la matière nucléaire infinie.

Pièges et problèmes à résoudre

Au cours de la construction d'un protocole d'ajustement, nous pouvons être confrontés à trois problèmes majeurs liés à tout problème d'optimisation en physique, que ce soit avec des modèles linéaires ou non linéaires comme dans notre cas :

- le nombre de paramètres doit être plus petit que le nombre d'observables à reproduire. On parle alors de problème surcontraint. Si le choix des propriétés n'est pas judicieux, la bonne reproduction de certaines propriétés mises en contrainte dans l'ajustement pourra détériorer la reproduction d'autres, incluses ou non dans le protocole. Il est donc important de mettre en contrainte un ensemble varié d'observables permettant de décrire au mieux toutes les propriétés de l'interaction. Les prédictions effectuées

sur des observables non contraintes seront appelées prédictions externes, celles sur les contraintes, prédictions internes ;

- lorsque le nombre de paramètres est très grand [61], il devient très difficile de rassembler assez de données expérimentales pour atteindre un nombre de contraintes suffisant. L'ajout d'un nombre important de masses et rayons à calculer augmente sensiblement le temps nécessaire à l'ajustement des paramètres ;
- le dernier problème, et sûrement le plus délicat à traiter, est celui de l'existence de corrélations entre les observables sur lesquelles notre choix se porte. Il se peut, par exemple, que l'on ait choisi des contraintes antagonistes entre elles. L'amélioration de l'une se fera en dégradant l'autre (ou plusieurs autres). La recherche de la paramétrisation optimale aura alors des difficultés à converger et il deviendra très difficile d'améliorer sensiblement les résultats donnés par les paramétrisations finales. Depuis quelques années, beaucoup d'auteurs effectuent des analyses de sensibilité aussi appelées analyses covariantes afin d'optimiser leurs protocoles d'ajustement [17, 31, 71, 72].

Nous avons porté une grande attention sur ce dernier point puisque la structure de notre fonctionnelle est nouvelle. Les corrélations entre les différentes observables, les quantités analytiques ont changé par rapport à ce que l'on connaissait avant avec les fonctionnelles standard. Un travail exploratoire, en utilisant de simples analyses de sensibilité et corrélations, nous a permis de comprendre quels sont les rôles des nouveaux termes à 3 et 4 corps dans la fonctionnelle et comment s'effectue le réarrangement avec les termes à 2 corps.

3.1.2. Méthode des moindres carrés

L'optimisation des paramètres de l'interaction est effectuée avec une méthode des moindres carrés.

Soit un modèle physique $\mathcal{F} \equiv \{f_1, f_2, \dots, f_M\}$, dépendant de N paramètres p_i et où les M fonctions f_i permettent de calculer des valeurs théoriques d'observables $\mathcal{O}_i^{\text{th}}$:

$$\mathcal{F}(\mathbf{p}) = \mathcal{O}^{\text{th}}. \quad (3.1)$$

Lorsque l'on détermine l'ensemble des valeurs théoriques pour les observables \mathcal{O}^{th} , on dit que l'on résout le *problème direct* pour notre modèle. Dans notre cas, on cherche à résoudre le *problème inverse*, car on recherche l'ensemble des paramètres idéaux \mathbf{p}_0 qui rendra nos prévisions théoriques les plus proches possible des données expérimentales à ajuster :

$$\text{Direct : } \mathcal{F}(\mathbf{p}) = \mathcal{O}^{\text{th}}, \quad \text{Inverse : } (\mathcal{F})^{-1} \mathcal{O}^{\text{exp}} = \mathbf{p}_0. \quad (3.2)$$

Dans notre cas, $(\mathcal{F})^{-1}$ n'existe pas, car beaucoup de contraintes sont issues de calculs auto cohérents du fait de l'utilisation de théories de champ moyen. L'autre raison est qu'il y a plus de contraintes que de paramètres. On parle alors de *problème mal posé*. Nous déterminerons la paramétrisation optimale \mathbf{p}_0 en minimisant la quantité $\sum_i (\mathcal{O}_i^{\text{th}} - \mathcal{O}_i^{\text{exp}})^2$. Il faut également prendre en compte les tolérances $\Delta \mathcal{O}_i$ dans lesquelles on peut inclure les erreurs expérimentales $\Delta \mathcal{O}_i^{\text{exp}}$ ou encore des intervalles de confiance $\Delta \mathcal{O}_i^{\text{conf}}$ pour des pseudo-observables. Pour terminer, on peut donner un poids w_i à chaque contrainte pour imposer plus ou moins fortement au modèle de décrire l'observable associée. Ce dernier paramètre peut évidemment être absorbé dans le terme d'erreur globale $\Delta \mathcal{O}_i$. Les tolérances n'étant pas exactement déterminées, nous nous laisserons la liberté de les modifier « à la main » ce qui sera formellement

équivalent à modifier individuellement les poids des contraintes. Nous aurons donc $w_i = 1$ pour toutes les observables. Tous ces ingrédients permettent alors de construire une fonction de mérite, encore appelée fonction de pénalité que l'on notera χ^2 :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^M \chi_i^2 \quad \text{avec} \quad \chi_i^2 = \left(\frac{f_i(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i^{\text{exp}}}{\Delta \mathcal{O}_i} \right)^2. \quad (3.3)$$

où l'on rappelle que M est le nombre total de contraintes sur l'ajustement. On peut inclure dans les tolérances des erreurs d'origines différentes :

$$\Delta \mathcal{O}_i^2 = (\Delta \mathcal{O}_i^{\text{exp}})^2 + (\Delta \mathcal{O}_i^{\text{th}})^2 + (\Delta \mathcal{O}_i^{\text{num}})^2, \quad (3.4)$$

où l'erreur expérimentale $\Delta \mathcal{O}_i^{\text{exp}}$ est donnée par les expérimentateurs. L'erreur théorique, $\Delta \mathcal{O}_i^{\text{th}}$ est due au fait que le modèle n'est pas exact. L'évaluation de ce type d'erreur sur chaque observable est très délicate. Enfin les erreurs numériques, $\Delta \mathcal{O}_i^{\text{num}}$, sont causées par les méthodes numériques employées pour effectuer les calculs d'observables. Elles dépendent à la fois des techniques, mais aussi de tous les paramètres internes liés aux programmes de simulations comme les pas de discrétisations, les tailles de boîtes, les nombres d'états maximums d'une base, les coupures en énergie, *etc.* Pour notre part, ces erreurs sont petites et pourront être négligées devant les deux autres. Dans le cas d'un modèle physique précis, on pourra prendre $\Delta \mathcal{O}_i = \Delta \mathcal{O}_i^{\text{exp}}$. Avec l'interaction de Skyrme, la précision du modèle n'est pas assez bonne pour se contenter de l'erreur expérimentale sur les données. Nous devons aussi estimer une valeur $\Delta \mathcal{O}_i^{\text{th}}$ pour toutes les contraintes du protocole. Ce choix sera fait en fonction de notre expérience, nous en discuterons plus loin dans ce chapitre.

Contraintes asymétriques dans la fonction de mérite

Dans certains cas, nous avons besoin de borner inférieurement ou supérieurement une donnée. Ce seront alors des contraintes asymétriques dont les contributions à la fonction de pénalité s'exprimeront sous la forme :

$$\chi_{\mathcal{O}}^2 = e^{-2\beta(\mathcal{O}_i - \mathcal{O}_{i,0})}, \quad (3.5)$$

avec $\beta > 0$ choisit de sorte que la contrainte soit suffisamment forte, mais en veillant également à ce que la fonction de mérite ne varie pas trop brutalement au voisinage de la valeur visée \mathcal{O}_0 . Pour toutes ces contraintes, on fixe $\beta = 10$.

3.1.3. Algorithmes de minimisation

La fonction de mérite, dont on cherche le minimum, est une fonction de N paramètres. L'hypersurface de cette fonction est parsemée d'*extrema* locaux. Plusieurs *minima* semblables peuvent se situer dans zones très proches, ce qui peut poser des problèmes pour la convergence de l'algorithme de minimisation. De plus, en raison des instabilités et du comportement critique de l'appariement, la fonction de mérite n'est pas définie partout dans l'espace des paramètres, ce qui rend le problème de minimisation encore plus délicat.

Méthode de Nelder-Mead

Notre choix s'est porté sur la méthode de Nelder-Mead (NM) [73]. En quelques lignes, cet algorithme débute en définissant un simplexe^[a] à N dimensions, où N est le nombre de paramètres de la fonction à minimiser. Itérativement, la méthode détermine le point du simplexe où la fonction est maximale puis le remplacera par une opération de réflexion par rapport au centre de gravité des $N - 1$ points restants du simplexe. Si la valeur de la fonction en ce nouveau point est inférieure aux valeurs des $N - 1$ points non modifiés, on étire le simplexe dans cette direction, sinon l'hypothèse est faite que l'on est dans une vallée et dans ce cas, on réduit le simplexe sur le point où la fonction est minimale.

Parmi les algorithmes de minimisation les plus utilisés, beaucoup d'entre eux nécessitent l'évaluation des dérivées numériques de la fonction à optimiser. C'est le cas pour les méthodes : du gradient, de Newton, de Levenberg-Marquardt [74]. . . Or ces dérivées numériques peuvent être, selon les cas, délicates à effectuer, ce qui rend une méthode sans gradients, comme Nelder-Mead simple à mettre en œuvre et « passe-partout ». Cependant, la méthode de Nelder-Mead n'est pas exempte de défauts. Sa principale faille est qu'elle converge lentement lorsque le nombre de paramètres à optimiser augmente. De plus, il se peut que les solutions obtenues soient dégénérées entre deux optimisations successives lorsque $N > 1$. Afin de maîtriser ces deux défauts, il faut redémarrer l'algorithme jusqu'à ce que les paramétrisations d'entrée et de sortie restent inchangées. Ceci peut prendre un temps considérable et aller, dans notre cas, de cinq mille à plusieurs dizaines de milliers d'itérations soit un temps de calcul de plusieurs jours à plusieurs semaines. En ce qui nous concerne, nous utiliserons l'algorithme NM afin de rechercher une zone proche d'un *minimum* local, mais nous ne le relancerons pas jusqu'à converger, car cela nécessite beaucoup trop de temps avec une fonctionnelle à quatorze paramètres. Une fois au voisinage d'un *minimum*, on supposera que la fonction de mérite est une fonction quadratique dépendante des M paramètres de l'interaction.

Approximation quadratique du χ^2

L'approximation quadratique du χ^2 consiste à supposer que la fonction de mérite peut être approchée par un polynôme d'ordre 2 vis-à-vis des paramètres du modèle. Autrement dit, on suppose que les observables calculées varient linéairement en fonction des paramètres du modèle. Cela revient aussi à dire que le problème de minimisation, à l'origine non linéaire, peut être approché par un problème linéaire. Cette approximation prend tout son sens si on se place au voisinage d'un *extremum* de la fonction. Certains auteurs se sont inspirés de cette approximation afin de développer des algorithmes de minimisation très élaborés comme POUNderS [17,18]. La linéarisation du χ^2 au voisinage de la paramétrisation optimale peut s'écrire :

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{p}) &\simeq f_i(\mathbf{p}_0) + \sum_{k=1}^N \delta p_k \frac{\partial f_i(\mathbf{p}_0)}{\partial p_k}, \\ &= a_{i0} + \sum_{k=1}^N \delta p_k a_{ik}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

[a]. un simplexe est l'enveloppe convexe d'un ensemble de $(N + 1)$ points utilisé pour former un repère affine dans un espace affine de dimension N . À une dimension ce sera donc un segment, à deux dimensions un triangle, à trois un tétraèdre . . .

En reprenant la définition (3.3) et y substituant (3.6), on obtient une fonction de mérite quadratique, notée χ_{ℓ}^2 :

$$\chi_{\ell}^2 = \sum_{i=1}^M \frac{1}{\Delta \mathcal{O}_i^2} \left(a_{i0} + \sum_{k=1}^N a_{ik} \delta p_k - \mathcal{O}_i^{\text{exp}} \right)^2 \quad (3.7)$$

On recherche le minimum de cette fonction, on doit donc annuler toutes les dérivées premières de χ_{ℓ}^2 par rapport aux N paramètres de l'interaction :

$$\frac{\partial \chi_{\ell}^2}{\partial p_k} = 0 \quad \forall \quad k \in [1, N], \quad \text{soit} \quad A \delta \mathbf{p} = \mathbf{b}, \quad (3.8)$$

On obtient alors aisément les variations δp_k :

$$\delta \mathbf{p} = (A)^{-1} \mathbf{b} \iff \begin{cases} A_{km} = \sum_{i=1}^M \frac{a_{ik} a_{im}}{\Delta \mathcal{O}_i^2}, & (3.9a) \\ b_k = - \sum_{i=1}^M \frac{a_{ik} (a_{i0} - \mathcal{O}_i^{\text{exp}})}{\Delta \mathcal{O}_i^2}. & (3.9b) \end{cases}$$

L'avantage de cette technique est que l'on peut calculer les δp_k en inversant une matrice carrée de dimension N . L'utilisation d'une méthode des différences finies pour résoudre (3.9a) et (3.9b) permettra alors de converger rapidement vers le minimum local de la fonction. La seule subtilité est qu'il faut utiliser un facteur d'amortissement α pour converger : on ne remplace pas \mathbf{p}_0 par $\mathbf{p}_0 + \delta \mathbf{p}$ mais, par $\mathbf{p}_0 + \alpha \delta \mathbf{p}$. Pour 14 paramètres, une vingtaine d'itérations pourra suffire pour obtenir une paramétrisation parfaitement convergée, contre plusieurs milliers ou dizaines de milliers avec Nelder-Mead.

3.2. Contraintes

Nous allons énumérer les contraintes choisies dans le protocole d'ajustement. Leurs valeurs, ainsi que les tolérances, correspondent, dans la mesure du possible, à la moyenne des données fournies dans la littérature. Cependant, nous verrons dans le chapitre VI qu'une partie de ces données ne peuvent être reproduites par les nouvelles interactions de Skyrme. Nous avons donc dû effectuer une série de modifications sur les valeurs à contraindre, mais également sur leurs tolérances jusqu'à l'obtention du protocole final. De ce fait, certaines données visées peuvent être assez différentes des valeurs réelles connues.

3.2.1. Matière nucléaire infinie symétrique (INM)

Les expériences de diffusion électronique et muonique sur des noyaux [75–79] permettent d'extraire leur distribution de proton *via* des modèles simples. Au centre des noyaux lourds, on constate que la densité totale $\rho_0 = \rho_n + \rho_p$ est approximativement constante et peu dépendante du nombre de masse A . Puisque l'interaction entre les nucléons est de très courte portée, les nucléons du cœur des noyaux lourds sont presque insensibles aux effets de taille finie et se comportent alors identiquement à ceux composant un milieu infini ce qui est une justification forte pour l'utilisation de données issues de modèles idéaux comme la matière nucléaire infinie.

Définition

La matière infinie symétrique forme un système idéal composé de protons et de neutrons dans un volume infiniment grand. Ses caractéristiques sont résumées ci-dessous :

- les nombres de neutrons et protons y sont égaux soit $\rho_n = \rho_p = \frac{1}{2}\rho_0$ et $I = \frac{\rho_n}{\rho_0} = 0$;
- ce système est invariant par translation, les fonctions d'ondes des nucléons sont donc des ondes planes ;
- la densité de nucléons est constante ;
- le milieu est saturé en spin et non polarisé ;
- l'interaction coulombienne doit être nulle afin que l'énergie totale du système ne diverge pas ;
- les corrélations d'appariement entre les nucléons sont supposées inexistantes.

Cette matière nucléaire correspond donc à un fluide de Fermi dont le moment de Fermi k_F est fixé par la densité de saturation ρ_{sat} . On peut déterminer une équation d'état pour ce milieu. La densité d'équilibre correspond par définition à ρ_{sat} . L'origine de la saturation est assez complexe et il faut nécessairement un terme répulsif dans l'interaction pour l'assurer. L'étude

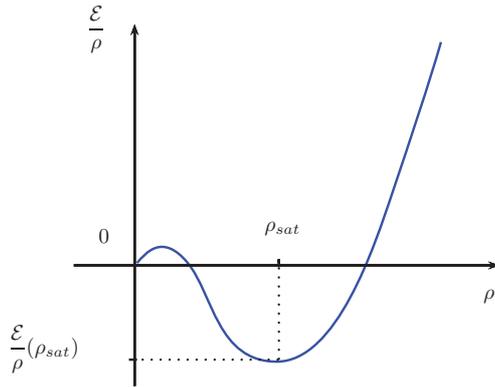


FIG. 3.1: Énergie par nucléons dans la matière nucléaire infinie symétrique. Le point de saturation, minimum d'énergie du système, est indiqué par l'intersection des lignes pointillées.

de ce milieu est triviale lorsque l'on utilise une interaction de Skyrme : tous les termes de la fonctionnelle ne dépendant pas des densités de nucléons $\rho_q(\mathbf{r})$ et cinétiques $\tau_q(\mathbf{r})$ sont nuls puisque la densité y est constante et le milieu est saturé en spin.

Notations spécifiques : Dans la matière nucléaire infinie, il est utile d'introduire deux notations compactes pour les constantes suivantes :

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

Équation d'état et saturation de la matière nucléaire

Pour l'interaction de Skyrme définie EQ. (2.20), l'équation d'état dans la matière nucléaire infinie symétrique est donnée par :

$$\frac{E}{A} \equiv \frac{\mathcal{E}}{\rho_0} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} c_s \rho_0^{2/3} + (A_0^\rho + B_0^\rho \rho_0 + D_0^\rho \rho_0^2) \rho_0 + \frac{3}{5} c_s (A_0^\tau + B_0^\tau \rho_0) \rho_0^{5/3}. \quad (3.10)$$

La dérivée première de l'énergie par nucléon par rapport à la densité est directement reliée à la pression du fluide nucléaire :

$$P \equiv \rho_0^2 \frac{\partial(\mathcal{E}/\rho_0)}{\partial \rho_0} = \frac{2}{5} \frac{\hbar^2}{2m} c_s \rho_0^{\frac{5}{3}} + (A_0^\rho + 2B_0^\rho \rho_0 + 3D_0^\rho \rho_0^2) \rho_0^2 + c_s (A_0^\tau + \frac{8}{5} B_0^\tau \rho_0) \rho_0^{\frac{8}{3}}. \quad (3.11)$$

La densité de saturation correspond à la valeur de ρ qui annule la pression dans le milieu. En compilant les données fournies par la littérature [80–82], nous avons choisi les contraintes suivantes :

$$\rho_{\text{sat}} = 0,160 \pm 0,001 \quad \text{fm}^{-3}, \quad (3.12a)$$

$$\frac{\mathcal{E}}{\rho_0}(\rho_{\text{sat}}) = -16,0 \pm 0,2 \quad \text{MeV}. \quad (3.12b)$$

Au cœur des noyaux, la densité n'est pas constante, elle varie et pourra prendre des valeurs jusqu'à 1,5 fois la densité de saturation or il se peut que l'interaction redevienne attractive pour des valeurs de hautes densités ($\rho > \rho_{\text{sat}}$). Pour éviter ce problème, on ajoute en contrainte une densité ρ_{inf} au-dessous de laquelle l'équation d'état ne doit pas montrer de point d'inflexion. Cette valeur doit être largement supérieure à la saturation, mais doit aussi rester raisonnable vis-à-vis du domaine de densités où l'interaction de Skyrme peut s'appliquer, on choisit donc :

$$\rho_{\text{inf}} = 0,45 \quad \text{fm}^{-3}. \quad (3.13)$$

Cette contrainte est un peu particulière puisqu'elle est asymétrique (on borne, ici, uniquement la valeur minimale). Sa contribution à la fonction de mérite est définie EQ. (3.5).

Incompressibilité de la matière nucléaire

Lorsque l'on calcule la dérivée seconde de l'équation d'état, à la saturation, on évalue la courbure de l'équation d'état. Cette courbure est reliée au coefficient d'incompressibilité K puisque sa valeur permettra de quantifier l'énergie nécessaire pour compresser le fluide nucléaire :

$$K \equiv \frac{18P}{\rho_0} + 9\rho_0^2 \frac{\partial^2(\mathcal{E}/\rho_0)}{\partial \rho_0^2}, \quad (3.14)$$

soit dans matière infinie à l'équilibre :

$$K_\infty \equiv 9\rho_0^2 \left(\frac{\partial^2(\mathcal{E}/\rho_0)}{\partial \rho_0^2} \right)_{\rho_{\text{sat}}} = -\frac{6}{5} \frac{\hbar^2}{2m} c_s \rho_{\text{sat}}^{\frac{2}{3}} + 18B_0^\rho \rho_{\text{sat}}^2 + 6c_s (A_0^\tau + 4B_0^\tau \rho_{\text{sat}}) \rho_{\text{sat}}^{\frac{5}{3}} + 54D_0^\rho \rho_{\text{sat}}, \quad (3.15)$$

L'extraction de ce coefficient est assez délicate et sa valeur est restée pendant longtemps assez mal connue. La méthode la plus fiable est une extraction indirecte à partir de calculs microscopiques (HF, RPA) ou semi-classiques de la résonance géante monopolaire isoscalaire (GMR : E0 ; T=0) [83–85]. L'ouvrage [11] résume quelques techniques possibles pour extraire K_∞ .

Les valeurs les plus récentes pour K_∞ sont de l'ordre de 230 MeV pour une interaction effective de type Skyrme. Avec les nouvelles interactions que l'on ajuste, nous n'avons pas pu obtenir des valeurs d'incompressibilité raisonnables. Elles étaient souvent de l'ordre de 270 – 300 MeV pour les paramétrisations préliminaires obtenues. Nous avons donc fixé une tolérance assez large sur sa valeur :

$$K_\infty = 230 \pm 20 \text{ MeV}. \quad (3.16)$$

Masse effective isoscalaire

L'énergie d'un nucléon individuel dans de la matière nucléaire s'écrit :

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon_k), \quad (3.17)$$

où $\Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$ est la *self-energy* du nucléon qui représente la contribution à l'énergie cinétique de l'interaction de celui-ci avec le milieu dans lequel il « baigne ». En théorie quantique des champs, la *self-energy* d'une particule est une quantité complexe dont la partie imaginaire représente la largeur de la particule. Dans le cadre des interactions de Skyrme, les nucléons sont supposés être sans structure interne et stables. Dans ce cas, sa durée de vie est infinie et sa *self-energy* est purement réelle. On peut ainsi redéfinir un nucléon comme un « quasi-nucléon » indépendant ayant une masse effective m^* telle que :

$$\varepsilon_k = \langle \mathbf{k} | T + U_0 | \mathbf{k} \rangle \equiv \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}, \quad (3.18)$$

On peut alors définir un rapport entre cette masse effective m^* et la masse nue m :

$$\frac{m^*}{m} = \frac{m}{k} \frac{d\varepsilon_k}{dk}, \quad (3.19)$$

ce qui dans le cas d'une fonctionnelle de Skyrme usuelle donne simplement :

$$\left(\frac{m}{m_q^*} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \tau_q}. \quad (3.20)$$

L'équation (3.20) n'est pas une définition universelle. Elle est uniquement valable pour des formes usuelles de fonctionnelles de Skyrme où les termes cinétiques ont toujours une structure en $\rho\tau$ ou $\rho\rho\tau$. Dans le cas où l'on ajoute des termes avec des dérivées d'ordre 4 dans l'interaction, comme on le fait lorsque l'on veut prendre en compte le rôle de l'onde D dans le système [60], on voit apparaître dans la fonctionnelle un tenseur densité cinétique ainsi qu'une densité d'ordre 4. Dans ce cas, il faut utiliser la définition générale (3.19).

La masse effective témoigne directement de la compression/dilatation de la sphère de Fermi induite par l'interaction. Elle influence la densité d'état, ce qui, pour les noyaux, se manifestera par une compression de leurs spectres pour des rapports $m^*/m > 1$, ou une dilatation, pour $m^*/m < 1$. Lors de l'ajustement des paramètres, on ne contraint pas indépendamment la masse effective des protons et des neutrons, mais la masse effective isoscalaire,

égale aux masses effectives des deux espèces lorsque $I = 0$:

$$\left(\frac{m}{m_0^*}\right) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \tau_0} = 1 + \frac{2m}{\hbar^2} [(A_0^\tau + B_0^\tau \rho_0) \rho_0]. \quad (3.21)$$

L'interaction à 4 corps ne dépend pas de l'impulsion \mathbf{k} des nucléons, il s'agit uniquement d'un terme de contact, il est donc normal qu'il n'y ait aucune contribution de sa part dans les termes d'énergie cinétique. D'après des calculs sur la résonance géante quadrupolaire isoscalaire (GQR : E0; T=0) [83], on sait que ce rapport m_0^*/m doit être de l'ordre de 0,8 à 0,9.

Les mauvais résultats obtenus lors d'ajustements préliminaires nous obligent à abaisser la valeur visée vers un rapport plus faible (*cf.* chapitre VI). De plus, pour obtenir une masse effective acceptable, nous avons dû la contraindre très fortement en prenant une tolérance relativement petite sans quoi cette quantité tend à être largement inférieure à 0,5 ce qui n'est pas acceptable. La valeur visée a donc été fixée à :

$$\left(\frac{m_0^*}{m}\right) = 0,70 \pm 0,02 \quad \text{fm}^{-3}, \quad (3.22)$$

Le rapport (3.21) peut être égal à zéro ce qui se traduira par un pôle dans la masse effective (3.19). Ce pôle sera repoussé au-delà d'une densité critique égale à deux fois la saturation à l'aide d'une contrainte asymétrique :

$$\rho_{\text{cr}} = 0,32 \quad \text{fm}^{-3}. \quad (3.23)$$

La contribution dans la fonction de mérite sera de la même forme que (3.5).

3.2.2. Matière nucléaire infinie asymétrique (AINM)

Équation d'état de la matière asymétrique

Dans le but d'étudier tous les noyaux avec $N \neq Z$, dont les noyaux riches en neutrons éloignés de la vallée de stabilité, il faut intégrer dans la procédure des propriétés qui caractérisent la matière nucléaire infinie asymétrique. En partant de la fonctionnelle, on peut construire une équation d'état généralisée pour ce milieu où $I \neq 0$:

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{E}}{\rho_0}(\rho_0, I) &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} c_s F_{5/3}^{(0)} \rho_0^{2/3} + A_0^\rho \rho_0 + A_1^\rho I^2 \rho_0 + B_0^\rho \rho_0^2 + B_1^\rho I^2 \rho_0^2 \\ &+ \frac{3}{5} c_s \left[(A_0^\tau + B_0^\tau \rho_0 + B_{10}^\tau I^2 \rho_0) F_{5/3}^{(0)} + (A_1^\tau + B_1^\tau \rho_0) I F_{5/3}^{(\tau)} \right] \\ &+ D_0^\rho \rho_0^3 (1 - I^2)^2, \end{aligned} \quad (3.24)$$

où l'on définit les fonctions d'asymétrie $F_m^{(0)}$ et $F_m^{(\tau)}$ par :

$$F_m^{(0)} = \frac{1}{2} \left[(1 + I)^m + (1 - I)^m \right], \quad (3.25a)$$

$$F_m^{(\tau)} = \frac{1}{2} \left[(1 + I)^m - (1 - I)^m \right]. \quad (3.25b)$$

Le comportement de l'équation d'état en fonction de l'asymétrie I est assez mal connu. On peut raisonnablement penser qu'au fur et à mesure où l'asymétrie augmente, l'énergie à la saturation va augmenter, la courbure à son voisinage s'adoucir jusqu'à parvenir à un point où la saturation n'est plus possible. On atteint alors un point critique dans l'équation d'état, pour $I = I_{crit}$, fixé lorsque ses dérivées secondes et troisièmes par rapport à ρ_0 s'annulent.

Énergie de symétrie

La première quantité que l'on peut extraire de la matière asymétrique est le coefficient d'asymétrie a_I apparaissant dans la formule de la goutte liquide (1.1). Elle quantifie la variation de courbure de l'équation d'état en fonction du facteur d'asymétrie I . Dans la littérature, cette quantité aussi est souvent notée J :

$$\begin{aligned}
 a_I \equiv J \equiv S(I = 0) &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon / \rho}{\partial I^2} \right)_{I=0}, \\
 &= \frac{1}{3} c_s \frac{\hbar^2}{2m} \rho_0^{2/3} + A_1^\rho \rho_0 + \frac{1}{3} A_0^\tau c_s \rho_0^{5/3} + A_1^\tau c_s \rho_0^{5/3} \\
 &+ B_1^\rho \rho_0^2 + \frac{1}{3} B_0^\tau c_s \rho_0^{8/3} + B_1^\tau c_s \rho_0^{8/3} + \frac{3}{5} B_{10}^\tau c_s \rho_0^{8/3} \\
 &- 2D_0^\rho \rho_0^3.
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

Les analyses avec le modèle LDM donnent des valeurs proches de 30 MeV [86–89]. Dans d'autres approches, avec, par exemple, des méthodes semi-classiques ou microscopiques, on obtient des valeurs plus proches de 28 MeV [59, 90]. Comme c'est le cas pour le coefficient d'incompressibilité nucléaire, l'extraction de cette pseudo-observable est très dépendante du modèle que l'on choisit pour effectuer le calcul. Au cours des ajustements, nous n'avons pas obtenu de résultats satisfaisants pour des interactions ayant des énergies de symétries inférieures à 32 MeV. La valeur finale de l'énergie de symétrie retenue pour le protocole est de :

$$a_I \equiv J = 32 \pm 2 \text{ MeV}. \tag{3.27}$$

Pente de l'énergie de symétrie

La pente de l'énergie de symétrie est une quantité liée à l'épaisseur de la peau de neutrons dans les noyaux $N > Z$ [91–93] :

$$\begin{aligned}
 L &= 3\rho_0 \left(\frac{\partial S}{\partial \rho} \right)_{I=0}, \\
 &= \frac{2}{3} c_s \frac{\hbar^2}{2m} \rho_0^{2/3} + 3A_1^\rho \rho_0 + \frac{5}{3} A_0^\tau c_s \rho_0^{5/3} + 5A_1^\tau c_s \rho_0^{5/3} \\
 &+ 6B_1^\rho \rho_0^2 + \frac{8}{3} B_0^\tau c_s \rho_0^{8/3} + 8B_1^\tau c_s \rho_0^{8/3} + \frac{24}{5} B_{10}^\tau c_s \rho_0^{8/3} \\
 &- 18D_0^\rho \rho_0^3.
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Données	unité	pt. 1	pt. 2	pt. 3
ρ_n	[fm ⁻³]	0,10	0,30	0,35
E/A	[MeV]	11,88	35,94	44,14
$\Delta E/A$	[MeV]	2,00	2,00	2,00

TAB. 3.1: Ensembles des trois points de l'équation d'état de la matière de neutrons contraints lors de l'optimisation des paramètres de l'interaction. Ces valeurs sont tirées de [99].

La valeur numérique de ce coefficient est assez mal connue. En moyennant les données publiées dans [88,94–96], on trouve la valeur et la tolérance suivante :

$$L = 70 \pm 20 \text{ MeV}. \quad (3.29)$$

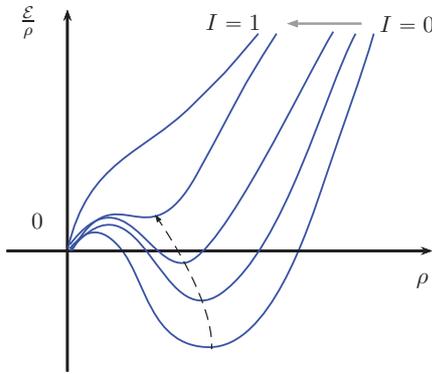


FIG. 3.2: Évolution de l'équation d'état dans la matière nucléaire infinie (ligne bleue) en fonction de l'asymétrie protons/neutrons I . La flèche indique le déplacement du point de saturation en fonction de l'asymétrie croissante.

3.2.3. Matière de neutrons (PNM)

Lorsque le facteur d'asymétrie $I = 1$, on se trouve dans la matière de neutrons. Il n'existe pas d'états liés dans ce milieu. L'étude de son équation d'état et de la pression de neutron dans les régions de basses densités permet ensuite d'évaluer des masses et rayons d'étoiles à neutrons. La valeur canonique attendue pour la masse d'une étoile à neutrons est comprise entre $1,4M_\odot$ et $1,6M_\odot$ [97,98].

L'équation d'état de la matière pure de neutrons est donnée par :

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{E}}{\rho_0}(\rho_0,1) &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} c_n \rho_0^{2/3} + A_0^\rho \rho_0 + A_1^\rho \rho_0 + B_0^\rho \rho_0^2 + B_1^\rho \rho_0^2 \\ &+ \frac{3}{5} c_n \left[(A_0^\tau + B_0^\tau \rho_0 + B_{10}^\tau \rho_0) + (A_1^\tau + B_1^\tau \rho_0) \right] \rho_0^{5/3}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

On remarque l'absence de termes à 4 corps de contact dans ce milieu puisqu'ils doivent satisfaire au principe d'exclusion de Pauli. Ici, nous avons $\rho_0 = \rho_n$. La reproduction de l'équation d'état jusqu'à des densités proches de 1 fm^{-3} ne s'est pas avérée possible comme ce fut le cas avec SLy5. Nous nous sommes donc limités à trois points contraints dans l'équation d'état de la matière de neutrons dont les valeurs sont tirées des calculs de Wiringa *et al.* [99] et sont regroupées dans le tableau 3.1.

3.2.4. Matière infinie polarisée

À l'instar de la contrainte sur la position d'un éventuel point d'inflexion dans l'équation d'état de la matière infinie symétrique, nous avons contraint la position du point d'inflexion dans la matière infinie polarisée en spins. Nous avons observé dans les ajustements préliminaires que les interactions prévoient une transition ferromagnétique aux basses densités (autour de la saturation). Nous avons donc tenté de repousser ce point d'inflexion :

$$\rho_{\text{inf,pola}} = 0,20 \text{ fm}^{-3}. \quad (3.31)$$

3.2.5. Instabilités dans la matière infinie

Il y a quelques années, il a été mis en évidence que certaines paramétrisations de fonctionnelles de Skyrme généraient des instabilités dans la matière nucléaire infinie ainsi que dans les noyaux [30, 58, 100]. Les calculs effectués avec ces fonctionnelles ne convergent pas ou font apparaître des divergences dans l'énergie totale des systèmes étudiés.

Un moyen rudimentaire pour diagnostiquer certaines instabilités est de regarder l'évolution des profils de densités des neutrons et des protons d'un noyau à l'aide d'un code HF. Au cours des itérations, nous observerons, au cœur du noyau, de fortes oscillations des densités de chacune des espèces de nucléons. La densité isovectorielle ρ_1 devient ainsi très importante et peut mener à la séparation des neutrons et des protons, ce qui est non physique. La figure 3.3 représente les profils radiaux des protons et neutrons dans le ^{40}Ca et le ^{56}Ni . On peut voir que pour les fonctionnelles SkP et LNS [101], les profils de densités ne sont pas physiques et une instabilité se développe lorsque le nombre d'itérations croît. SLy5 nous sert ici de référence. Il est désormais connu que SLy5 est instable dans le canal de spin $S = 1$, cependant une telle instabilité ne se manifeste pas dans le cas d'un calcul sur un noyau pair-pair non polarisé comme c'est le cas dans cette figure. On peut donc l'utiliser et la considérer comme « stable » vis-à-vis du calcul que l'on effectue.

Récemment, une étude détaillée de la théorie réponse linéaire [25–27, 67] a permis de déterminer les fonctions réponses de la matière nucléaire infinie non polarisée à température nulle $T = 0$ ou non nulle $T \neq 0$, dans les cas : symétrique ($N = Z$), asymétrique ($N \neq Z$) et pour la matière neutronique. L'analyse de ces fonctions réponses fournit un outil efficace pour détecter les instabilités générées par la plupart des paramétrisations dans la matière nucléaire infinie.

Formalisme de la réponse linéaire

Le formalisme de la théorie de la réponse linéaire permet de calculer les fonctions de réponse $\chi^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \omega)$ du système correspondant aux excitations dans les différents canaux de spin S et d'isospin I . Ces fonctions réponses dépendent de l'énergie ω et du moment \mathbf{q} transférés entre une particule et un trou *via* l'interaction résiduelle V_{ph} .

La description des excitations se fait *via* l'interaction résiduelle particule-trou entre une particule située au-dessus du niveau de Fermi et un trou situé au-dessous. Dans le cadre de la théorie des fluides de Fermi, cette interaction résiduelle correspond à la dérivée seconde de

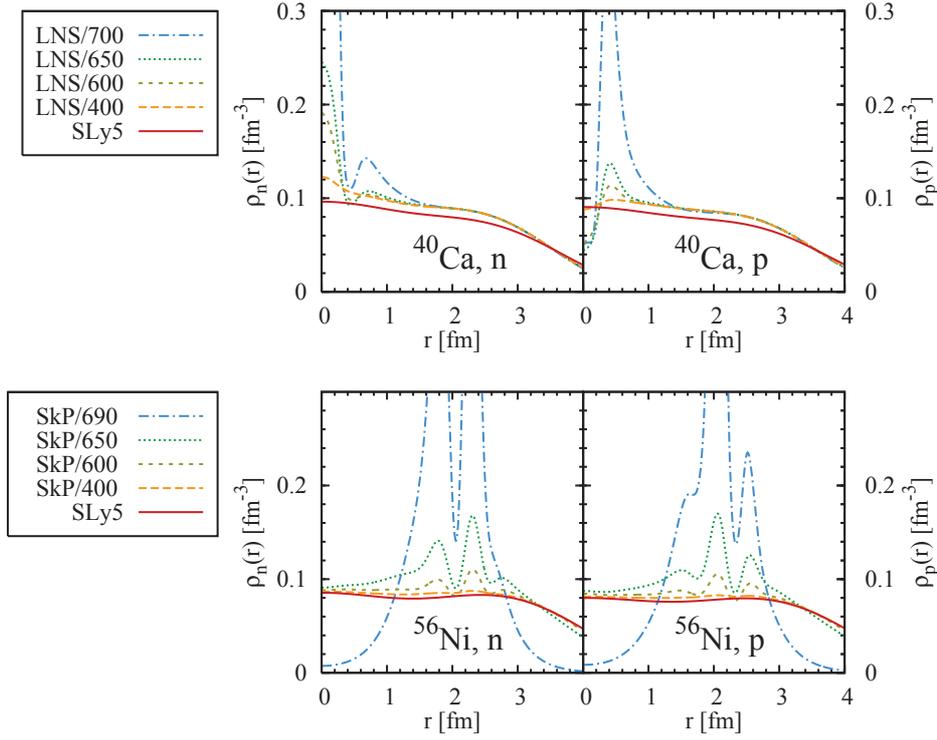


FIG. 3.3 : Évolution des profils de densité des neutrons (figures de gauches) et des protons (figures de droites) en fonction du nombre d'itérations de résolution numérique de l'équation HF pour des fonctionnelles instables. Dans le cas du ^{40}Ca , la fonctionnelle LNS est utilisée pour les calculs. Pour le ^{56}Ni , on utilise SkP. Pour ces deux noyaux, on utilise la paramétrisation SLy5 pour le calcul de référence. Cette figure est tirée de la thèse de T.Lesinski [58].

la densité d'énergie \mathcal{E} par rapport aux densités de nucléons :

$$V_{\text{ph}}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{\delta^2 \mathcal{E}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_1) \delta \rho(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{q})}, \quad (3.32)$$

Afin de calculer les différentes fonctions de réponses du système, il est utile d'introduire la fonction de Green correspondant au propagateur des particules et des trous :

$$G_{\text{HF}}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \omega) = \frac{\theta(k_F - k_1) - \theta(k_F - |\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|)}{\omega + \varepsilon(k_1) - \varepsilon(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|) + i\eta}, \quad (3.33)$$

Une fois l'interaction résiduelle calculée en (3.32), on peut désormais construire la fonction de Green RPA corrélée, en résolvant l'équation de Bethe-Salpeter [25] qui suit :

$$G_{\text{RPA}}^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \omega) = G_{\text{HF}}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \omega) + G_{\text{HF}}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \omega) \sum_{\alpha'} \int \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3} V_{\text{ph}}^{(\alpha, \alpha')}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) G_{\text{RPA}}^{(\alpha')}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_2, \omega), \quad (3.34)$$

on obtient finalement la fonction de réponse $\chi^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \omega)$ de la matière nucléaire infinie :

$$\chi_{\text{RPA}}^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \omega) = g \int \frac{d^3 k_1}{(2\pi)^3} G_{\text{RPA}}^{(\alpha)}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \omega), \quad (3.35)$$

où $\alpha = (S, M, T)$ correspond aux nombres quantiques de spin, projection du spin et d'isospin et g correspond au facteur de dégénérescence de spin-isospin.

Instabilités

Dans le formalisme de la réponse linéaire, on identifiera une instabilité, physique ou non, à un pôle dans la fonction réponse du système $\chi_{\text{RPA}}^{(\alpha)}$ pour une énergie d'excitation nulle $\omega = 0$.

Dans le canal $\alpha = (0, 0, 0)$, les instabilités apparaissant aux basses densités ($\rho < \rho_{\text{sat}}$) sont reliées à la transition de phase liquide-gaz dans la matière nucléaire appelée instabilité spinodale [67]. Elles sont donc physiques.

A contrario, toutes les instabilités détectées dans les canaux $S = 1$ sont d'origine non physique pour un domaine de densités proches de celles rencontrées dans les noyaux. Lorsque l'on ajuste les paramètres d'une interaction de Skyrme, il faut donc veiller à ce que la fonctionnelle ne génère pas de telles instabilités dans la matière infinie d'une densité nulle à des densités similaires et même légèrement supérieures à la densité saturation.

Des indications très fortes semblent montrer que les instabilités observées dans la matière infinie se manifestent aussi dans les milieux finis [28, 29]. La figure 3.4 permet d'illustrer simplement ce lien entre instabilités dans un milieu infini et dans les noyaux. La figure de gauche représente la densité isovectorielle ρ_1 d'un noyau de ^{48}Ca en fonction de r . Les calculs de ces profils de densité sont effectués avec des fonctionnelles SLy5 dont on a modifié la constante de couplage $C_1^{\Delta\rho}$ qui est initialement de l'ordre de 16 MeV fm^5 . Cette constante de couplage contrôle l'intensité des termes dépendant des gradients de la densité isovecteur :

$$E_1^{\rho\Delta\rho} = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{E}_1^{\rho\Delta\rho} = \int d^3\mathbf{r} C_1^{\rho\Delta\rho} \rho_1 \Delta\rho_1. \quad (3.36)$$

Des valeurs positives élevées de cette constante de couplage génèrent des instabilités. La densité isovectorielle, $\rho_1 = \rho_n - \rho_p$, oscille et devient très grande dans le noyau, témoignant d'une séparation des espèces de nucléons. Cette instabilité se manifeste dans le canal scalaire-isovecteur ($S = 0, I = 1$). La figure de droite, quant à elle, représente les densités en fonction du moment transféré q donné, pour lesquelles la réponse du système $\chi_{\text{RPA}}^{(\alpha)}$ est infinie. Elles sont appelées densités critiques ρ_{crit} . Si celles-ci sont trop proches des valeurs de densités explorées dans les noyaux, alors l'interaction générera des instabilités. On voit sur la figure que l'ensemble des densités critiques décroît lorsque la constante de couplage $C_1^{\Delta\rho}$ augmente. Pour des valeurs supérieures à 37 MeV fm^5 , on a $\rho_{\text{crit}} < \rho_{\text{sat}}$. On peut ainsi corrélérer les oscillations de densité dans les noyaux à la présence de densités critiques au voisinage de la densité de saturation.

Par conséquent, on pourra diagnostiquer les instabilités d'une fonctionnelle en regardant les valeurs des densités critiques ρ_{crit} en fonction du moment transféré q , pour chaque canal S, M, T dans la matière nucléaire infinie symétrique et pour chaque canal S, M dans la matière de neutrons. Les calculs pour la matière nucléaire asymétrique [67] ne sont pas encore achevés

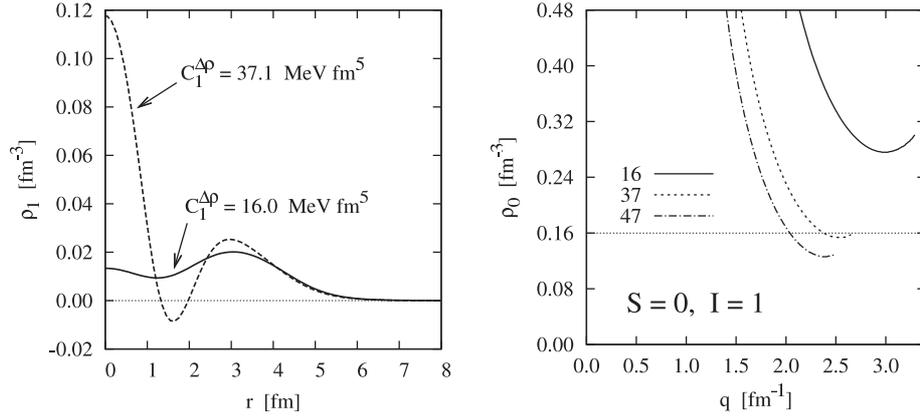


FIG. 3.4 : Gauche : profils de densité isovectorielle ρ_1 d'un noyau de ^{48}Ca calculés avec la SLy5 (ligne noire continue) et une fonctionnelle SLy5 où la valeur de la constante de couplage $C_1^{\Delta\rho}$ a été modifiée (tirets noirs). Droite : densités critiques dans la matière nucléaire infinie symétrique en fonction du moment transféré q pour le canal $S = 0, I = 1$ évaluées avec trois fonctionnelles dérivées de SLy5 dont la valeur $C_1^{\Delta\rho}$ a été modifiée. Cette figure est tirée d'un *proceedings* de A.Pastore [58].

pour une force avec des termes d'interaction à 3 et 4 corps. Les fonctions de réponse sont purement analytiques, l'impact sur le temps d'exécution d'un ajustement avec contraintes sur la stabilité sera négligeable pour les cas limites où $I = 0$ et $I = 1$.

Critères de stabilité

À la suite d'un travail d'analyse effectué sur différents noyaux, en comparant les résultats de différents codes numériques [29], il a été possible de définir une densité critique limite pour les protons $\rho_p(q)$; limite que l'on notera $\rho_{\text{crit},\text{min}}$. Elle est fixée quelque soit la valeur du moment transféré q , et l'on considèrera une fonctionnelle instable s'il existe un pôle dans les fonctions de réponse pour une densité de proton inférieure à environ 1,2 fois la densité de saturation, soit $0,192 \text{ fm}^{-3}$. Dans la pratique, nous avons utilisé une valeur plus conservatrice ^[b] :

$$\rho_{\text{crit},\text{min}} = 0,26 \text{ fm}^{-3}. \quad (3.37)$$

Pour le protocole d'ajustement, cette valeur reste la même, quels que soient les canaux pour la matière symétrique et la matière de neutrons. Les neuf contraintes seront asymétriques et définies par (3.5). En effet, nous avons réalisé que les fonctionnelles contenant des termes à trois et quatre corps possédaient plus fréquemment que les fonctionnelles standards des pôles à relativement basse densité dans la matière de neutrons et que ces pôles avaient les mêmes effets sur la stabilité des noyaux que les pôles dans la matière symétrique. Un autre critère, non contraint, mais contrôlé *a posteriori*, est qu'il faut que l'évolution des densités auxquelles se manifestent les instabilités ne soit pas une fonction monotone décroissante du moment transféré q .

[b]. La valeur de $0,192 \text{ fm}^{-3}$ s'est avérée insuffisante sans que l'on sache, pour le moment, si cela est dû à la présence de termes à 3 et 4 corps ou au fait que la principale instabilité se manifeste ici dans le canal $S = T = 0$.

3.2.6. Noyaux

Justifications sur le choix des noyaux

Les observables de la matière nucléaire infinie ne peuvent suffire à un ajustement correct des paramètres d'une interaction de Skyrme, car les termes de surface et spin-orbite n'y contribuent pas. Afin d'apporter des informations sur les effets de couches et les effets de taille finie de l'interaction, il faut aussi prendre en compte des observables mesurées ou extraites dans les noyaux. Afin de choisir un ensemble de noyaux adapté, il faut se poser deux questions :

- *Dans quels cas les observables dans les noyaux peuvent-elles être calculées rapidement ?* À l'inverse des pseudo-observables de la matière infinie, les masses, rayons et spectres des noyaux sont déterminés à l'aide de procédures numériques itératives (HF ou HFB) plus ou moins longues à converger. Un noyau sphérique sera plus rapide à calculer qu'un noyau déformé ;
- *Que veut-on reproduire comme propriétés avec l'interaction ?* Dans notre cas, comme il l'est justifié dans l'introduction de cette thèse, nous souhaitons ajuster une paramétrisation pour une interaction de Skyrme, incluant des termes à 3 et 4 corps, capable de décrire les corrélations d'appariement entre les nucléons.

D'après le premier point ci-dessus, nous choisissons un ensemble de noyaux sphériques simplement et doublement magiques. Concernant le second point, la problématique est plus subtile. Au cours des premiers ajustements, nous nous sommes aperçus que la fenêtre dans l'espace des paramètres, permettant à la fois de satisfaire les contraintes dans la matière infinie, plus spécialement, celles sur la stabilité et les contraintes dans le canal d'appariement, était très réduite. L'ajustement est nettement plus délicat que dans le cas d'une force de Skyrme standard, de type SLy4-10.

À cause du comportement critique de l'appariement, il demeure risqué, que d'une itération à l'autre, les masses des noyaux soient évaluées avec ou sans corrélations d'appariement ce qui aura pour conséquence de :

- générer des sauts brutaux dans la fonction de mérite qui pourront alors ralentir ou empêcher la bonne convergence de l'algorithme de minimisation ;
- dans le cas où la paramétrisation ne donne pas d'appariement, nous chercherions à reproduire sans appariement, soit à l'approximation HF, des masses de noyaux dans lesquels l'appariement jouent un rôle important (2 à 3 MeV pour le ^{44}Ca et ^{120}Sn).

Enfin, il est important de rappeler que les ajustements sont, pour l'instant, préliminaires. Il faut commencer par comprendre le comportement de la nouvelle interaction avant d'affiner le protocole avec des contraintes sur des noyaux très déformés. Pour toutes ces raisons, nous portons notre choix sur les noyaux doublement magiques. Néanmoins, il faut également contraindre les propriétés d'appariement de l'interaction, nous ajouterons à notre sélection deux noyaux simplement magiques :

$$^{40}\text{Ca}, \quad ^{48}\text{Ca}, \quad ^{56}\text{Ni}, \quad ^{78}\text{Ni}, \quad ^{100}\text{Sn}, \quad ^{132}\text{Sn}, \quad ^{208}\text{Pb} \quad ^{44}\text{Ca}, \quad ^{120}\text{Sn}.$$

Les noyaux de ^4He et ^{16}O ne contiennent pas assez de nucléons pour être traités correctement avec une théorie de champ moyen, ils ne seront pas pris en compte.

Masses nucléaires et rayons de charge : données expérimentales

À l'exception des ^{56}Ni , ^{78}Ni , ^{100}Sn , on contraint les masses et les rayons des autres noyaux cités ci-dessus. Ces observables sont accessibles expérimentalement, car ces noyaux sont soit :

- stables : ^{40}Ca , ^{44}Ca , ^{48}Ca , ^{120}Sn , ^{208}Pb ;
- radioactifs, mais avec des temps de demi-vie très grands par rapport au temps nécessaire à la mesure d'une masse ou d'un rayon : ^{132}Sn .

Les expériences sur l'étain 100 sont délicates à mener. Tout d'abord, cet isotope est complexe à créer puisqu'il est le produit de réactions nucléaires. Il faut pouvoir l'isoler parmi l'ensemble des éléments générés au cours de ces réactions. De plus, il est émetteur β^+ avec une période radioactive de l'ordre de 0,9 sec [102], ce qui jusqu'à présent n'a permis de déterminer que sa masse. Face aux mêmes types de difficultés techniques, la masse du ^{78}Ni ne peut être estimée que par extrapolation [103, 104].

Dans le tableau 3.2 sont rassemblées les données expérimentales associées aux contraintes fixées sur les noyaux doublement magiques dans la procédure d'ajustement. Les énergies de liaison nucléaires sont extraites à partir des masses atomiques publiées par Audi et Wang [103, 104] auxquelles on a retiré la contribution des électrons à l'aide de la formule empirique :

$$\begin{aligned} B(Z) &= B_{at} - B_{elec}(Z) \\ &= m_{at} - (14,4381 Z^{2,39} + 1,55468 \times 10^{-6} Z^{5,35}). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Les rayons de charges sont, quant à eux, issus de la table fournie par Angeli [105]. Nous contraignons les rayons de protons $\sqrt{\langle R_p^2 \rangle}$ liés aux rayons de charges par :

$$\langle R_p^2 \rangle = \langle R_{ch}^2 \rangle - \langle r_p^2 \rangle - \frac{N}{Z} \langle r_n^2 \rangle, \quad (3.39)$$

où $\langle r_p^2 \rangle$ est le rayon de charge du proton, $\sqrt{\langle r_p^2 \rangle} = 0,877$ fm et $\langle r_n^2 \rangle$ celui du neutron. Même si ce dernier est une particule de charge neutre, à cause de son moment magnétique anormal [106], son rayon quadratique moyen prend une valeur légèrement négative $\langle r_n^2 \rangle = -0,1161$ fm².

Les tolérances sur les masses et rayons de charges sont largement supérieures aux erreurs expérimentales et ont été choisies comme telles : 1 MeV pour les noyaux, 1,5 MeV si $N = Z$ et 2,5 MeV pour les noyaux à couche ouverte. Concernant les rayons, on prend 0,02 fm par défaut et 0,03 fm si $N = Z$ ou si le noyau est à couche ouverte. On anticipe le fait que les propriétés des noyaux $N = Z$ ne sont jamais bien reproduites à l'approximation du champ moyen, d'où une tolérance plus importante. La tolérance sur les masses et rayons de noyaux à couches ouvertes est encore plus importante à cause du comportement critique de l'appariement expliqué au début de cette partie.

Les premières paramétrisations obtenues donnaient des profils de densités très mauvais pour les noyaux lourds, spécialement pour le Plomb 208 dans lequel on observait des oscillations des densités de protons et de neutrons de grandes amplitudes. Afin de limiter ce phénomène, nous avons ajouté une contrainte sur la densité de charge au cœur de ce noyau ($r=0$ fm), telle que :

$$\rho_{ch,Pb} = 0,0628 \pm 0,002. \quad (3.40)$$

Noyau	B	ΔB_{exp}	R_c	ΔR_c
^{40}Ca	-342,034	0,00004	3,4776	0,0019
^{44}Ca	-380,941	0,00002	3,5179	0,0021
^{48}Ca	-415,982	0,00014	3,4771	0,0020
^{56}Ni	-483,953	0,00056	\emptyset	\emptyset
^{78}Ni	-641,742	0,78000	\emptyset	\emptyset
^{100}Sn	-825,130	0,30150	\emptyset	\emptyset
^{120}Sn	-1020,370	0,00036	4,6519	0,0021
^{132}Sn	-1102,673	0,00290	4,7093	0,0076
^{208}Pb	-1635,861	0,00125	5,5012	0,0013

TAB. 3.2: Énergies de liaisons (en MeV) et rayons de charge (en fm) des noyaux contraints. \emptyset signifie qu'il n'existe pas de mesures de l'observable concernée ou que la quantité associée n'est pas contrainte. Pour plus de clarté, on note $R_c = \sqrt{\langle r_{ch}^2 \rangle}$. Les masses sont toutes issues de [103,104] et les rayons de [105].

3.2.7. Appariement

Les calculs numériques HFB nécessitent l'introduction d'un paramètre supplémentaire dans l'interaction. Il s'agit de la fenêtre (*cut-off*) en énergie, autour du niveau de Fermi, dans laquelle on autorise les quasi-particules à s'apparier entre elles. La valeur de ce *cut-off* E_{cut} doit être, au moins, de l'ordre du gap d'appariement. Une valeur élevée donne un appariement plus intense mais nécessitera un temps de calcul trop important (dans les codes 3D). En bon compromis, nous avons fixé :

$$E_{cut} = 8,5 \text{ MeV} . \quad (3.41)$$

Oscillations des masses des noyaux pairs-impairs

L'information la plus simple que l'on puisse interpréter comme une preuve expérimentale de l'appariement est l'oscillation existant entre les masses de noyaux pairs et impairs dans une série isotopique (-barique). En supposant l'énergie de liaison dans un noyau comme une fonction régulière du nombre de nucléons et que tous les autres effets observés proviennent de l'appariement, on peut alors estimer le gap d'appariement en utilisant une formule de différence à trois points, correspondant à la dérivée seconde discrète de l'énergie E_0^A [107] :

$$\Delta(A) = \frac{(-)^A}{2} (E_0^{A+1} - 2E_0^A + E_0^{A-1}) , \quad (3.42)$$

où E_0^A indique l'énergie de liaison d'un noyau de A nucléons. Cette oscillation est causée par le défaut d'énergie de liaison causé par la présence d'un nucléon non apparié dans le cas des noyaux impairs. Il faut cependant remarquer que les oscillations de masses pair-impair peuvent aussi être en partie liées à la déformation des noyaux $N = Z$ légers (oscillations de Jahn-Teller) [108].

Gaps spectraux dans les noyaux

La définition du gap n'est pas univoque, il peut être défini comme :

$$\langle \Delta \rangle_\rho \equiv \frac{\text{Tr}(\hat{\rho} \Delta)}{\text{Tr}(\hat{\rho})}, \quad (3.43)$$

où $\hat{\rho}$ est la matrice densité. On préfère à cette définition, celle du gap spectral donnée par Bender *et. al* [109] :

$$\langle \Delta \rangle_\kappa \equiv \frac{\text{Tr}(\hat{\kappa} \Delta)}{\text{Tr}(\hat{\rho})}, \quad (3.44)$$

avec

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') = -2\sigma\kappa(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}' - \sigma') \quad (3.45)$$

D'après (3.43), le gap est moyenné par rapport à la densité de nucléons, ce qui donne trop d'importance aux états liés profonds où l'appariement est inexistant. Sachant qu'il est le plus actif au voisinage de la surface de Fermi, il est plus profitable de moyenné Δ par rapport au tenseur d'appariement κ , quantité piquée au voisinage de la surface de Fermi.

Le gap n'est pas une observable, sa valeur « expérimentale » est extraite à l'aide de la définition (3.42). On prendra comme seules contraintes les gap spectraux de neutrons dans le ^{44}Ca et ^{120}Sn :

$$\langle \Delta \rangle_\kappa^{44\text{Ca}} = 1,85 \pm 0,10 \text{ MeV}, \quad (3.46a)$$

$$\langle \Delta \rangle_\kappa^{120\text{Sn}} = 1,47 \pm 0,10 \text{ MeV}. \quad (3.46b)$$

L'erreur expérimentale induite par la formule à trois points est négligeable devant la tolérance que l'on choisit. Notre choix initial s'était porté sur le gap dans ^{120}Sn or celui-ci s'est avéré fortement corrélé par des effets de couches subtiles. *A contrario*, l'appariement dû ^{44}Ca se fait sur la couche majeure $f_{7/2}$.

3.3. Protocole d'ajustement : épilogue

L'ensemble des contraintes choisies pour le protocole d'ajustement est résumé dans le tableau 3.3. Nous donnons les valeurs des observables ainsi que leurs tolérances totales associées.

Les tolérances sur chaque observable ont, pour la plupart d'entre elles, été réajustées au fur et à mesure du temps afin d'améliorer la qualité des interactions finales obtenues. Nous avons parfois également ajouté ou retiré des contraintes au protocole, car certaines d'entre elles étaient clairement antagonistes : l'amélioration de l'une provoquait la détérioration de(s) l'autre(s). Le protocole d'ajustement n'est donc pas une science exacte, il serait prétentieux de penser que nous avons trouvé la « recette » universelle et que la paramétrisation qui en découle ne pourrait plus être améliorée. C'est une des raisons pour lesquelles il existe tant de paramétrisations de la fonctionnelle de Skyrme dans la littérature.

Nous n'en discutons pas au cours de ce chapitre, mais il faut garder en tête que l'algorithme de minimisation converge vers des *minima* locaux de la fonction de mérite. Rien ne nous garantit que l'on se trouve dans son minimum absolu. On peut alors se poser la question de savoir *quels critères utiliser pour comparer efficacement plusieurs minima locaux dans une fonction de mérite ?* Mais il n'existe pas pour l'instant de techniques numériques viables et la comparaison doit se faire « à la main ».

Dans le cas où l'on construit plusieurs paramétrisations avec des protocoles très proches, l'extraction des barres d'erreurs sur les paramètres et observables à l'aide des techniques de l'analyse covariante sera un outil de choix pour comparer la qualité de ces différentes paramétrisations sans avoir à passer par une étude systématique des résultats obtenus avec chacune d'entre elles.

Données	\mathcal{O}_i	$\Delta\mathcal{O}_i$	Unités
INM			
ρ_{sat}	0,160	0,001	fm^{-3}
$\mathcal{E}/\rho(\rho_{\text{sat}}, 0)$	-16,0	0,2	MeV
K_{∞}	230,0	20,0	MeV
m_0^*/m	0,70	0,02	
ρ_{inf}	> 0,45	asym	fm^{-3}
ρ_{cr}	> 0,32	asym	fm^{-3}
$\rho_{\text{cr,pola}}$	> 0,20	asym	fm^{-3}
AINM			
a_I	32,0	2,0	MeV
L	70,0	20,0	MeV
PNM			
$\mathcal{E}/\rho(0.10, 1)$	11,88	2,0	MeV
$\mathcal{E}/\rho(0.30, 1)$	35,94	2,0	MeV
$\mathcal{E}/\rho(0.35, 1)$	44,14	2,0	MeV
Énergies de liaison			
^{40}Ca	-342,023	1,5	MeV
^{44}Ca	-380,941	2,5	MeV
^{48}Ca	-415,983	1,0	MeV
^{56}Ni	-483,953	1,5	MeV
^{78}Ni	-641,742	2,0	MeV
^{100}Sn	-825,130	1,5	MeV
^{132}Sn	-1102,673	1,0	MeV
^{208}Pb	-1635,861	1,0	MeV
Rayons de protons			
^{40}Ca	3,3828	0,03	fm
^{44}Ca	3,4325	0,03	fm
^{48}Ca	3,3907	0,02	fm
^{120}Sn	4,5863	0,03	fm
^{132}Sn	4,6475	0,02	fm
^{208}Pb	5,4501	0,02	fm
Autres propriétés			
$\langle\Delta\rangle_{\kappa}^{44}\text{Ca}$	1,85	0,10	MeV
$\langle\Delta\rangle_{\kappa}^{120}\text{Sn}$	1,47	0,10	MeV
$\rho_{\text{ch,Pb}}$	0,0628	0,002	fm^{-3}
E_{cut}	8,5	0,0	MeV
Stabilité			
INM(S, M, T)	$\rho_{\text{crit}} > 0,26$	asym	fm^{-3}
PNM(S, M)	$\rho_{\text{crit}} > 0,26$	asym	fm^{-3}

TAB. 3.3 : Ensemble des contraintes pour l'ajustement de SLyMR1. Les contraintes asymétriques sont identifiées par la valeur « asym » dans la colonne associée aux tolérances.

Estimation des erreurs dans un modèle physique

Résumé : Ce court chapitre est un rappel sur les techniques de base en analyse covariante et il introduit la notion d'erreur en physique. Pour illustrer le tout, nous expliquerons à l'aide d'un ajustement simplifié une partie des concepts et définitions qui seront utilisés par la suite lors de l'ajustement des paramètres de l'interaction de Skyrme.

Sommaire

4.1. Motivations	49
4.2. Définition des différents types d'erreurs	50
4.2.1. Erreur statistique	50
4.2.2. Erreur systématique	51
4.3. Formalisme de l'analyse covariante	51
4.3.1. Hypothèses initiales	51
4.3.2. Matrice de covariance	52
4.3.3. Matrice de corrélation	52
4.4. Modèle simplifié d'ajustement des paramètres	53
4.4.1. Présentation du modèle	53
4.4.2. Ajustement avec un modèle exact	53
4.4.3. Ajustement avec un modèle approché	55
4.4.4. Conclusion	56

4.1. Motivations

Les paramètres de tous les modèles phénoménologiques sont ajustés sur un ensemble de données expérimentales. Ils ne sont que le « reflet » des données que l'on a choisi de contraindre dans le protocole d'ajustement et, sont entachés d'une erreur statistique. Pour toutes ces raisons, on ne peut définitivement pas prendre un résultat numérique brut, le comparer à l'expérience, sans considérer l'erreur générée par l'utilisation de ce modèle.

Il est primordial de se poser la question suivante : « *Sachant qu'un modèle n'est qu'une application simplifiée et réduite de la réalité, quelles en sont les conséquences sur les résultats* »

qu'il fournit ? Quelles sont les incertitudes sur les paramètres causées par l'ajustement ? Et quelles seront alors les erreurs induites sur les prédictions théoriques ? » L'estimation des erreurs associées à l'utilisation de fonctionnelles de Skyrme est un sujet de recherche en plein essor. En physique théorique, comme en physique expérimentale, un résultat n'a de sens que lorsqu'il est fourni avec une incertitude. Sans cela, comment affirmer que la valeur de l'observable obtenue est exacte et parfaitement déterminée ?

C'est donc pour ces raisons qu'il est obligatoire de fournir avec nos résultats des intervalles de confiance. Pour un ajustement de paramètres reposant sur une méthode des moindres carrés, l'accès aux barres d'erreur statistiques s'avère relativement simple. Ce n'est malheureusement que la partie émergée de l'*iceberg* et le traitement complet de tous les types d'erreurs associées à l'utilisation d'un modèle en physique nucléaire est un problème beaucoup plus délicat dont on ne connaît pas encore tous les aspects. Dans ce chapitre, nous allons tenter de répondre aux questions suivantes :

- Comment accéder aux erreurs statistiques sur les paramètres ajustés *via* une méthode des moindres carrés ? Comment en déduire les erreurs statistiques sur des observables prédites ?
- La seule connaissance de l'erreur statistique est-elle suffisante pour juger de la qualité d'un modèle ?
- En quoi les méthodes d'analyse statistique aident-elles à mieux contraindre l'ajustement des paramètres d'un modèle théorique ?

4.2. Définition des différents types d'erreurs

Les incertitudes sur les calculs issus d'un modèle théorique ont généralement des origines variées. Tout d'abord, les mesures expérimentales qui servent à ajuster les paramètres d'un modèle ne sont pas exactes. L'ajustement, basé sur une méthode des moindres carrés, génère également une erreur statistique sur les paramètres ^[a]. Les imperfections du modèle, causées par les diverses approximations utilisées lors des calculs, sont, elles aussi, à l'origine d'incertitudes sur les prédictions. Pour terminer, les erreurs numériques peuvent être prises en compte. Parmi toutes ces erreurs, on en distingue deux types : les erreurs systématiques et statistiques.

4.2.1. Erreur statistique

L'erreur statistique est la plus simple à déterminer pour une majorité de modèles en physique. Lorsque les paramètres du modèle sont ajustés avec une méthode des moindres carrés, leur estimation s'avère très simple grâce aux techniques d'analyse covariante. Nous construirons également des matrices de corrélations entre les paramètres ou entre différentes observables. Ce qui nous donnera alors des informations importantes sur la manière d'optimiser au mieux la fonction de pénalité.

[a]. Ils peuvent en un sens être considérés comme des variables aléatoires, dont la loi, est fonction du modèle et des contraintes de l'ajustement.

4.2.2. Erreur systématique

L'erreur systématique est causée par les défauts intrinsèques à un modèle. En général, il n'existe pas de modèle parfait à utiliser en guise de référence. Quantifier les erreurs systématiques est donc une tâche extrêmement délicate. On peut estimer la systématique en comparant nos données incluant les barres d'erreur statistiques aux données expérimentales existantes, mais comment faire lorsque les données expérimentales n'existent pas ?

4.3. Formalisme de l'analyse covariante

4.3.1. Hypothèses initiales

Soit la fonction de mérite définie dans le chapitre III, \mathbf{p}_0 est la paramétrisation optimale issue de l'ajustement des paramètres, soit :

$$\left. \frac{\partial \chi^2}{\partial p_i} \right|_{p_i=p_{0,i}} = 0 \quad \forall i \in [1, N], \quad (4.1)$$

où N est le nombre de paramètres du modèle étudiés. Au voisinage de ce minimum, $\chi^2(\mathbf{p}_0) \equiv \chi_0^2$, on peut développer la fonction de pénalité en série de Taylor jusqu'à l'ordre 2 :

$$\begin{aligned} \chi^2(\mathbf{p}) &\simeq \chi_0^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} (p_\mu - p_{0,\mu}) (\partial_{p_\mu} \partial_{p_\nu} \chi^2)_{\mathbf{p}_0} (p_\nu - p_{0,\nu}), \\ &\simeq \chi_0^2 + \sum_{\mu, \nu} (p_\mu - p_{0,\mu}) \mathcal{M}_{\mu\nu} (p_\nu - p_{0,\nu}), \end{aligned} \quad (4.2)$$

avec $\hat{\mathcal{M}}$, la matrice Hessienne de la fonction de mérite calculée pour la paramétrisation optimale \mathbf{p}_0 . Par définition, les termes d'ordre 1 sont nuls. Quant à l'ordre 2, il nous renseigne sur la courbure du χ^2 dans toutes les directions de l'espace des paramètres et est représenté par la matrice $\hat{\mathcal{M}}$. Ce développement en série de Taylor est similaire à l'approximation quadratique du χ^2 expliquée en détail dans la partie 3.1.3 du chapitre III. Malgré la non-linéarité des calculs, on peut toujours, au voisinage du minimum, estimer que la fonction de mérite est quadratique et qu'il soit possible de l'approcher par un développement limité.

On peut quantifier un peu plus précisément ce qu'on appelle « voisinage du minimum ». Dans un article récent, Dobaczewski *et al.* [72] définissent un domaine de validité pour ce développement :

$$\frac{1}{s} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \hat{\mathcal{M}} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \leq 1, \quad (4.3)$$

où $s = \chi_0^2 / (M - N)$ est un facteur de renormalisation du χ^2 et M correspond au nombre de contraintes dans l'ajustement.

Il est assez aisé de comprendre que l'information contenue dans cette matrice sera directement reliée aux erreurs statistiques des paramètres du modèle et témoignera de la qualité des contraintes choisies pour l'ajustement de chaque paramètre. Une faible courbure (*minimum* assez plat) témoignera d'un paramètre mal contraint puisqu'une grande variation de celui-ci

ne détériorera pas significativement la fonction de mérite. Le paramètre sera « mal défini » : son erreur statistique sera donc grande. À l’opposé, avec une grande courbure, le χ^2 sera fortement impacté.

4.3.2. Matrice de covariance

En supposant que les paramètres p_i varient de manière à ce que les observables $f_i(\mathbf{p})$ varient linéairement avec les M paramètres du modèle, ce qui est notre cas lorsque l’on se place au voisinage du minimum de la fonction de mérite, on a :

$$f_i(\mathbf{p}) \simeq f_{0,i} + \nabla f_i|_{\mathbf{p}_0} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \quad \text{avec} \quad f_{0,i} = f_i(\mathbf{p}_0), \quad (4.4)$$

En choisissant $2L + 1$ points équidistants ($\mathbf{p}_{-L}, \dots, \mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_L$) autour du minimum de la fonction de mérite, on peut construire la matrice de covariance entre deux observables f_i et f_j telle que :

$$\text{cov}(f_i, f_j) = \frac{1}{2L + 1} \sum_{\ell=-L}^L [(f_{\ell,i} - \langle f_i \rangle) (f_{\ell,j} - \langle f_j \rangle)] \quad \text{avec} \quad f_{\ell,i} = f_i(\mathbf{p}_\ell), \quad (4.5)$$

En linéarisant $f_{\ell,i}$ comme dans l’équation (4.4), on obtient ainsi :

$$\text{cov}(f_i, f_j) \equiv \mathcal{C}_{ij}^{(f)} = \sum_{\mu, \nu=1}^M \frac{\partial f_i}{\partial p_\mu} \mathcal{C}_{\mu\nu}^{(p)} \frac{\partial f_j}{\partial p_\nu}, \quad (4.6)$$

où la matrice $\hat{\mathcal{C}}^{(p)}$ correspond à la matrice de covariance des paramètres optimisés lors de l’ajustement. Elle peut être définie comme l’inverse de la matrice Hessienne $\hat{\mathcal{M}}$ [31] :

$$\mathcal{C}_{\mu\nu}^{(p)} = (\mathcal{M}^{-1})_{\mu\nu}. \quad (4.7)$$

L’erreur statistique correspond à la racine carrée de la variance, soit, pour les paramètres et observables :

$$\Delta p_i = \sqrt{\mathcal{C}_{ii}^{(p)}}, \quad \Delta f_i = \sqrt{\mathcal{C}_{ii}^{(f)}}. \quad (4.8)$$

4.3.3. Matrice de corrélation

On peut construire les matrices de corrélations linéaires associées :

$$\text{cor}(f_i, f_j) \equiv \mathcal{R}_{ij}^{(f)} = \frac{\mathcal{C}_{ij}^{(f)}}{\sqrt{\mathcal{C}_{ij}^{(f)} \mathcal{C}_{jj}^{(f)}}}, \quad \text{cor}(p_i, p_j) \equiv \mathcal{R}_{ij}^{(p)} = \frac{\mathcal{C}_{ij}^{(p)}}{\sqrt{\mathcal{C}_{ii}^{(p)} \mathcal{C}_{jj}^{(p)}}}. \quad (4.9)$$

Chaque élément de cette matrice correspond à la valeur du coefficient de corrélation de Pearson entre les deux quantités concernées. Lorsque $\mathcal{R}_{ij} \rightarrow 1$, elles sont corrélées, *i.e* la variation de l’une mènera à la variation de l’autre dans le même sens d’évolution. Si $\mathcal{R}_{ij} \rightarrow -1$, elles seront anti-corrélées, elles varieront simultanément dans les deux directions opposées. Enfin, si $\mathcal{R}_{ij} \simeq 0$, elles ne sont pas corrélées.

4.4. Modèle simplifié d'ajustement des paramètres

Dans cette section, nous présentons un exemple d'ajustement des paramètres d'un modèle mathématique simple afin de mettre en évidence :

- l'influence du modèle sur la qualité de ses prédictions théoriques ;
- la différence entre les prédictions effectuées dans les domaines interne et externe ;
- la validité des barres d'erreur sur les paramètres ajustés ainsi que leur propagation sur les prédictions effectuées ;
- l'importance cruciale du contenu de la fonction de mérite à minimiser.

4.4.1. Présentation du modèle

Nous ajustons des données expérimentales, générées à l'aide d'un polynôme $P(x)$ du second degré. Ces points, auxquels nous ajoutons un bruit aléatoire pour simuler diverses indéterminations sur les mesures, sont donnés par :

$$P_{exp}(x) = P(x) + \Gamma_{rand}, \quad (4.10a)$$

$$P(x) = \alpha x^2 + \beta x + \gamma, \quad (4.10b)$$

$$\Gamma_{rand} = \delta \Gamma, \quad (4.10c)$$

avec $\alpha = -0,5$, $\beta = 3,0$, $\gamma = 1,0$. Γ est une fonction qui génère aléatoirement des nombres compris entre $-0,5$ et $0,5$. Cette fonction est renormalisée par un facteur δ contrôlant la dispersion que l'on veut donner aux données. Nous ajustons les paramètres de deux modèles différents sur ces données :

- dans le premier cas, nous ajustons les paramètres d'un polynôme du 2nd degré. Le modèle théorique est considéré comme exact ;
- dans le second cas, nous ajustons les paramètres d'un polynôme du 3^{eme} degré. Le modèle est cette fois approché.

4.4.2. Ajustement avec un modèle exact

À l'aide de P_{exp} , nous générons 25 points expérimentaux pour $x \in [0,2 : 5,0]$. Nous choisissons de contraindre les ajustements sur les 15 premiers, pris tous les $x = 0,2$. Nous effectuons 4 ajustements pour 4 valeurs de dispersion δ_i fixées à $\delta = 0,001 ; 0,005 ; 0,01 ; 0,015$. Le polynôme servant à modéliser les données est de degré 2 :

$$f(x) = \alpha_1 x^2 + \beta_1 x + \gamma_1. \quad (4.11)$$

Résultats

La dispersion, par rapport aux points théoriques, représentée par l'écart $P_{exp}(x) - P(x)$, a été choisie de manière à ce qu'elle soit, au maximum, de l'ordre de 10% de la valeur exacte donnée par la fonction $P(x)$. Son influence sera d'autant plus importante que la pente de

disp./param.	α_1	$\Delta\alpha_1$	β_1	$\Delta\beta_1$	γ_1	$\Delta\gamma_1$	χ_0^2
δ_1	-0,497	0,006	2,990	0,020	1,010	0,014	0,0002
δ_2	-0,485	0,030	2,950	0,100	1,049	0,069	0,0069
δ_3	-0,471	0,060	2,900	0,200	1,097	0,139	0,0242
δ_4	-0,456	0,091	2,851	0,299	1,146	0,208	0,0544

TAB. 4.1 : Paramétrisations des fonctions $f(x)$ ajustées pour quatre valeurs de bruit δ_i différentes. Chaque paramètre est fourni avec sa barre d'erreur associée. Les valeurs des paramètres ajustés, en tenant compte des incertitudes, sont compatibles avec les valeurs originales $\alpha = -0,5$, $\beta = 3,0$ et $\gamma = 1,0$. La valeur du minimum de la fonction de mérite χ_0^2 est donnée à titre indicatif.

la courbe de la fonction $P(x)$ sera faible. Le tableau 4.1 résume les résultats des quatre ajustements effectués, on constate que :

- toutes les valeurs obtenues pour α_1 , β_1 et γ_1 sont compatibles avec les véritables valeurs : $\alpha = -0,5$, $\beta = 3,0$ et $\gamma = 1,0$;
- les barres d'erreur sur les paramètres augmentent logiquement avec la dispersion attribuée aux données. Entre chaque série d'ajustements, il existe un facteur commun multipliant toutes les barres d'erreur sur les paramètres. Il est de 5 pour passer de δ_1 à δ_2 , de 2 pour passer de δ_2 à δ_3 puis de 1,5 ;
- Les paramètres de courbure α_1 et d'ordonnée à l'origine γ_1 possèdent les plus grandes barres d'erreur, ce qui peut s'expliquer par l'échantillon sélectionné pour l'ajustement qui n'est pas optimisé pour contraindre fortement la courbure de cette fonction $P(x)$. En prenant, par exemple, des points entre $x = 2$ et $x = 4$, nous pourrions fortement diminuer cette indétermination sur α . L'ordonnée à l'origine n'est pas contrainte directement par la série de données, d'où sa relative indétermination.

Sur la partie gauche de la FIG. 4.1 sont représentés : $P(x)$, les points expérimentaux calculés à l'aide de $P_{exp}(x)$ et les résultats obtenus lors des quatre ajustements effectués pour différentes valeurs de dispersion δ_i sur les points expérimentaux. Les zones en rouge représentent les valeurs des intervalles de confiance définis par les barres d'erreur sur les points calculés. On peut voir que :

- lorsque la dispersion est faible, $\delta < 0,005$, les courbes de $P(x)$ et $f(x)$ sont presque confondues alors que ce n'est plus le cas, pour les deux panneaux inférieurs, avec une dispersion plus importante, plus spécifiquement dans le domaine de prédictions externes ;
- Les barres d'erreur sur les points deviennent plus importantes à partir de $x = 2,5$. On se rapproche du « bord » de la série de points interpolés. Puis, pour $x > 3,0$, les points calculés avec $f(x)$ deviennent des prédictions externes, les barres d'erreurs seront d'autant plus importantes que l'on s'éloignera du domaine de prédictions internes. On observe évidemment la même chose pour $x < 0$ mais par souci de clarté de compréhension, nous restreignons l'intervalle d'étude entre $x = 0$ et $x = 5$;
- L'ajustement avec un modèle exact est un cas trivial et l'on constate que les prédictions, que ce soit dans les domaines interne et externe, sont compatibles avec les données

disp./param.	α_2	$\Delta\alpha_2$	β_2	$\Delta\beta_2$	γ_2	$\Delta\gamma_2$	η_2	$\Delta\eta_2$	χ_0^2
δ_1	0,006	0,008	-0,524	0,040	3,026	0,057	0,999	0,022	0,0003
δ_2	0,028	0,042	-0,621	0,202	3,130	0,283	0,993	0,108	0,0063
δ_3	0,056	0,083	-0,742	0,404	3,260	0,565	0,986	0,216	0,0253
δ_4	0,085	0,125	-0,863	0,606	3,389	0,848	0,979	0,323	0,0570

TAB. 4.2 : Même table que TAB. 4.1 pour l'ajustement de $g(x)$.

expérimentales existantes. Évidemment, si les données expérimentales sont mal connues, les barres d'erreur deviennent importantes et les prédictions externes seront d'une faible précision. Dans le cas où $\delta = 0,015$, les barres d'erreur dans le domaine externe sont de l'ordre de 20 à 25% de la valeur interpolée.

4.4.3. Ajustement avec un modèle approché

Nous réutilisons les 25 points expérimentaux pour $x \in [0,2 : 5,0]$ générés dans la première expérience. Les conditions sont identiques au cas n°1. La fonction dont les paramètres sont ajustés est, cette fois, un polynôme de degré 3 :

$$g(x) = \alpha_2 x^3 + \beta_2 x^2 + \gamma_2 x + \eta_2, \quad (4.12)$$

Résultats

Ce cas d'étude est plus intéressant puisque la fonction employée pour modéliser les données expérimentales est une approximation du cas réel. Dans le tableau 4.2 sont résumés les résultats des quatre ajustements effectués :

- comme dans le premier cas, toutes les valeurs obtenues pour paramètres sont compatibles avec les valeurs des paramètres de $P(x)$. Le paramètre α_2 contrôlant le terme d'ordre 3 en x , absent dans la fonction initiale $P(x)$ est compatible avec zéro ;
- les barres d'erreur sur les paramètres augmentent encore avec la dispersion attribuée aux données. Elles sont supérieures à celles obtenues dans le cas où le cas n°1 ;
- Le paramètre du 3^{ème} degré, α_2 , possède la plus grande barre d'erreur ($\Delta\alpha_2 > \alpha_2$). On vérifie donc bien qu'il n'est pas utile au modèle ;
- Lorsque la dispersion augmente, les barres d'erreur deviennent très importantes. Pour le cas extrême où $\delta = 0,015$, $\Delta\beta_2 \simeq 0,7 \beta_2$. Quant à $\Delta\gamma_2$ et $\Delta\eta_2$, elles aussi sont élevées et de l'ordre de 20 à 30% des valeurs des paramètres ajustés.

On peut remarquer sur la partie droite de la figure 4.1 les choses suivantes :

- les barres d'erreur sur les observables sont beaucoup plus importantes avec $g(x)$ (modèle approché) que pour $f(x)$ (modèle exact). Même avec une faible dispersion ($\delta = 0.005$), l'indétermination sur les prédictions en dehors du domaine où les données sont contraintes devient très importante ;

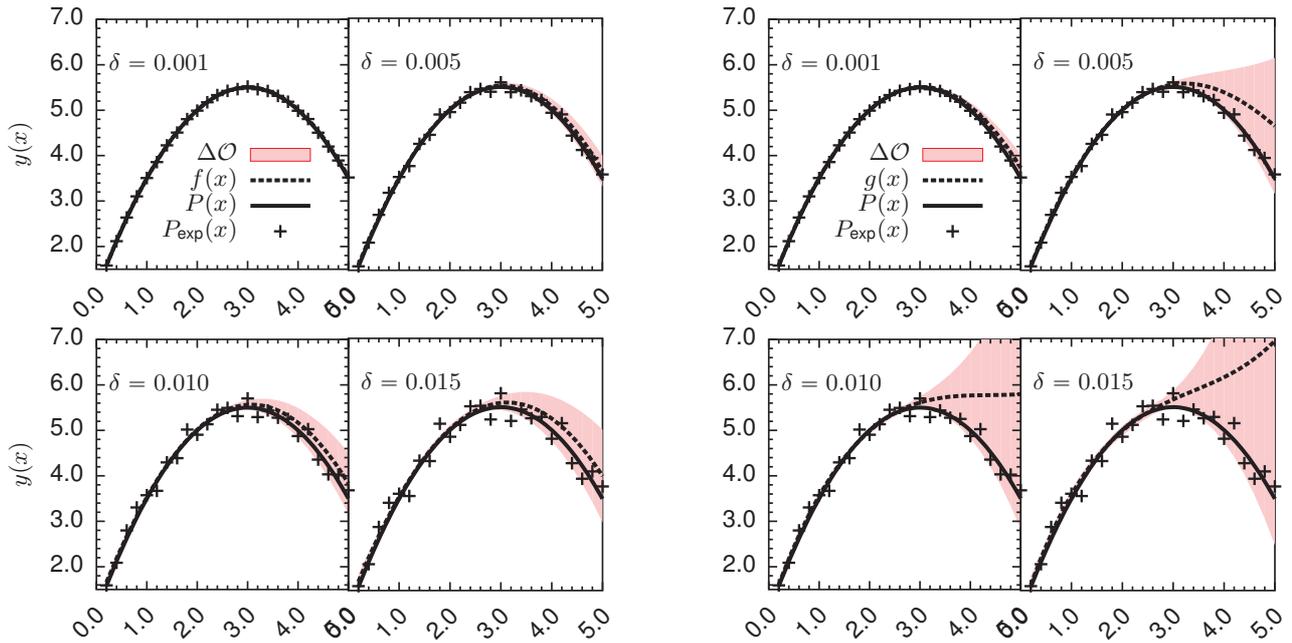


FIG. 4.1 : Représentation des données expérimentales à ajuster (croix noires) calculées à partir d'un polynôme de degré 2, $P(x)$ (ligne continue noire) et des résultats des ajustements pour quatre différentes valeurs de dispersion des données δ . $f(x)$ est un polynôme de degré 2 et $g(x)$ est un polynôme de degré 3. La zone colorée représente les barres d'erreur $\Delta\mathcal{O}$ en fonction de l'abscisse x . L'ajustement est effectué sur les 15 premiers points P_{exp} ; la frontière entre les domaines interne et externe est donc située en $x = 3,0$.

- (f) Pour les deux panneaux inférieurs, α_2 prend une valeur non négligeable. Ainsi, le rôle de la partie trilineaire du polynôme prend de l'importance et les comportements asymptotiques des fonctions $g(x)$ et $P(x)$ divergent;
- (g) Malgré cette divergence, les prédictions dans le domaine externe restent compatibles avec les données réelles puisque la fonction $P(x)$ est toujours comprise dans les barres d'erreur du modèle. Cependant, la qualité des prédictions devient anecdotique et il est inenvisageable de prédire des valeurs d'observables avec de telles barres d'erreur.

4.4.4. Conclusion

L'ajustement de polynômes n'est sûrement pas le moyen le plus réaliste qui soit pour effectuer un parallèle avec l'ajustement des paramètres de l'interaction de Skyrme, mais l'ensemble des résultats obtenus est aisé à interpréter. Dans ce chapitre, nous avons introduit quelques notions associées à l'analyse d'erreur. Parce que le modèle employé ne s'y prêtait pas, nous n'avons pas étudié les matrices de corrélations entre les paramètres du modèle ou encore celles entre les observables contraintes. Il est évident que toutes les données allaient être très corrélées.

D'après l'ensemble des résultats que l'on vient de passer en revue, nous pouvons conclure que :

- fournir des barres d'erreur statistiques sur les paramètres issus d'un ajustement n'est qu'un premier pas vers une analyse approfondie de la validité des résultats donnés par un modèle. Ces erreurs statistiques ne suffisent pas à quantifier entièrement la précision d'un modèle ;
- le choix des données à contraindre sera essentiel pour la robustesse du modèle dont on souhaite construire une paramétrisation. Dans notre cas, le choix des 15 points n'était volontairement pas le plus judicieux. Un meilleur échantillonnage (au voisinage de l'*extremum* de la fonction) améliore sensiblement les résultats ;
- il faut également étudier les corrélations que les données peuvent avoir entre elles afin de ne pas intégrer plusieurs contraintes antagonistes dans le protocole ;
- Les barres d'erreur augmentent très rapidement dans le domaine de prédiction externe.

Ainsi, pour résumer, lorsque l'on ajuste les paramètres d'un modèle, il faudra garder en mémoire les idées suivantes :

- La qualité des données contraintes dans l'ajustement n'est pas l'unique facteur à prendre en compte. Il doit être mis sur un pied d'égalité avec la qualité de l'échantillonnage des propriétés à reproduire. Il faut, dans la mesure du possible, que les données représentent au mieux toute la phénoménologie du modèle et non pas juste un aspect particulier ;
- Dans le cas de modèles approximatifs, il faut bien se souvenir qu'il existe aussi des erreurs systématiques que l'on ne pourra pas toujours déterminer. Les ingrédients choisis pour la fonction de pénalité pourront en partie améliorer en partie ces erreurs. Le restant de cette erreur systématique étant dû à la qualité du modèle physique en lui-même, il faudra alors se pencher sur la physique sous-jacente pour réduire sensiblement cette systématique (termes d'interactions supplémentaires, termes phénoménologiques...).



Propriétés de surface de l'interaction de Skyrme

Résumé : Ce chapitre traite des propriétés de surface des interactions de Skyrme. Cette étude est effectuée dans le cadre de la théorie de champ moyen Hartree-Fock, mais aussi à l'aide d'une méthode semi-classique qui nous permettra d'aboutir à une expression analytique pour l'estimation de l'énergie de surface de ces interactions pouvant contenir des termes tenseurs, termes à 3 et 4 corps. Des corrélations linéaires importantes seront mises en évidence entre les propriétés de fission des noyaux et les énergies de surface d'un large ensemble d'interactions de Skyrme.

Sommaire

5.1. Introduction	60
5.1.1. La matière nucléaire semi-infinie (SINM)	60
5.1.2. Énergie de surface	61
5.2. Formalisme de Skyrme Hartree-Fock dans la matière semi-infinie	62
5.2.1. Équations de Hartree-Fock	62
5.2.2. Densités	63
5.2.3. Solutions des équations de Skyrme Hartree-Fock	63
5.2.4. Extraction de l'énergie de surface	64
5.3. Méthodes semi-classiques	65
5.3.1. Motivations	65
5.3.2. Méthode de Thomas-Fermi étendue (ETF)	65
5.3.3. Méthode de Thomas-Fermi modifiée (MTF)	68
5.4. Résultats	71
5.4.1. Comparatifs MTF vs HF et ETF4	71
5.4.2. Masse effective et renormalisation du développement MTF	73
5.4.3. Corrélations entre énergie de surface et barrières de fission	75
5.5. Conclusion	77

5.1. Introduction

Lorsque l'on cherche à calculer le coefficient de tension de surface a_s d'une force de Skyrme, plusieurs possibilités s'offrent à nous. Une première consiste à calculer un grand nombre de masses de noyaux et ensuite à ajuster les paramètres utilisés dans le modèle de la goutte liquide [3], décrit par l'équation (1.1). Une autre possibilité est de se placer dans un milieu idéal semi-infini [110,111] et d'extraire a_s par le biais d'un calcul de champ moyen HF [112,113] ou de méthodes semi-classiques [114].

5.1.1. La matière nucléaire semi-infinie (SINM)

Le modèle de la matière nucléaire semi-infinie (SINM) offre des intérêts majeurs pour l'étude des propriétés de surface d'une interaction effective. Afin d'isoler la contribution de la surface à l'énergie, on coupe l'interaction coulombienne dans ce milieu. Contrairement à un système fini, le spectre en énergie y est continu (les effets de couches sont inexistantes). Dans la matière semi-infinie symétrique ($N = Z$), nous aurons donc uniquement accès aux termes de volume a_v et surface a_s du modèle de la goutte liquide.

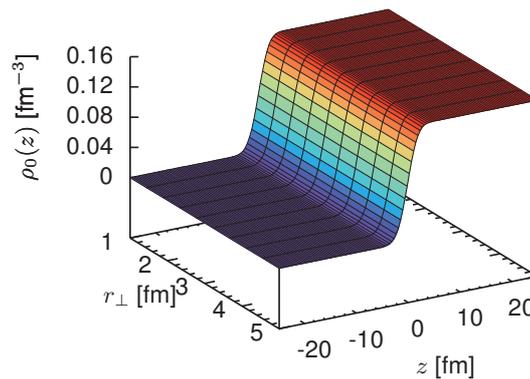


FIG. 5.1 : Représentation schématique tridimensionnelle de la matière nucléaire semi infinie. Le profil de densité $\rho(z)$ représente la densité totale de nucléons dans le milieu. La densité tend vers zéro pour les z négatifs et tend vers la saturation pour les z positifs.

La matière semi-infinie correspond à une tranche de matière nucléaire infinie limitée par une surface. C'est, par conséquent, un milieu infini dans deux directions, x et y , où la densité est constante. Il y a donc invariance par translation dans ces deux directions de l'espace. Suivant la direction z , on a :

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(z), \quad (5.1)$$

$$\text{avec comme conditions asymptotiques : } \begin{cases} \lim_{z \rightarrow +\infty} \rho(z) = \rho_{\text{sat}}, \\ \lim_{z \rightarrow -\infty} \rho(z) = 0. \end{cases} \quad (5.2)$$

5.1.2. Énergie de surface

Le coefficient de tension de surface peut s'écrire [115] sous la forme suivante :

$$\sigma = \lim_{S/V \rightarrow 0} (E_L - E_{\text{ref}})/S, \quad (5.3)$$

où E_L est l'énergie du système et E_{ref} est une énergie de référence représentant la contribution du volume. La limite est prise lorsque le rapport S/V tend vers zéro soit quand notre système est infiniment grand. La matière nucléaire, composée de neutrons et protons, forme ainsi un système à deux composantes qui rend la définition de l'énergie de référence E_{ref} non univoque [115]. Les divers choix pour E_{ref} mènent à des valeurs de σ différentes pour de la matière asymétrique vis-à-vis de l'isospin [116]. Dans ce chapitre, nous nous plaçons toujours dans le cas où l'asymétrie proton-neutron est nulle ($I=0$). Il n'y a pas d'ambiguïté dans la matière symétrique quant au choix de l'énergie de référence. Nous choisirons la définition utilisée par Wilets ou encore Côté [112, 117]. L'énergie totale par unité de surface d'une tranche de matière de longueur L , centrée en $z = 0$ sera donnée par :

$$E_L = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \mathcal{E}(z), \quad (5.4)$$

cette même énergie, sans la contribution de la surface, définit alors l'énergie de référence par unité d'aire :

$$E_{\text{ref}} = a_v \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \rho(z). \quad (5.5)$$

D'après l'équation (5.3), la tension de surface du milieu sera :

$$\sigma = \lim_{L \rightarrow +\infty} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz [\mathcal{E}(z) - a_v \rho(z)]. \quad (5.6)$$

Ce dernier terme correspond à une énergie par unité de surface. Pour un noyau de masse A et de rayon $R = r_0 A^{1/3}$, on définit une énergie de surface par nucléons :

$$\frac{E_s}{A} = a_s A^{-1/3}, \quad (5.7a)$$

$$\text{avec } a_s = 4\pi r_0^2 \sigma = \left(\frac{36\pi}{\rho_{\text{sat}}^2} \right)^{1/3} \sigma. \quad (5.7b)$$

5.2. Formalisme de Skyrme Hartree-Fock dans la matière semi-infinie

5.2.1. Équations de Hartree-Fock

Notre étude de la matière semi-infinie est faite à l'approximation HF. Les équations HF pour les nucléons d'espèce q s'expriment :

$$\left[-\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \nabla + \mathcal{U}_q(\mathbf{r}) - i \mathcal{W}_q(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) \right] \phi_\mu(\mathbf{r}) = \varepsilon_\mu \phi_\mu(\mathbf{r}), \quad (5.8)$$

où \mathcal{U}_q et \mathcal{W}_q sont respectivement les champs Hartree-Fock et spin-orbite dérivant de la fonctionnelle. Étant données les symétries imposées au système, il est plus pratique d'utiliser les coordonnées cylindriques $\mathbf{r}=(r,\phi,z)$. L'orientation du champ spin-orbite \mathcal{W} est donnée par celle du vecteur densité de spin-orbite $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ qui est colinéaire à l'axe Oz . Le terme spin-orbite devient :

$$-i \mathcal{W}_q(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) = \mathcal{W}_q(z) (\mathbf{k}_\perp \times \boldsymbol{\sigma})_z, \quad (5.9)$$

avec $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_\perp, k_z)$, l'impulsion des nucléons dans le milieu que l'on décompose en une partie transverse dans le plan (x,y) et une partie longitudinale suivant l'axe z . D'après (5.8), on a :

$$\left[-\frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m_q^*(z)} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_q^*(z)} + \mathcal{U}_q(z) + \mathcal{W}_q(z) (\mathbf{k}_\perp \times \boldsymbol{\sigma})_z \right] \phi_\mu(\mathbf{r}) = \varepsilon_\mu \phi_\mu(\mathbf{r}), \quad (5.10)$$

Les solutions du système HF sont recherchées sous la forme :

$$\phi_\mu(\mathbf{r}) = \phi_{\lambda \mathbf{k}}(\mathbf{r}, q) = \sqrt{2} \psi_\lambda(z, k_z, k_\perp, q) \chi_\lambda(\hat{k}_\perp) \exp(i \mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}), \quad (5.11)$$

où le spineur $\chi_\lambda(\hat{k}_\perp)$ est un état propre de l'opérateur $(\mathbf{k}_\perp \times \boldsymbol{\sigma})_z$:

$$(\mathbf{k}_\perp \times \boldsymbol{\sigma})_z \chi_\lambda(\hat{k}_\perp) = \lambda \chi_\lambda(\hat{k}_\perp), \quad (5.12)$$

L'opérateur peut avoir comme valeurs propres $\lambda = \pm 1$ et le spineur s'écrit :

$$\chi_\lambda(\hat{k}_\perp) = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \exp(-\frac{i}{2} \varphi_k) \\ i \lambda \exp(\frac{i}{2} \varphi_k) \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

avec φ_k l'angle entre \mathbf{k}_\perp et l'axe Ox soit $\tan^{-1}(k_y/k_x)$. L'équation (5.10) est unidimensionnelle dans l'espace des positions. Les champs satisfont les conditions asymptotiques suivantes :

$$\begin{cases} m_q^*(z) \rightarrow m & \text{pour } z \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad (5.14a)$$

$$\begin{cases} \mathcal{U}_q(z) \rightarrow 0 & \text{pour } z \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad (5.14b)$$

$$\begin{cases} \mathcal{W}_q(z) \rightarrow 0 & \text{pour } z \rightarrow \pm\infty. \end{cases} \quad (5.14c)$$

À partir de maintenant et dans tout ce qui suit, l'indice d'isospin q ne sera plus noté puisque la matière est symétrique $I=0$.

5.2.2. Densités

Les états de particules individuelles μ sont complètement définis par le nombre quantique de spin λ et les impulsions \mathbf{k} appartenant à la demi-sphère de Fermi D où $k_z > 0$ et de rayon $k_F = (\frac{3}{2}\pi^2\rho_{\text{sat}})^{1/3}$. Les sommations sur tous les états occupés μ sont donc en partie continues et en partie discrètes :

$$\sum_{\mu}^{\dagger} = \frac{1}{4\pi} \sum_{\lambda} \int_{D_q} d\mathbf{k} . \quad (5.15)$$

L'intégrale sur la demi-sphère s'écrit :

$$\int_D d\mathbf{k} = \int_0^{k_F} dk_z \int_0^{\sqrt{k_F^2 - k_z^2}} dk_{\perp} k_{\perp} \int_0^{2\pi} d\varphi_k = \frac{3\pi^2}{2} \rho_{\text{sat}} \int_0^1 dl \int_0^{\sqrt{1-l^2}} dt t \int_0^{2\pi} d\varphi_k . \quad (5.16)$$

où l'on a effectué le changement de variables suivant :

$$l = k_z/k_F, \quad t = k_{\perp}/k_F . \quad (5.17)$$

En prenant en compte le changement de variables (5.17) et en prenant la limite locale où $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$, dans ce système invariant par translation dans le plan (x, y) , on a :

$$\rho(\mathbf{r}) \equiv \rho(z) = \frac{3}{2} \rho_{\text{sat}} \sum_{\lambda} \int_0^1 dl \int_0^{\sqrt{1-l^2}} dt t |\psi_{\lambda}(z_i, lk_F, tk_F)|^2 . \quad (5.18)$$

De la même façon, on obtient facilement la densité cinétique τ dont la définition est donnée EQ. (2.9) :

$$\tau(z) = \frac{3}{2} \rho_{\text{sat}} \sum_{\lambda} \int_0^1 dl \int_0^{\sqrt{1-l^2}} dt t \left\{ t^2 k_F^2 |\psi_{\lambda}(z_i, lk_F, tk_F)|^2 + |\psi_{\lambda}(z_i, lk_F, tk_F)|^2 \right\} . \quad (5.19)$$

La détermination de la densité spin-orbite dans la matière nucléaire semi-infinie est plus délicate comme nous avons pu le voir dans la section 2.1.2 du chapitre II. Cette densité s'exprimera alors :

$$\mathbf{J}(z) = J_z(z) \mathbf{e}_z , \quad (5.20a)$$

$$\text{avec } J_z(z) = \frac{3}{2} \rho_{\text{sat}} \sum_{\lambda} \lambda \int_0^1 dl \int_0^{\sqrt{1-l^2}} dt t^2 |\psi_{\lambda}(z_i, lk_F, tk_F)|^2 . \quad (5.20b)$$

5.2.3. Solutions des équations de Skyrme Hartree-Fock

Après avoir résolu itérativement le système d'équations HF (5.9), on obtient pour la densité d'énergie totale du système :

$$\mathcal{E}(z) = \frac{3}{2} \rho_{\text{sat}} \sum_{\lambda} \lambda \int_0^1 dl \int_0^{\sqrt{1-l^2}} dt t \mathcal{E}_{\lambda}(lk_F, tk_F) |\psi_{\lambda}(z_i, lk_F, tk_F)|^2 . \quad (5.21)$$

Il ne reste plus qu'à extraire la contribution de la surface à l'énergie totale du système à l'aide de l'équation (5.3).

5.2.4. Extraction de l'énergie de surface

Les profils de densité dans ce milieu semi-infini montrent des oscillations pseudo-périodiques d'amplitude croissante, de la matière vers la surface. Cet effet quantique se nomme oscillations de Friedel. On peut les voir sur la figure 5.2. Elles sont dues aux interférences entre les fonctions d'ondes des nucléons qui se propagent vers la matière et celles se propageant vers le vide [118]. Leur amplitude dépend des propriétés de l'interaction.

Comme ces oscillations sont présentes jusqu'à $z \rightarrow +\infty$, la densité dans le milieu n'atteindra qu'asymptotiquement la valeur constante ρ_{sat} . Les calculs de l'énergie de surface, basés sur l'hypothèse que $\mathcal{E}(\frac{L}{2}) \simeq a_v \rho_{\text{sat}}$ sont inexacts et dépendent de la taille de la boîte choisie pour effectuer le calcul, comme on peut le constater sur la FIG. 5.3. Il devient alors nécessaire de mettre en place une procédure de lissage sur l'extraction de l'énergie de surface. Une méthode possible consiste à extraire la valeur asymptotique de celle-ci en effectuant une moyenne dans la région où les oscillations sont de moindre importance [119] :

$$\bar{a}_s = \frac{1}{L/2 - z_0} \int_{z_0}^{L/2} dz \left\{ \mathcal{E}(z) - a_v \rho(z) \right\}. \quad (5.22)$$

Le point z_0 doit être suffisamment éloigné de la surface, soit au minimum, à $4t$ où t correspond à l'épaisseur de la surface, qui, en pratique, doit être de l'ordre de 2,5 fm. Ce calcul est ainsi valable pour une demi-taille de boîte de $L/2 \gtrsim 10$ fm. Comme l'illustre la FIG. 5.3 la méthode s'avère être très efficace dans la matière symétrique.

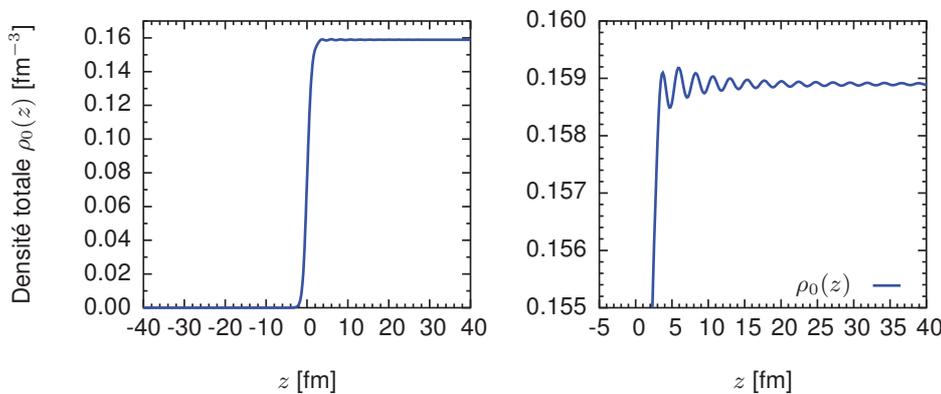


FIG. 5.2 : Profil de densité totale dans la matière nucléaire semi-infinie (gauche). Agrandissement sur les oscillations de Friedel (droite). Le calcul est effectué avec l'interaction SLy5 pour $I = 0$.

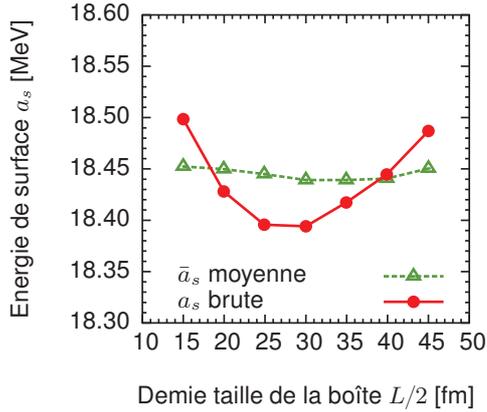


FIG. 5.3: Énergies de surface Hartree-Fock extraites de manière brute (lignes rouges continues) et moyennées (lignes vertes pointillées). Elles sont calculées pour $N=Z$ avec l'interaction SLy5.

5.3. Méthodes semi-classiques

5.3.1. Motivations

Il est connu que la hauteur des barrières de fission est reliée à l'énergie de surface de l'interaction nucléaire. Pour cette raison, mais aussi dans le but d'améliorer la procédure d'ajustement des paramètres, il peut être utile d'inclure un calcul de barrière de fission pour contraindre les propriétés de surface de la force. Effectuer un calcul CHF de barrière de fission n'est pas envisageable dans une procédure d'ajustement, car le temps de calcul requis est trop important : il est de quelques heures à quelques jours, selon les degrés de liberté de déformations explorés.

Les méthodes semi-classiques utilisables avec EDF se basent sur un développement en puissance de \hbar des densités de la fonctionnelle. L'intérêt majeur de ces techniques est que, dans certains cas bien précis, contrairement aux calculs HF, les équations associées à la minimisation de l'énergie sont solubles. Par conséquent, nous avons à notre disposition de nouvelles expressions analytiques pour des observables uniquement accessibles par résolution numérique dans le cas HF. Dans ce cas, le problème du temps d'exécution n'est plus significatif et les formules dérivées de méthodes semi-classiques pourront être incluses dans une procédure d'ajustement. Une telle stratégie a déjà été utilisée par Bartel *et al.* [54] pour détermination de la paramétrisation de SkM*, première force de Skyrme donnant à la fois des barrières de fissions d'actinides réalistes et des propriétés du fondamental satisfaisantes pour les noyaux stables.

5.3.2. Méthode de Thomas-Fermi étendue (ETF)

Transformation de Wigner-Kirkwood

À l'aide du développement semi-classique dérivé par Wigner et Kirkwood [120] appliqué à la densité de Bloch, appelé transformation de Wigner-Kirkwood, on peut construire les expressions des densités $\tau_{\text{ETF}}(\rho)$ et $\mathbf{J}_{\text{ETF}}(\rho)$ comme des fonctions de la densité dans le modèle

de Thomas-Fermi étendu (ETF). La densité de Bloch est définie par :

$$C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_i \phi_i^*(\mathbf{r}_2) \phi_i(\mathbf{r}_1) e^{-\beta \epsilon_i}, \quad (5.23)$$

où ϵ_i et ϕ_i sont les valeurs et états propres d'un Hamiltonien H donné. On obtient la matrice densité à partir de (5.23) *via* une transformation de Laplace inverse :

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{i}{2\pi} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\beta \beta^{-1} e^{\lambda\beta} C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (5.24)$$

Le problème est simplifié lorsque l'on utilise des forces de Skyrme puisque l'on prend la limite locale pour les densités de la fonctionnelle (voir EQS. (2.9)). La transformation de Wigner-Kirkwood s'exprime comme un développement de la densité de Bloch autour de sa valeur obtenue dans le cadre de l'approximation de Thomas-Fermi (TF) notée ici C_{TF} . Autrement dit, $C_{\text{TF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ correspond au propagateur d'une particule indépendante dans un potentiel local $V(\mathbf{r})$ et la transformation est notée :

$$C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C_{\text{TF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (5.25a)$$

$$C_{\text{TF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3/2} e^{-\beta V \mathbf{R}_{12}} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta} r_{12}^2}. \quad (5.25b)$$

où $\mathbf{R}_{ij} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)$ correspond aux coordonnées du centre de masse et $\mathbf{r}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, les coordonnées relatives. La fonction à déterminer $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ est développée en puissance de \hbar :

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1 + \sum_{m>0} \hbar^m \chi_m(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (5.26)$$

Pour un potentiel local de type Skyrme $v(\mathbf{r})$, les fonctions χ_m contiennent les dérivées d'ordre n du potentiel $V(\mathbf{r})$ [121].

Densités ETF

On applique la transformée (5.24) terme à terme sur la série en \hbar pour obtenir des développements des densités locales de la fonctionnelle en gradients du potentiel central de Skyrme $\mathcal{U}(\mathbf{r})$, de la masse effective $m^*(\mathbf{r})$ et du potentiel spin-orbite $\mathcal{W}(\mathbf{r})$:

$$\rho_{\text{ETF}}(\rho) = \rho_0(\mathbf{r}) + \rho_2(\mathbf{r}) + \rho_4(\mathbf{r}) + \dots, \quad (5.27a)$$

$$\tau_{\text{ETF}}(\rho) = \tau_0(\mathbf{r}) + \tau_2(\mathbf{r}) + \tau_4(\mathbf{r}) + \dots, \quad (5.27b)$$

$$\mathbf{J}_{\text{ETF}}(\rho) = \mathbf{J}_2(\mathbf{r}) + \mathbf{J}_4(\mathbf{r}) + \dots, \quad (5.27c)$$

où les indices numériques indiquent l'ordre de développement en \hbar . L'ordre 0 redonne les densités ρ_{TF} et τ_{TF} obtenues à l'aide du modèle de Thomas-Fermi (TF). On voit que le premier ordre non nul pour le vecteur densité de spin-orbite \mathbf{J} est l'ordre 2.

À l'ordre 2 en \hbar , soit ETF2, on obtient les fonctionnelles suivantes :

$$\tau_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{36} \frac{(\nabla\rho)^2}{\rho} + \frac{1}{3} \Delta\rho + \frac{1}{6f} \left[\nabla\rho \cdot \nabla f + \rho \Delta f - \frac{1}{2} \frac{\rho(\nabla f)^2}{f} \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^2 \rho \left(\frac{\mathcal{W}}{f} \right)^2, \quad (5.28a)$$

$$\mathbf{J}_2(\mathbf{r}) = - \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right) \rho \mathcal{W}. \quad (5.28b)$$

où $f \equiv f(\mathbf{r})$ correspond à la masse effective isoscalaire $m^*/m(\mathbf{r})$. Pour ETF4 (ordre 4) les calculs deviennent fastidieux. Les expressions complètes des fonctionnelles sont données par Grammaticos et Voros [122].

Application - Calculs variationnels

En substituant dans la fonctionnelle de Skyrme les densités usuelles par leurs versions semi-classiques (5.27). La densité d'énergie s'écrira :

$$\mathcal{E}_{\text{Sk}}(\rho, \tau, \mathbf{J}) \rightarrow \mathcal{E}_{\text{Sk}}(\rho_{\text{ETF}}, \tau_{\text{ETF}}, \mathbf{J}_{\text{ETF}}), \quad (5.29)$$

et l'énergie E_{ETF} du système étudié (noyau ou matière nucléaire) :

$$E_{\text{ETF}}[\rho_{\text{ETF}}, \tau_{\text{ETF}}, \mathbf{J}_{\text{ETF}}] = \int d\mathbf{r} \mathcal{E}_{\text{ETF}} = \int d\mathbf{r} \mathcal{E}_{\text{cin}}(\tau_{\text{ETF}}) + \mathcal{E}_{\text{Sk}}(\rho_{\text{ETF}}, \tau_{\text{ETF}}, \mathbf{J}_{\text{ETF}}), \quad (5.30)$$

avec \mathcal{E}_{cin} la densité d'énergie cinétique. On recherche le minimum d'énergie du système en appliquant un principe variationnel sur la densité d'énergie \mathcal{E}_{ETF} . Afin de conserver nombre de particules, la variation doit être contrainte à l'aide d'un multiplicateur de Lagrange λ . Dans le cas d'un système avec $N \neq Z$, on a deux multiplicateurs de Lagrange, un pour chaque espèce de nucléons :

$$\delta \int d\mathbf{r} \left\{ \mathcal{E}_{\text{ETF}}(\rho) - \lambda \rho \right\} = 0. \quad (5.31)$$

À partir d'ici, pour plus de lisibilité, la densité d'énergie semi-classique \mathcal{E}_{ETF} est simplement notée \mathcal{E} . On obtient alors une équation d'Euler-Lagrange^[a] :

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \nabla \rho} + \Delta \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \Delta \rho} = \lambda. \quad (5.32)$$

Le multiplicateur de Lagrange λ correspond au potentiel chimique des nucléons dans la matière nucléaire lorsque ρ tend vers ρ_{sat} . Dans ce cas, le potentiel chimique est égal à l'énergie de liaison par nucléon puisque tous les termes en gradients sont nuls :

$$\lambda = \left. \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho} \right|_{\rho=\rho_{\text{sat}}} = \frac{\mathcal{E}(\rho_{\text{sat}})}{\rho_{\text{sat}}}. \quad (5.33)$$

[a]. On aura un système couplé dans la matière asymétrique

Cette équation d'Euler est une équation différentielle du second ordre qui peut être résolue numériquement dans le cas d'un calcul ETF. La densité semi-classique est paramétrisée par une fonction de Fermi généralisée [114, 123]. La procédure de minimisation itérative est simple :

- (i) On calcule la densité semi-classique ρ pour un jeu de paramètres donnés ;
- (ii) On cherche les paramètres qui minimisent (5.30).

Une fois l'énergie minimisée, on peut extraire les valeurs de diverses observables : énergies de surfaces, termes de surface-symétrie [123–128]. Dans un cas plus général où l'on effectue des calculs ETF dans les noyaux, on accède aux masses, rayons, peaux de neutrons, barrières de fissions, *etc.*

Dans le contexte d'une approche semi-classique, les nucléons sont décrits par une densité et non des fonctions d'ondes. Les phénomènes d'oscillations de Friedel sont inexistantes à cause de la forme analytique choisie pour la densité de nucléons. Pour ETF, elles sont parfaitement lisses, monotones et croissantes du vide vers la matière comme on peut le voir FIG. 5.4. L'extraction de l'énergie de surface n'est ainsi plus problématique comme dans le cas HF. Néanmoins, l'inclusion d'une estimation semi-classique ETF de l'énergie de surface dans un protocole de fit n'est pas avantageuse puisque la méthode est itérative à l'instar des calculs HF. Il est plus attrayant de trouver un moyen d'extraire une formule analytique pour l'énergie de notre système en rendant l'équation d'Euler-Lagrange (5.32) exactement soluble.

5.3.3. Méthode de Thomas-Fermi modifiée (MTF)

Densités MTF

Un moyen simple pour rendre le calcul de l'énergie du système analytique consiste à faire un développement tronqué à l'ordre 2 de la densité cinétique. La troncation se fait sur les termes dépendant de la masse effective qui sont tout simplement pris égaux à zéro. On ne parle donc plus de méthode de Thomas-Fermi étendue, mais de Thomas-Fermi modifiée

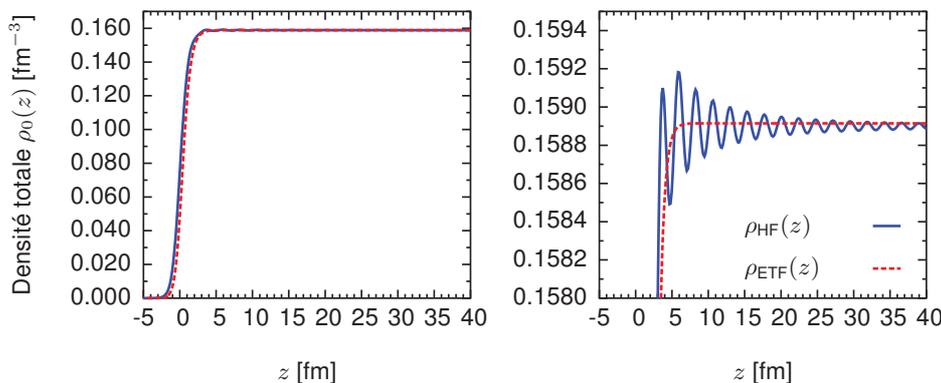


FIG. 5.4 : Profil de densité totale dans la matière nucléaire semi-infinie (gauche). Agrandissement sur la surface (droite). Le calcul est effectué avec l'interaction SLy5 pour $I = 0$ à l'approximation ETF4 et HF pour référence.

(MTF) [114] :

$$\rho_{\text{MTF}}(\rho) = \rho_{\text{ETF}}(\rho) \equiv \rho, \quad (5.34a)$$

$$\tau_{\text{MTF}}(\rho) = \alpha \tau_{\text{TF}} + \beta \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho} + \gamma \Delta \rho, \quad (5.34b)$$

$$\mathbf{J}_{\text{MTF}}(\rho) = \mathbf{J}_{\text{ETF}}(\rho) = -\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right) \rho \mathcal{W}, \quad (5.34c)$$

où les paramètres α , β et γ sont des paramètres ajustables que l'on pourra modifier en fonction des observables que l'on cherche à décrire à l'aide de cette approximation. En général, la valeur α est identique à celle obtenue avec ETF soit $\alpha = 1$. De même, on gardera $\gamma = 1/3$. C'est la valeur de β qui sera amenée à être modifiée dans le but de renormaliser le poids du seul terme en gradient restant dans (5.34b). Nous prendrons $\beta = 1/18$ comme dans le travail de Krivine *et al.* [129].

Plusieurs auteurs ont développé cette technique pour des forces de Skyrme standards, incluant des termes d'interaction à 2 corps, une dépendance en densité et un terme spin-orbite [129]. Ils sont ainsi parvenus à dériver une formule pour l'expression de l'énergie de surface de la matière semi-infinie. Cette formule a ensuite été utilisée dans des processus d'ajustement d'une force de Skyrme [129, 130] ou encore pour effectuer des estimations de l'énergie de surface [131]. Enfin, on peut remarquer une forte analogie entre ce type de développement semi-classique avec des approches statistiques effectuées par Wilets [117].

La nouveauté dans ce travail de thèse réside au niveau des forces de Skyrme employées. On utilise des forces généralisées incluant une interaction à 3 corps avec gradients [23, 57] et un 4 corps de contact [24]. La formule a également été dérivée dans le cas d'une force tenseur [16].

Fonctionnelle de Skyrme MTF

Les densités ne dépendent que de la coordonnée spatiale z dans la matière semi-infinie. Le gradient d'une quelconque fonction scalaire f s'écrit en coordonnées cylindriques :

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial \rho} \mathbf{e}_\rho + \frac{1}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{\partial f}{\partial z} \mathbf{e}_z \quad (5.35)$$

soit pour notre système :

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial z} \mathbf{e}_z \quad (5.36)$$

On exprime la densité d'énergie MTF à l'aide des fonctions $\rho_{\text{MTF}}(\rho)$, $\tau_{\text{MTF}}(\rho)$, et $\mathbf{J}_{\text{MTF}}(\rho)$:

$$\mathcal{E} = h_v(\rho) + h_s(\rho) \left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right)^2, \quad (5.37)$$

où l'on a séparé les contributions du volume h_v et de la surface h_s à la densité d'énergie totale :

$$h_v(\rho) = C_0^\rho \rho^2 + B_0^\rho \rho^3 + D_0^\rho \rho^4 + \alpha \frac{\hbar^2}{2m} f k_F^2 \rho, \quad (5.38a)$$

$$h_s(\rho) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta}{\rho} + d + g\rho + V_{so}(\rho)\rho, \quad (5.38b)$$

$$d = (\beta - \gamma) C_0^\tau - C_0^{\Delta\rho}, \quad (5.38c)$$

$$g = (\beta - 2\gamma) B_0^\tau + B_0^{\nabla\rho}. \quad (5.38d)$$

Les nouveaux termes à 3 et 4 corps sont contenus à la fois dans les termes de volume et de surface. Quant aux termes tenseurs, ils sont dans la fonction $V_{so}(\rho)$, redéfinie par rapport à celle donnée par Krivine [123] :

$$V_{so}(\rho) = -\frac{1}{2} \frac{(C_0^{\nabla J})^2}{Q(\rho)}, \quad (5.39a)$$

$$Q(\rho) = \frac{\hbar^2}{2m} f + C_0^J \rho + B_0^J \rho^2. \quad (5.39b)$$

En développant (5.34c) pour le vecteur densité de spin-orbite, on obtient :

$$\mathbf{J}_{\text{MTF}}(\rho) = \frac{C_0^{\nabla J}}{Q(\rho)} \frac{\partial \rho}{\partial z} \mathbf{e}_z. \quad (5.40)$$

Solution de l'équation d'Euler-Lagrange

L'équation d'Euler-Lagrange devient :

$$\frac{\partial h_v}{\partial \rho} + \frac{\partial h_s}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^2 - 2 \left[\frac{\partial h_s}{\partial z} \frac{\partial \rho}{\partial z} + h_s \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \right] = \lambda, \quad (5.41)$$

En la multipliant par $\partial \rho / \partial z$, on arrive sans peine à l'intégrer sur z entre $-\infty$ et z :

$$\int_{-\infty}^z dz \left\{ \frac{\partial h_v}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} + \frac{\partial h_s}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^3 - 2 \left[\frac{\partial h_s}{\partial z} \frac{\partial \rho}{\partial z} + h_s \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \right] \frac{\partial \rho}{\partial z} - \lambda \frac{\partial \rho}{\partial z} \right\} = 0, \quad (5.42)$$

soit

$$h_v(\rho) - h_s(\rho) \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^2 = \lambda \rho. \quad (5.43)$$

On rappelle que $\lambda = a_v$. On peut remarquer qu'avec la technique MTF, la résolution analytique ne dépend pas de la forme de la fonctionnelle employée. Cette dernière remarque est valable tant que la matière nucléaire est symétrique. Avec une asymétrie de protons et de neutrons, nous aurons deux équations d'Euler couplées dont les termes mixtes empêchent la résolution analytique.

Énergie de surface MTF

En utilisant la formule de Wilets (5.3), on extrait une expression analytique sous forme intégrale pour l'énergie de surface de la fonctionnelle :

$$\begin{aligned}\sigma &= \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left\{ \mathcal{E} - a_v \rho \right\}, \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left\{ h_v(\rho) - h_s(\rho) \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^2 - a_v \rho \right\}.\end{aligned}\quad (5.44)$$

En utilisant l'équation (5.43) on obtient :

$$\sigma = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left\{ h_s(\rho) \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^2 \right\}.\quad (5.45)$$

La densité de nucléons est une fonction monotone et croissante de z , on peut faire un changement de variable d'intégration et passer de z à $\rho(z)$. En reprenant la définition de l'énergie de surface (5.7b) on a finalement pour le coefficient d'énergie de surface :

$$a_s = 8\pi r_0^2 \int_0^{\rho_{\text{sat}}} d\rho \left\{ h_s(\rho) [E/A(\rho) - E/A(\rho_{\text{sat}})] \right\}^{\frac{1}{2}}.\quad (5.46)$$

Nous pouvons désormais estimer l'énergie de surface d'une interaction de Skyrme sans passer par un calcul auto cohérent comme on le ferait avec une méthode HF ou ETF.

5.4. Résultats

5.4.1. Comparatifs MTF vs HF et ETF4

Méthode

Il est maintenant important de tester la fiabilité de cette formule de poche. Pour cela, nous sélectionnons un large échantillon d'interactions de Skyrme possédant des structures et propriétés bien distinctes et nous calculons de trois manières différentes leurs énergies de surface. Nous utilisons :

- Un calcul HF exécuté sur le code de matière semi-infinie SINM-HF [119];
- Un calcul ETF4 exécuté sur le code SINM-ETF [132];
- La formule MTF donnée EQ. (5.46).

Les forces de Skyrme utilisées peuvent être séparées en quatre catégories en fonction de leur structure :

- (a) Les fonctionnelles : SIII [133], Ska [134], SkM [135], SkM* [136], T1-9 [137], SLy4, Sly6-10 [138, 139], BSk1-10 [140, 141], f_{\pm} , f_0 [142], LNS [143], SaMi [144], SLyIII.xx [145], UNEDF0-1 [146];
- (b) Les fonctionnelles dérivant d'un pseudo-potentiel : SLy5 [139], SLy5* [147]; avec des termes tenseurs : TIJ [16, 148];

- (c) Les fonctionnelles dérivant d'un vrai potentiel avec un terme d'interaction à 3 corps de contact : S3Ly [149] ;
- (d) Les fonctionnelles dérivant d'un vrai potentiel avec des termes d'interaction à 3 corps de contact et gradients jusqu'à l'ordre 2 et un 4 corps de contact : SLyMR0 [150] .

Fiabilité et avantages de la formule MTF

On peut voir FIG. 5.5 que les valeurs obtenues pour l'énergie de surface en fonction des méthodes employées diffèrent en moyenne de 1 MeV. Les résultats ne sont pas les mêmes, mais les écarts de valeurs entre les trois méthodes restent globalement constants. Les énergies de surface calculées pour ETF4 sont données à titre de comparaison pour voir l'influence de la troncation de termes d'ordre 4 ainsi que de ceux d'ordre 2 dépendant de la masse effective. Le calcul MTF de l'énergie de surface nous donne en moyenne estimation de 0,3 MeV supérieure à celle obtenue avec un calcul HF considéré comme référence. La barre d'erreur fournie correspond à l'écart-type σ_{HF-MTF} de la série de mesures :

$$a_{s,MTF} \simeq (a_{s,HF} + 0,3 \text{ MeV}) \pm 0,2 \text{ MeV} . \quad (5.47)$$

On voit donc qu'avec ce large échantillon d'interactions, la différence entre les énergies de surfaces HF et MTF reste en moyenne constante. N'étant pas une pseudo-observable bien connue, il n'est pas utile d'estimer a_s avec une précision accrue. La barre d'erreur extraite par la statistique EQ. (5.47) est largement compatible avec la barre d'erreur canonique estimée pour l'énergie de surface. Cette formule de poche est, ainsi, parfaitement adaptée pour estimer la valeur extraite d'un calcul HF.

En regardant avec plus d'attention la figure 5.5, on remarque que la différence entre HF et MTF reste quasi-constante pour une série de forces issues d'une même procédure d'ajustement comme : les forces SLy, f et *TIJ*. Dû au protocole de fit globalement commun^[b], ces paramétrisations donnent toutes des énergies de surface très proches, à quelques centaines de KeV près. Pour la famille BSk, on remarque deux groupes distincts : (i) BSk1-BSk5 et BSk10 et (ii) BSk6-BSk9. Lorsque l'on regarde les propriétés de la matière infinie de ces différentes paramétrisations, on constate que la pseudo-observable qui varie le plus est la masse effective isoscalaire m_0^* . Le premier groupe observé est constitué de forces ayant une masse effective comprise entre 0,92 et 1,04, le second, des masses toutes égales à 0,80. Les autres pseudo-observables isoscalaires sont semblables pour les forces des deux groupes.

Pour confirmer ces observations, on remarque un changement notoire des écarts HF et MTF pour les forces SLyIII.*xx* qui sont des réajustements de SIII avec des masses effectives allant de 0,7 à 1,0. Leurs autres propriétés ne varient que très peu. Nous constatons donc exactement la même tendance que dans le cas des BSk : plus la masse effective est importante, plus la différence HF/MTF diminue. Cependant, pour une masse effective donnée, les écarts observés ne sont pas toujours les mêmes, par exemple avec les couples BSk6 et SLyIII.0.8 ou encore SLy4 et SLyIII.0.7. Leurs protocoles d'ajustement diffèrent beaucoup, mais il est aussi possible que la dépendance en densité, différente pour chacun de ces couples, joue elle aussi un rôle déterminant dans ces écarts observés.

[b]. exceptée une contrainte sur le tenseur pour les *TIJ* et des contraintes sur le *splitting* des masses effectives.

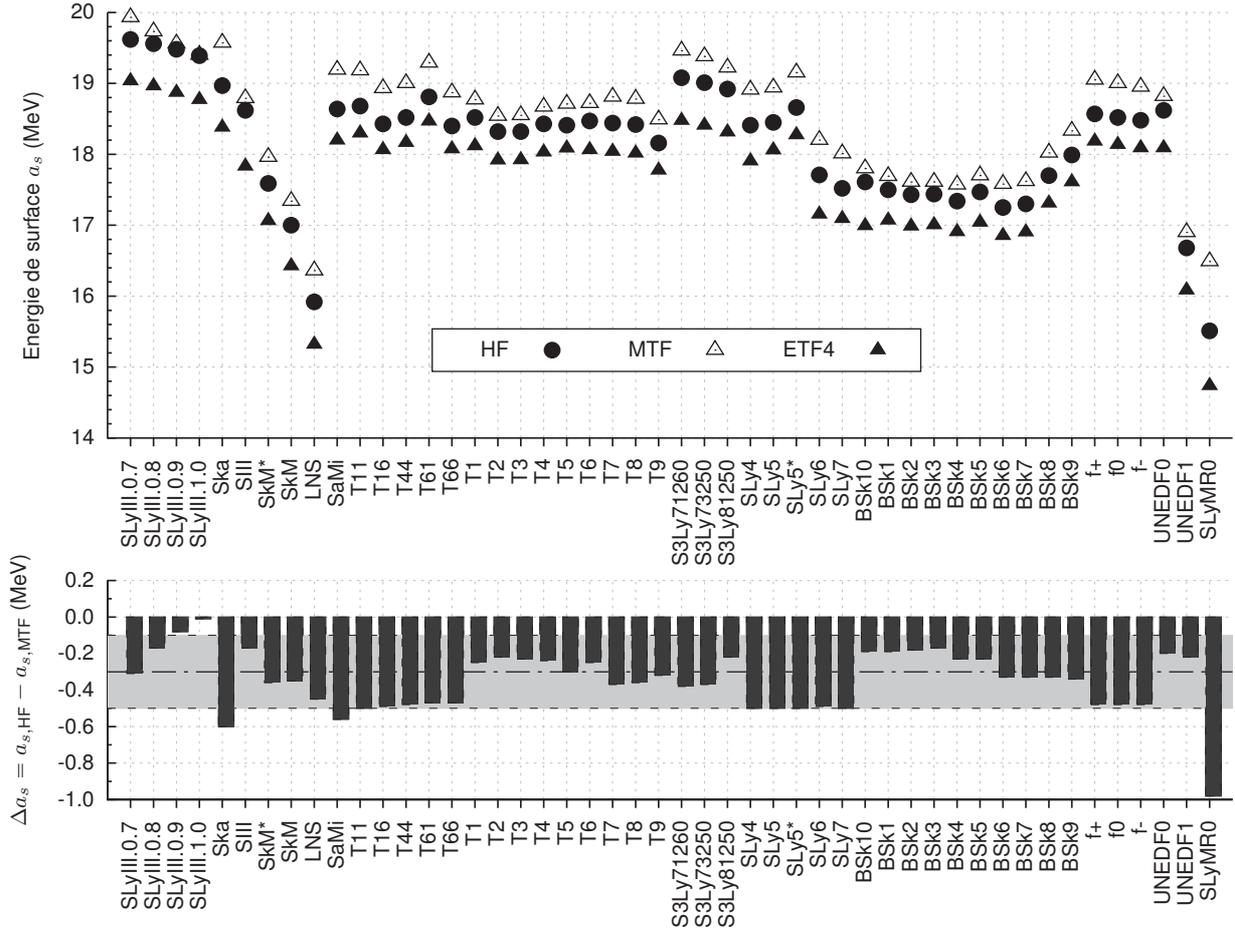


FIG. 5.5 : Représentation graphique des énergies de surfaces pour un large échantillon de forces de Skyrme. Elles sont calculées via trois différentes méthodes : HF, ETF4 et MTF. La partie inférieure représente les différences HF/MTF sous forme d'historgramme, la ligne horizontale pour $\Delta a_s = -0,3$ MeV représente la moyenne des écarts sur les 48 paramétrisations, l'écart-type σ_{HF-MTF} est coloré en gris clair.

5.4.2. Masse effective et renormalisation du développement MTF

Afin de confirmer que la masse effective joue un rôle déterminant dans les résultats des calculs MTF et, de ce fait, introduit un léger biais dans les prédictions de la formule, nous effectuons une étude systématique avec les forces SV ajustées par Klüpfel et Reinhard [62]. Elles sont au total seize et ont la particularité d'être regroupées en quatre séries de quatre, à l'intérieur desquelles une seule propriété de la matière infinie varie à la fois : SV-K (K_∞ varie), SV-mas (m_0^*), SV-sym (J), SV-kap (κ_{TRK}). L'autre intérêt majeur de ces forces est que parmi ces quatre séries, deux sondent les propriétés isoscalaire de la matière nucléaire semi-infinie, soit en pratique la constante de couplage $C_0^{\Delta\rho}$. Les deux autres sondent les propriétés isovecteurs, soit $C_1^{\Delta\rho}$. Nous ne nous limiterons pas à montrer que la formule est dépendante de la masse effective, nous étudierons aussi le rôle du paramètre β apparaissant dans (5.34b) en tant que paramètre ajustable.

On regroupe dans le TAB. 5.1 les propriétés des forces SV qui sont amenées à varier entre les seize différentes paramétrisations. Pour information, nous donnerons les valeurs des deux uniques constantes de couplage non nulles apparaissant dans le terme de surface h_s (5.38b).

Force	K_∞	J	m^*/m	κ_v	$C_0^{\Delta\rho}$	C_0^τ
SV-K218	218	-	-	-	-56,43	14,50
SV-K226	226	-	-	-	-55,80	14,50
SV-K241	241	-	-	-	-54,60	14,50
SV-mas07	-	-	0,7	-	-68,27	55,70
SV-mas08	-	-	0,8	-	-60,89	32,60
SV-mas10	-	-	1,0	-	-50,71	$\simeq 0,0$
SV-sym28	233	28	-	-	-53,99	14,50
SV-sym32	-	32	-	-	-56,22	14,50
SV-sym34	-	34	-	-	-57,09	14,50
SV-kap00	233	-	-	0,0	-54,99	14,50
SV-kap02	233	-	-	0,2	-55,11	14,50
SV-kap06	233	-	-	0,6	-55,32	14,50
SV-min	234	30	0,9	0,4	-55,20	14,50

TAB. 5.1: Propriétés de la matière infinie qui varient dans les séries de forces de Klüpfel et constantes de couplages $C_0^{\Delta\rho}$, C_0^τ . Les – signifient que la valeur est identique à celle de SV-min correspondant à la paramétrisation optimale qui minimise le χ^2 correspondant à leur protocole d'ajustement.

β un paramètre ajustable

Quelques soient les cas, on constate sur les FIG. 5.6 que le paramètre β contrôle la valeur de l'écart en énergie Δa_s . Cette première observation est tout à fait naturelle puisque β contrôle le poids du terme en gradient dans le développement MTF de la densité cinétique. Autrement dit, β s'avère être un coefficient multiplicateur de tous les termes cinétiques dans l'énergie totale du système. Dans le cas des forces SV, qui sont des forces de Skyrme standards d'après les équations (5.38b) et (5.38c), il multiplie la constante de couplage C_0^τ et un terme constant, la masse nue $\hbar^2/2m$. D'après le TAB. 5.1, on sait que C_0^τ est inchangée pour toutes les SV exceptées celles dont la masse effective varie. Pour SV-kap, SV-sym et SV-K, la modification de β ne joue que sur le premier terme de (5.38b). Pour ces trois cas, β influencera alors la valeur de l'écart HF/MTF et, au sein d'un même sous-groupe, il n'y aura que quelques petites variations dues aux réarrangements de la constante de couplage $C_0^{\Delta\rho}$ qui ne varie pas beaucoup pour ces douze fonctionnelles.

Dépendance en masse effective

Dans le cas des SV-mas, C_0^τ varie de 0 à 55,7 MeV. Une modification de β influencera différemment l'estimation de l'énergie de surface. L'écart Δa_s ne sera plus constant sur une série. Pour $\beta = 1/18$, l'augmentation de Δa_s est approximativement de 0,5 MeV pour une variation très importante de la masse effective m^*/m comprise entre 0,7 et 1,0. Suite aux observations avec les forces SLyIII.xx, BSk et maintenant SV-mas, on peut confirmer que la formule admet une légère dépendance en masse effective.

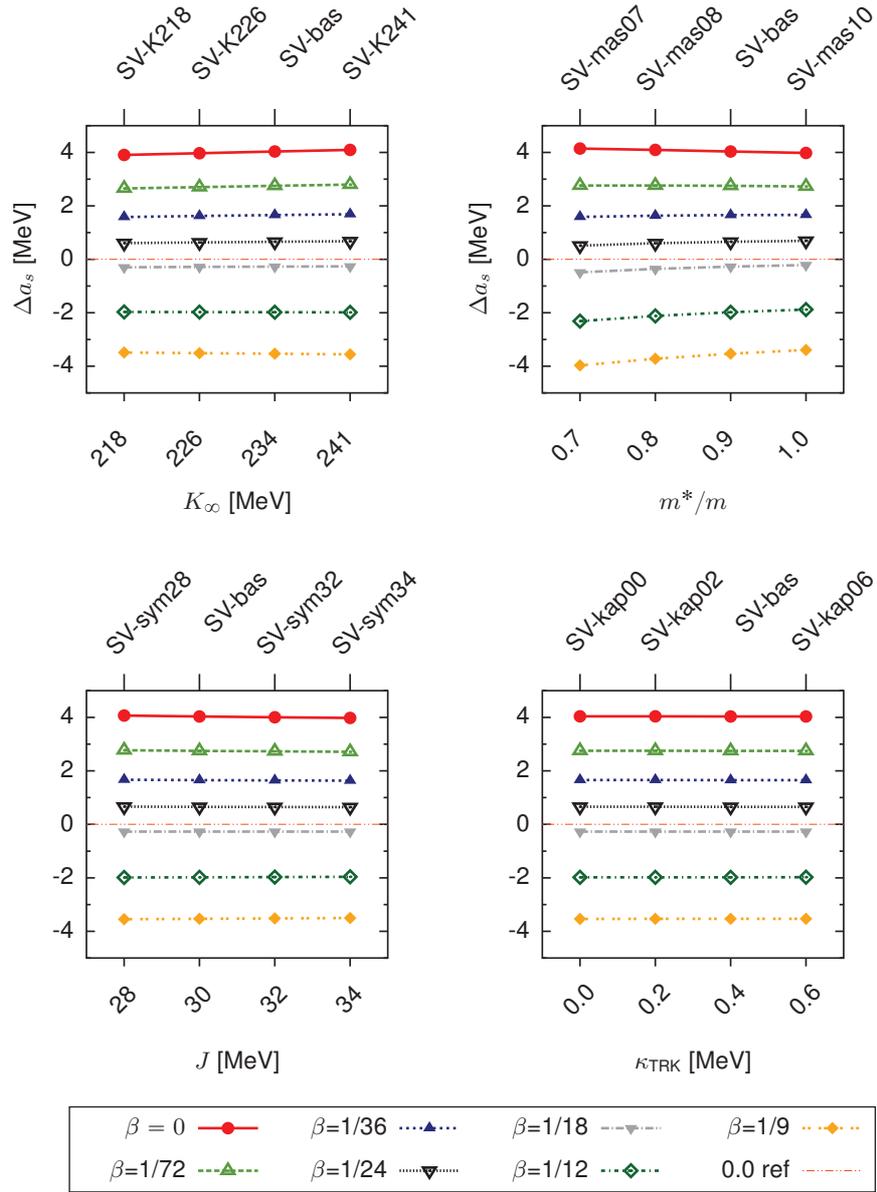


FIG. 5.6 : Différences d'énergies de surface HF et MTF, $\Delta a_s = a_{s,\text{HF}} - a_{s,\text{MTF}}$ en fonction de quatre pseudo-observables de la matière nucléaire infinie. Les calculs sont effectués avec les forces SV. Les différences sont tracées en fonction de différentes valeurs de β .

5.4.3. Corrélations entre énergie de surface et barrières de fission

Beaucoup d'auteurs se sont intéressés au rôle majeur des propriétés de surface des interactions de Skyrme sur les propriétés de déformation des noyaux [?]. Il a déjà été montré que la hauteur des barrières de fission et la position des isomères déformés sont directement reliées à l'énergie de surface de l'interaction utilisée [54].

Mise en évidence des corrélations

Après avoir testé la fiabilité de la formule de poche MTF qui nous permet d'estimer l'énergie de surface d'une interaction de type Skyrme, nous allons mettre en évidence son utilité potentielle dans une procédure d'ajustement.

Pour vérifier la corrélation qui existe entre la hauteur de la barrière de fission d'un noyau lourd et l'énergie de surface d'une interaction, nous ajustons huit paramétrisations de forces de Skyrme classiques, comprenant des termes à 2-corps, un terme avec une dépendance en densité et un terme spin-orbite. Le protocole d'ajustement est le même que celui de la force SLy5 [14, 15] avec une contrainte supplémentaire sur l'énergie de surface de l'interaction, calculée à l'aide de la formule de poche. Nous partons de la paramétrisation SLy5 que l'on réajuste pour des valeurs d'énergie de surface MTF allant de 18,0 à 19,4 MeV. Les paramétrisations et propriétés des huit forces obtenues, formant la série SLy5s, sont données dans l'annexe C.

Nous calculons les courbes d'énergie potentielle du ^{240}Pu suivant le paramètre de déformation β_2 . Les résultats sont donnés sur la FIG. 5.7 pour les huit forces SLy5s1-SLy5s8. Nous ne nous intéresserons pas aux propriétés de l'isomère *oblate* ($\beta \simeq -0,3$) ni aux propriétés pour des déformations au-delà de celles observées pour l'isomère super-déformé ($\beta \simeq 0,9$). On observe que :

- (i) pour des déformations inférieures à $\beta_2 \simeq 2,2$, plus l'énergie de surface de l'interaction est faible plus l'énergie de liaison l'est également ;
- (ii) pour toutes les interactions, l'isomère déformé est situé pour des paramètres β_2 quasiment identiques mais possède des énergies totales variées (de l'ordre de 10 MeV) ;
- (iii) pour l'isomère super-déformé, la valeur de la déformation β_2 diffère un peu plus selon l'interaction. La déformation de cet état augmente avec l'énergie de surface ;
- (iv) pour une déformation fixée, l'écart entre les énergies données par une interaction et la suivante est sensiblement le même sur toute la série d'interactions, preuve directe de la corrélation qui existe entre les propriétés de fission/déformation et propriété de surface d'une interaction.

La corrélation entre la hauteur de la première barrière de fission et l'énergie de surface est frappante sur la FIG. 5.8 (gauche). En plus d'être très forte, la corrélation obtenue est simplement linéaire alors que le domaine de variation de l'énergie de surface est important : un changement de 1,4 MeV pour a_s mène à un déplacement de l'énergie de l'isomère de 10 MeV. En ajustant les données sur :

$$E_b(a_s) = c_1 a_s + c_2, \quad (5.48)$$

on obtient :

$$c_1 = 0,74 \pm 0,01, \quad (5.49a)$$

$$c_2 = -6,29 \pm 0,24. \quad (5.49b)$$

On observe également sur la FIG. 5.8 (droite) une très forte corrélation entre l'énergie d'excitation E_{ex} , correspondant à la différence d'énergie entre les deux isomères, et l'énergie de surface de l'interaction. On ajuste encore une fois les données sur :

$$E_{ex}(a_s) = c_3 a_s + c_4, \quad (5.50)$$

on obtient alors :

$$c_3 = 1,68 \pm 0.04, \quad (5.51a)$$

$$c_4 = -27,7 \pm 0.7. \quad (5.51b)$$

5.5. Conclusion

L'avantage majeur de la formule MTF pour estimer l'énergie de surface réside dans sa simplicité d'utilisation dans un code d'ajustement des paramètres puisqu'il s'agit de calculer une intégrale simple. On a vu dans ce chapitre que cette approximation semi-classique donnait des résultats fiables malgré une légère dépendance en masse effective. Nos estimations ne nécessitant pas une précision accrue, la formule est, par conséquent, pleinement utilisable.

En terme de temps d'exécution, le gain est extrêmement important entre MTF et les méthodes HF ou ETF. Si l'on prend comme référence le temps du calcul MTF, les rapports de temps d'exécution t_i/t_{MTF} sont de 10^5 pour ETF et 5.10^5 pour HF.

Nous utiliserons cette formule non pas pour contraindre l'énergie de surface de nos futures interactions mais pour un réajustement des propriétés de surface *a posteriori* selon la procédure suivante :

- (a) Prendre la paramétrisation qui minimise la fonction de mérite définie dans le chapitre III ;
- (b) effectuer un calcul complet CHFB sur le ^{240}Pu en explorant toutes les déformations triaxiales envisageables afin d'en extraire ses propriétés de fission/déformation ;
- (c) Comparer les barrières avec celles tabulées par Bjørnholm et Lynn [151] ;
- (d) Réajuster l'énergie de surface afin d'avoir des barrières plus réalistes ;
- (e) Recommencer les étapes (b) à (d) jusqu'à convergence, soit quelques iterations.

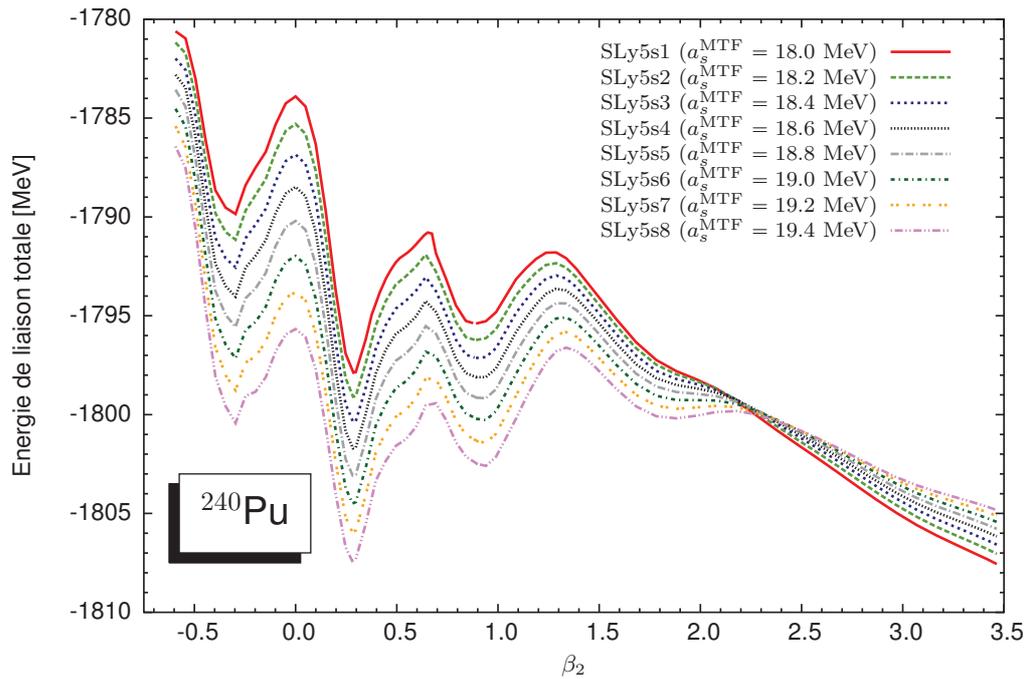


FIG. 5.7 : Évolution de l'énergie totale du ^{240}Pu en fonction du paramètre de déformation β_2 pour les huit forces SLy5s1-SLy5s8.

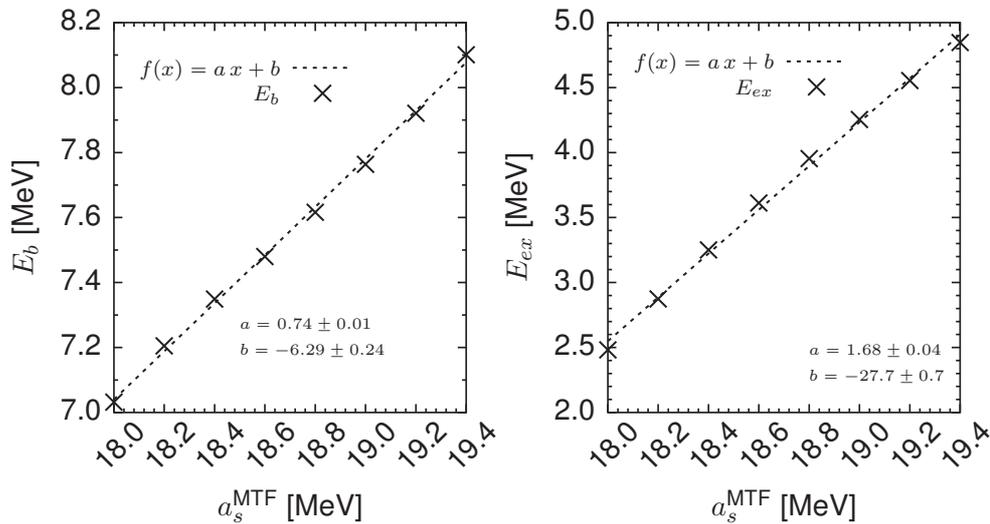


FIG. 5.8 : Corrélation entre la hauteur de la première barrière de fission E_b du ^{240}Pu et de l'énergie de surface pour la série d'interactions SLy5s1-SLy5s8 (gauche). *Idem* pour l'énergie d'excitation de l'isomère déformé (droite). Les paramètres ajustés de la fonction affine $f(x) = ax + b$ sont donnés sur la figure avec leurs barres d'erreurs.

Résultats

Résumé : Ce chapitre porte sur l'étude des paramétrisations des nouvelles interactions de Skyrme de type SLyMR obtenues à l'aide du protocole d'ajustement présenté dans le chapitre III. Nous étudierons les propriétés de la matière nucléaire infinie, semi-infinie ainsi que celles des noyaux. Les paramétrisations seront fournies avec des barres d'erreurs sur les paramètres, calculées à l'aide d'outils introduits dans le chapitre IV. Nous présenterons également un ensemble de données statistiques associées à une analyse de sensibilité sur ces paramètres.

Sommaire

6.1. Introduction	80
6.2. Analyse covariante et étude de sensibilité	80
6.2.1. Paramétrisation SLyMR 1_β	80
6.2.2. Corrélations entre les paramètres de la force	81
6.2.3. Analyse de sensibilité	84
6.3. Construction de nouvelles paramétrisations	91
6.3.1. Les échecs de SLyMR 1_β	91
6.3.2. Amélioration du protocole d'ajustement	92
6.3.3. Paramétrisations SLyMR1 et SLyMR 1_{3B}	93
6.4. Matière nucléaire infinie	95
6.4.1. Matière symétrique	97
6.4.2. Matière de neutrons	99
6.4.3. Matières polarisées	99
6.4.4. Instabilités	99
6.5. Matière nucléaire semi-infinie	100
6.5.1. Champs de la fonctionnelle	100
6.5.2. Énergie de surface	102
6.6. Propriétés des noyaux	102
6.6.1. Densités	102
6.6.2. Champs	102
6.6.3. Énergies de liaison	103
6.6.4. Prédications dans les noyaux riches en neutrons	106
6.6.5. Gaps d'appariement	106
6.6.6. Énergies des particules individuelles	108

6.1. Introduction

Par définition, la paramétrisation obtenue par une méthode des moindres carrés est optimale pour reproduire l'ensemble des observables contraintes par le protocole d'ajustement. Nous présentons dans ce chapitre un ensemble de résultats obtenus dans la matière nucléaire infinie, semi-infinie et dans les noyaux. Nous comparerons les résultats aux valeurs expérimentales lorsqu'elles existent et à des calculs effectués avec des interactions de Skyrme standards nous servant de références. Nous prendrons SLy5 [14] et SIII [13]. Cette dernière, à cause de sa dépendance en densité égale à un, possède la même structure que les SLyMR dans la matière infinie symétrique (sans les termes en gradients). Les résultats discutés dans ce manuscrit sont préliminaires et nous permettent de dresser un premier bilan des qualités et défauts de la fonctionnelle de Skyrme avec termes 3 et 4 corps, inhérents aux choix effectués pour le protocole d'ajustement. Nous présentons trois interactions : SLyMR1 $_{\beta}$, SLyMR1 et SLyMR1 $_{3B}$ illustrant comment l'analyse des résultats et l'analyse covariante permettent de réajuster ou de modifier le protocole d'ajustement afin d'améliorer la qualité d'une interaction et d'éliminer des paramètres faiblement pertinents.

Afin de comparer avec pertinence les observables prédites aux mesures expérimentales ou calculs théoriques de référence, nous veillerons dans la mesure du possible, à donner les résultats avec des barres d'erreurs statistiques estimées à l'aide des outils présentés dans le chapitre IV.

Détails sur les calculs numériques

Dans ce chapitre, les calculs dans la matière semi-infinie sont effectués à l'aide du code HF SINM [119]. Pour les noyaux, les calculs sont effectués avec le code LENTEUR. Il permet d'effectuer des calculs unidimensionnels dans des noyaux sphériques. Les corrélations d'appariement sont toujours prises en compte pour les calculs. Lorsque nous utilisons des fonctionnelles non ajustées pour donner de l'appariement, une interaction du type ULB1 [a] est utilisée. Dans ce cas, l'appariement est actif dans une fenêtre de ± 5 MeV (avec une diffusivité de 1 MeV) autour du niveau de Fermi dans le spectre HF équivalent. Cette interaction prend la forme suivante :

$$V_{\kappa\kappa}^{\text{ULB}}(\mathbf{r}) = V_0 \left(1 - \frac{\rho(\mathbf{R})}{\rho_{\text{sat}}} \right) \delta_{r_1 r_2} \quad (6.1)$$

où $V_0 = -1250$ MeV.

6.2. Analyse covariante et étude de sensibilité

6.2.1. Paramétrisation SLyMR1 $_{\beta}$

SLyMR1 $_{\beta}$ est la paramétrisation qui minimise la fonction de mérite présentée dans le chapitre III. Néanmoins, cette force est considérée comme une version intermédiaire, car

[a]. *Universal Lyon-Bruzelles.*

l'analyse qui suit a immédiatement révélé que quelques gros défauts de l'interaction pouvaient être corrigés.

Le choix des 14 paramètres pour l'interaction de Skyrme n'est pas univoque. Évidemment, les 14 paramètres du potentiel $\{t_i, x_i, u_i, y_{ij}, W_0, v_i\}$ s'avèrent être le choix le plus naturel, mais il n'est pas le plus pratique à manipuler dans une procédure d'ajustement. *A priori*, les valeurs de ces constantes de couplages ne sont pas connues puisqu'elles n'ont pas de signification physique. Il sera alors plus pratique de choisir un ensemble de paramètres directement reliés à des observables. Notre choix s'est porté sur un ensemble de paramètres mélangeant à la fois des pseudo-observables de la matière nucléaire infinie et des paramètres du potentiel :

$$\left\{ \rho_{\text{sat}}, E/A, K_\infty, m^*/m, J, \langle V_{pp} \rangle, x_0, x_1, x_2, y_1, y_{21}, y_{22}, W_0, v_0 \right\}. \quad (6.2)$$

où $\langle V_{pp} \rangle$ correspond à la valeur de l'élément de matrice d'appariement entre les états $1f_{7/2}$ calculée dans le ^{40}Ca [152].

Nous avons gardé dans cet ensemble les paramètres d'échanges x_i, y_i qui, généralement, sont de l'ordre de l'unité. Le paramètre du 4 corps v_0 appartient aussi à cet ensemble afin de pouvoir être contraint directement lors de l'ajustement. Au cours de ce chapitre, lorsque nous parlerons de paramétrisation, il s'agira soit de cette paramétrisation ajustée, soit de l'autre qui est donnée en fonction des paramètres du potentiel de Skyrme. Pour les distinguer, nous les nommerons respectivement : « paramétrisation ajustée » et « paramétrisation naturelle ».

Les paramètres ajustés et naturels sont respectivement rassemblés dans les TAB. 6.1 et TAB. 6.2. En première constatation, les valeurs pour $\rho_{\text{sat}}, E/A, J$ sont compatibles (barres d'erreurs comprises) avec celles visées lors de l'ajustement, rassemblées TAB. 3.3. Concernant l'élément de matrice d'appariement $\langle V_{pp} \rangle$, il n'est pas contraint dans l'ajustement. Il est uniquement utile pour nous informer sur l'intensité de l'appariement. Sa valeur optimale n'est pas connue, on observe seulement qu'il y a de l'appariement dans les noyaux lorsqu'il est de l'ordre de -3 MeV [152]. L'incompressibilité K_∞ , un peu élevée, reste compatible avec l'intervalle de valeurs nominales. La masse effective est, quant à elle, beaucoup trop faible ce qui risque de se répercuter sur les spectres de noyaux et sur l'appariement.

Concernant les paramètres naturels, il est important de signaler la très forte indétermination sur le paramètre du terme à 4 corps v_0 , mais aussi, dans une moindre mesure, celles des paramètres d'échange x_0 et y_1 . Ce constat sur l'incertitude de v_0 nous conduit logiquement à envisager des ajustements futurs sans ce terme. Les barres d'erreur sont du même ordre de grandeur que celles obtenues lors du réajustement de SLy5 effectué par Rocca-Maza *et al.* [153] La constante de couplage du spin-orbite W_0 semble un peu faible, la valeur canonique se situe plutôt dans un intervalle compris entre 110 et 120 MeV fm⁵. Elle devrait même être plus élevée car la masse effective est relativement faible.

6.2.2. Corrélations entre les paramètres de la force

Comme nous avons pu le voir dans le chapitre IV, en construisant la matrice Hessienne de la fonction de mérite par rapport aux variations des paramètres ajustés, nous pouvons déduire les matrices de covariance et de corrélation associées à ceux-ci. La covariance est dépendante

n°	par.	unité	p_i	Δp_i	$\Delta p_i/p_i$
1	ρ_{sat}	MeV	0,1543	0,0050	0,032
2	E/A	MeV	-16,1184	0,2296	0,014
3	K_∞	MeV	279,1120	62,7141	0,225
4	m^*/m		0,5573	0,0832	0,149
5	J	MeV	33,6547	4,3697	0,130
6	$\langle V_{pp} \rangle$	MeV	-2,7508	1,3352	0,485
7	x_0		0,1695	0,2290	1,351
8	x_1		0,6598	0,2686	0,407
9	x_2		-1,1512	0,0999	0,087
10	y_1		1,2941	1,0130	0,783
11	y_{21}		-1,1201	0,0634	0,057
12	y_{22}		-0,0813	0,0212	0,261
13	W_0	MeV fm ⁵	97,7796	18,3370	0,188
14	v_0	MeV fm ⁹	-9371,1584	33266,5386	3,550

TAB. 6.1: Paramètres ajustés de l'interaction SLyMR1 $_\beta$. Chaque paramètre p_i est donné avec sa barre d'erreur ainsi que son erreur relative.

n°	par.	unité	p_i	Δp_i	$\Delta p_i/p_i$
1	t_0	MeV fm ³	-1229,7883	94,9545	0,077
2	t_1	MeV fm ⁵	838,7971	223,2541	0,266
3	t_2	MeV fm ⁵	-1333,0355	604,8705	0,454
4	u_0	MeV fm ⁶	4017,8169	1485,8418	0,370
5	u_1	MeV fm ⁸	-3820,1904	2293,7886	0,600
6	u_2	MeV fm ⁸	14578,5050	5322,6336	0,365
7	x_0		0,1695	0,2290	1,351
8	x_1		0,6598	0,2686	0,407
9	x_2		-1,1512	0,0999	0,087
10	y_1		1,2941	1,0130	0,783
11	y_{21}		-1,1201	0,0634	0,057
12	y_{22}		-0,0813	0,0212	0,261
13	W_0	MeV fm ⁵	97,7796	18,3370	0,188
14	v_0	MeV fm ⁹	-9371,1584	33266,5386	3,550

TAB. 6.2: Paramètres naturels de l'interaction SLyMR1 $_\beta$. Chaque paramètre p_i est donné avec sa barre d'erreur ainsi que son erreur relative.

	ρ_{sat}	E/A	K_{∞}	m^*/m	J	$\langle V_{pp} \rangle$	x_0	x_1	x_2	y_1	y_{21}	y_{22}	W_0	v_0
ρ_{sat}	1.00	-0.24	-0.33	-0.00	0.03	-0.01	0.02	0.03	-0.15	-0.10	-0.18	-0.33	-0.03	0.06
E/A		1.00	-0.43	0.18	-0.49	0.17	-0.09	-0.14	-0.31	-0.27	-0.28	-0.32	0.17	0.16
K_{∞}			1.00	0.29	-0.19	0.13	0.36	0.35	0.62	0.22	0.66	0.47	-0.51	0.07
m^*/m				1.00	-0.17	0.19	0.09	0.14	0.43	0.06	0.31	-0.04	-0.61	-0.10
J					1.00	-0.33	-0.56	-0.37	-0.16	0.31	-0.26	0.25	0.13	-0.38
$\langle V_{pp} \rangle$						1.00	0.07	-0.12	-0.43	-0.25	-0.39	0.34	0.20	0.89
x_0							1.00	0.86	0.53	0.03	0.64	-0.38	-0.29	0.06
x_1								1.00	0.54	0.48	0.67	-0.51	-0.37	-0.06
x_2									1.00	0.24	0.97	-0.11	-0.61	-0.60
y_1										1.00	0.31	-0.18	-0.14	-0.23
y_{21}											1.00	-0.16	-0.58	-0.50
y_{22}												1.00	0.01	0.27
W_0													1.00	0.26
v_0														1.00

TAB. 6.3 : Matrice de corrélations entre les paramètres ajustés de l'interaction SLyMR1 $_{\beta}$.

de l'ordre de grandeur des variables étudiées alors qu'un coefficient de corrélation ne l'est pas. De ce fait, nous nous intéresserons uniquement à la matrice des corrélations des paramètres de SLyMR1 $_{\beta}$. Il est important de souligner que l'obtention de la matrice Hessienne est délicate. En effet, elle implique le calcul de dérivées secondes numériques qui nécessitent beaucoup de précautions afin de garantir un résultat fiable^[b].

La matrice des corrélations est donnée sous forme d'un tableau TAB. 6.3 et est également représentée graphiquement sur la FIG. 6.1. Les limites entre faibles et fortes corrélations sont relativement subjectives et peuvent différer selon les auteurs, mais également du problème étudié. Nous choisirons :

- $|\mathcal{R}_{ij}| \geq 0,7$ pour qualifier p_i et p_j de très fortement corrélés ;
- $|\mathcal{R}_{ij}| \leq 0,1$ pour qualifier p_i et p_j de faiblement corrélés.

On constate immédiatement sur la FIG. 6.1 que bon nombre des paramètres sont faiblement ou moyennement corrélés entre eux. Ils ne sont donc pas totalement indépendants. Il y a aussi trois paramètres très fortement corrélés entre eux : x_0 et x_1 sont corrélés à 86% ; v_0 et $\langle V_{pp} \rangle$ à 89% ; y_{21} et x_2 à 97%.

Deux effets contradictoires pour l'appariement

La matrice de corrélation met en évidence deux contraintes ayant une influence contradictoire sur l'appariement :

- Le coefficient de corrélation entre la masse effective isoscalaire et l'incompressibilité est de 0,29. K_{∞} et m^*/m évolueront dans le même sens, or, en cherchant à améliorer les propriétés de la force, on veut augmenter la masse effective et abaisser la compressibilité ;
- Le coefficient de corrélation entre la masse effective isoscalaire et $\langle V_{pp} \rangle$ est de 0,19. Ce qui montre que pour avoir plus d'appariement, soit diminuer la valeur de $\langle V_{pp} \rangle$, il faut nécessairement diminuer la masse effective.

[b]. L'interpolation de la fonction de mérite proposée par certains auteurs permet de s'affranchir des problèmes liés aux calculs des dérivées. Mais dans ce cas, est-on sûr que les courbures données par la fonction interpolée décrivent correctement le voisinage du minimum dû χ^2 ?

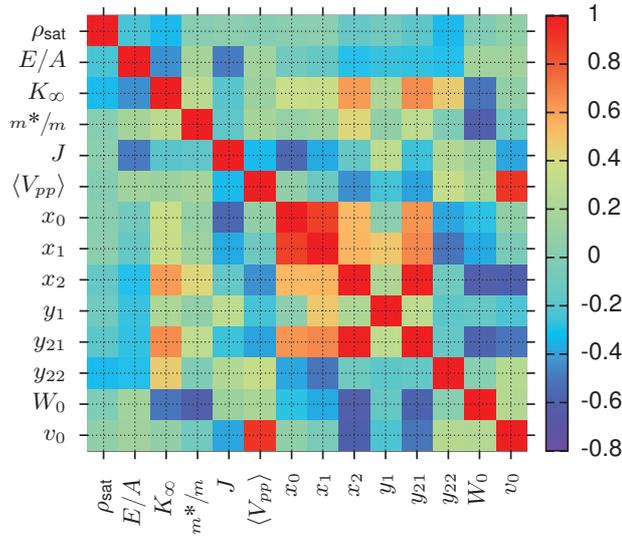


FIG. 6.1 : Matrice de corrélations entre les paramètres ajustés de l'interaction SLyMR1 $_{\beta}$.

Le signe de cette corrélation entre l'appariement et la masse effective est, sans doute, le principal défaut de cette paramétrisation puisqu'il va à l'inverse de ce que l'on veut réaliser. La masse effective est reliée à la densité d'états. Plus m^* est élevée, plus la densité d'états l'est aussi. L'appariement est important principalement pour les états au voisinage de la surface de Fermi. Il devrait donc augmenter avec la masse effective et non diminuer comme dans le cas de SLyMR1 $_{\beta}$. Les deux effets cités sont contradictoires et permettent de comprendre en partie : (i) pourquoi la masse effective est si faible pour SLyMR1 $_{\beta}$ et (ii) pourquoi malgré tous nos efforts, nous n'avons pu nous résoudre à l'améliorer sans détériorer significativement les propriétés d'appariement de l'interaction.

6.2.3. Analyse de sensibilité

En complément de l'analyse de corrélations entre les paramètres ajustés de la force, nous avons effectué une analyse de sensibilité de l'interaction ou l'on sonde cette fois le rôle de ses paramètres naturels. Le protocole employé est simple :

- SLyMR1 $_{\beta}$ est l'interaction de référence ;
- on varie, de -1% à $+1\%$, par pas de $0,2\%$, la valeur d'un de ses 14 paramètres naturels ;
- afin de faire des calculs d'observable dans une matière nucléaire infinie à l'équilibre, on détermine ρ_{sat} pour chacune des variations ;
- on calcule diverses observables dans la matière infinie et dans les noyaux.

Cette méthode rustique permet de visualiser simplement quels sont les paramètres dominants dans chaque observable étudiée. Il faut cependant noter qu'on ne sonde pas uniquement l'influence du paramètre variable sur les observables dans la matière infinie. La densité de saturation est réajustée pour chaque variation des paramètres dont elle dépend : t_0 , u_0 , v_0 , t_1 , t_2 , x_2 , u_1 , u_2 , y_{21} , y_{22} . À l'exception des modifications sur x_0 , x_1 , y_1 et W_0 , on observera

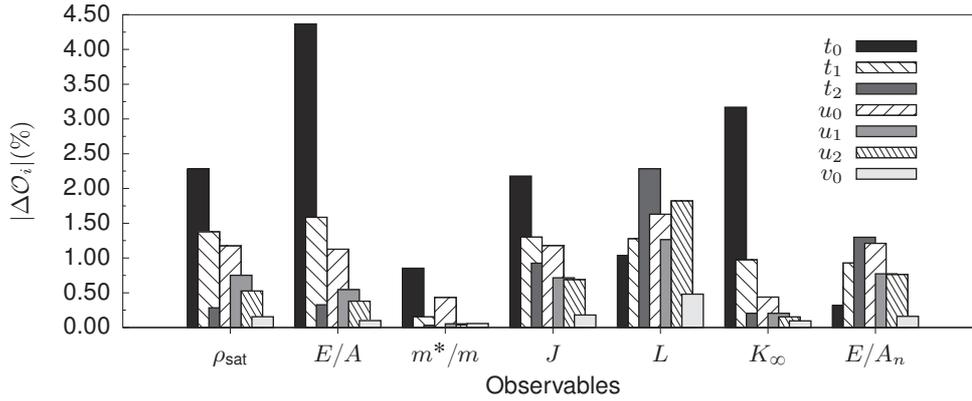


FIG. 6.2 : Propagation d’une variation de 1% sur un paramètre naturel du potentiel dans sept pseudo-observables de la matière nucléaire infinie. Toutes les données sont en valeurs absolues. Seuls les paramètres des termes directs sont étudiés. Le spin-orbite W ne contribuant à aucune de ces observables n’est pas pris en compte.

en plus de la variation du paramètre, un changement dans la densité ρ_{sat} qui nous allons voir pourra avoir des répercussions importantes. Il est aussi important de noter que les variations sur les paramètres ajustés ou naturels ne sont pas équivalentes. Dans le premier cas, en modifiant par exemple v_0 avec E/A , K_∞ , ... bloqués, on génère de forts réarrangements dans les autres paramètres naturels de SLyMR1 $_\beta$. Dans le second cas, l’effet inverse se produit.

Analyse de sensibilité - Matière nucléaire infinie

On commence par effectuer une analyse de sensibilité sur les observables de la matière infinie. Notre choix s’est porté sur quatre propriétés isoscalaires : ρ_{sat} , E/A , K_∞ et m^*/m ; deux pour la matière asymétrique : J , L ; et un point de l’équation d’état de la matière de neutrons E/A_n pris à ρ_{sat} . Les résultats sont regroupés sur les figures 6.3 et 6.4. Les variations relatives des observables :

$$\Delta \mathcal{O}_i = \frac{\mathcal{O}_i(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i(\mathbf{p}_0)}{\mathcal{O}_i(\mathbf{p}_0)}, \quad (6.3)$$

où \mathbf{p}_0 correspond à SLyMR1 $_\beta$, correspondent aux ordonnées des graphiques. Les abscisses correspondent aux variations relatives sur les paramètres. L’indexation des paramètres est la même que celle donnée dans le TAB. (6.2).

En prêtant attention aux ordres de grandeur des variations induites dans les observables, on remarque de grandes disparités d’un paramètre à l’autre. Pour 1% de variation sur p_i , la variation sur les observables va de 15% (y_{21}), en passant par 10% (x_2), 5% (t_0), jusqu’à 0,5% seulement pour v_0 ou x_0 . Ces résultats s’expliquent immédiatement avec les barres d’erreurs sur ces paramètres. Plus un paramètre est mal défini, moins les observables y seront sensibles.

On vient de voir sur les FIG. 6.3 et FIG. 6.4 que pour des modifications des paramètres naturels comprises entre $\pm 1\%$, les observables de la matière nucléaire infinie varient quasi linéairement en fonction des variations. On représente dans la FIG. 6.2 les variations, en

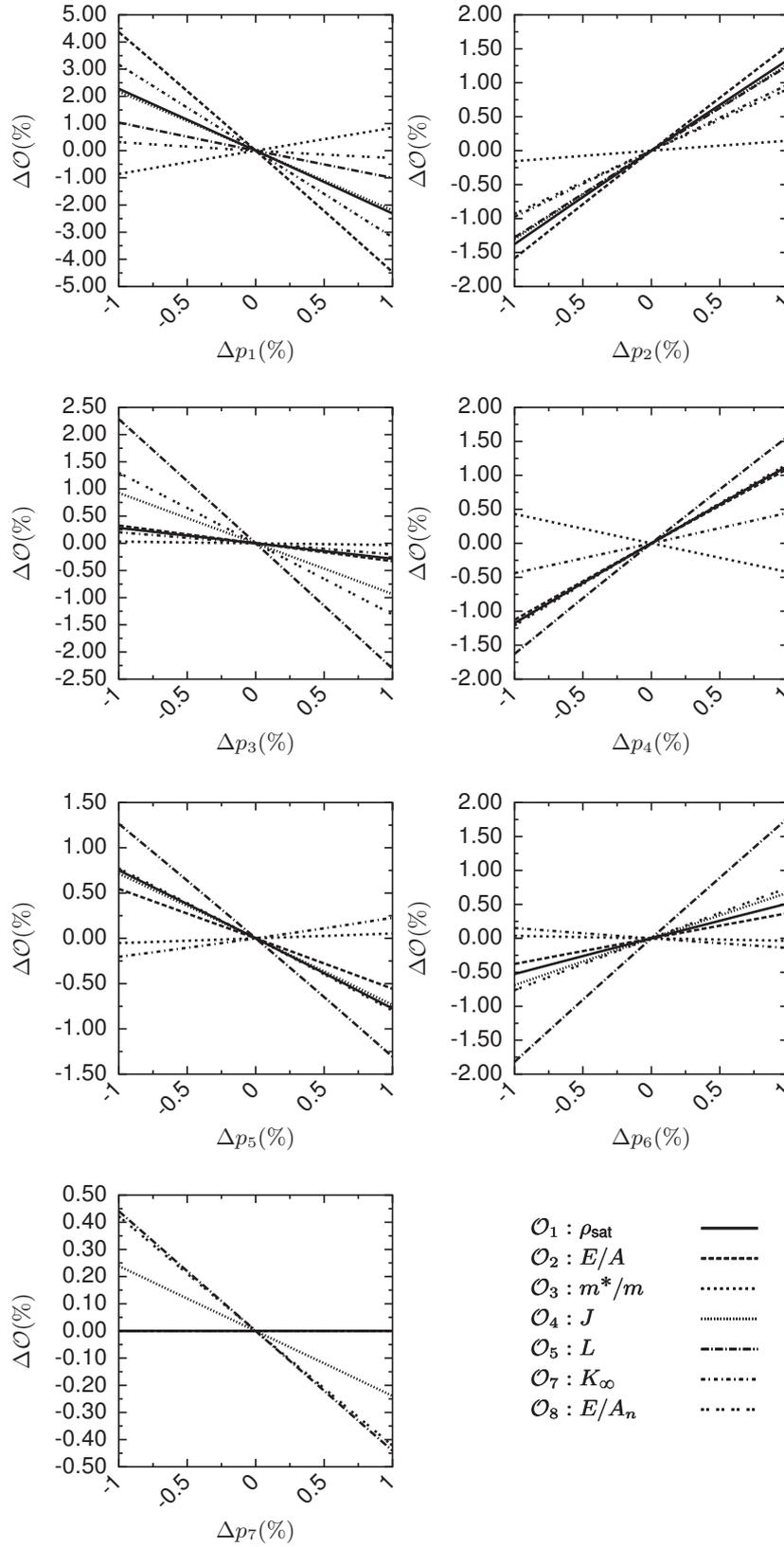


FIG. 6.3 : Variations relatives de pseudo-observables de la matière nucléaire infinie en fonction de la variation relative des 14 paramètres naturels de la force de Skyrme. Ces variations relatives sont calculées par rapport aux valeurs des paramètres et observables obtenues avec la paramétrisation initiale SLyMR1 $_{\beta}$: $\Delta\mathcal{O}_i = (\mathcal{O}_i - \mathcal{O}_{i,0})/(\mathcal{O}_{i,0})$. Les paramètres sont indexés dans le même ordre que dans le tableau TAB. 6.2.

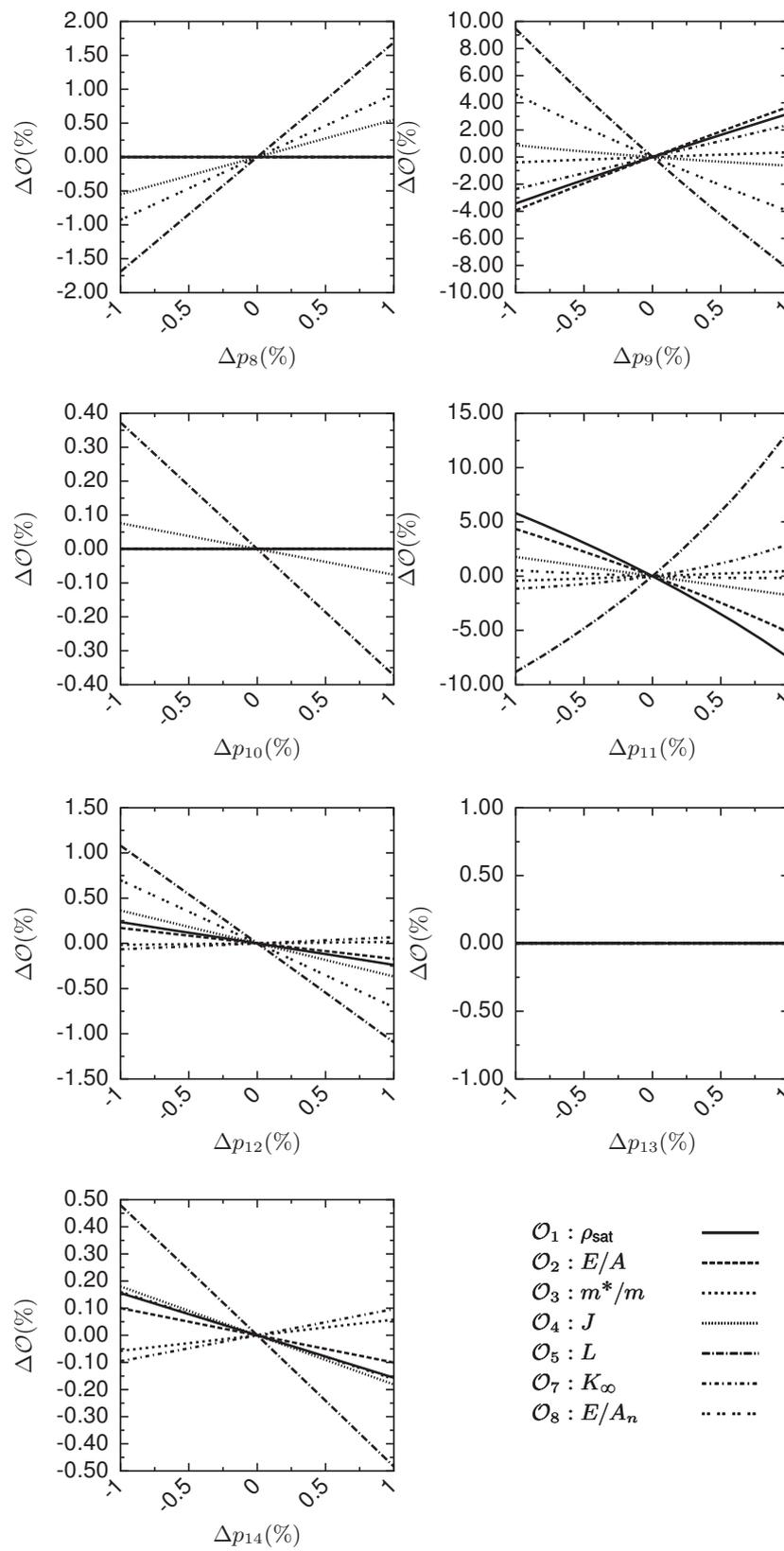


FIG. 6.4 : Suite de la FIG. 6.3.

valeurs absolues, sous forme d'histogramme, induites par une variation de 1% des paramètres directs de l'interaction : $t_0, t_1, t_2, u_0, u_1, u_2, v_0$:

- (f) t_0 est le paramètre dominant dans l'ensemble des observables de la matière nucléaire infinie symétrique ;
- (g) on retrouve la même hiérarchie dans les observables de la matière infinie symétrique (exceptée m^*/m), soit : $t_0, t_1, u_0, u_1, u_2, t_2$ puis v_0 . Cette tendance reste valable pour la matière asymétrique avec J mais, le changement profond de structure entre J et L , induit par la disparition de la dépendance en t_0 , modifie cette hiérarchie ;
- (h) concernant la masse effective, le résultat de cette étude est plus intéressant. La modification de la densité de saturation induite par les paramètres de contact t_0, u_0 ou, dans une moindre mesure, par v_0 influence plus la valeur de $m^*/m(\rho_{\text{sat}})$ qu'une modification de t_1, t_2, u_1 ou u_2 dont elle dépend explicitement ;
- (i) dû à ce réarrangement de la densité de saturation, on voit apparaître une dépendance en v_0 dans l'équation d'état de la matière de neutron alors que les termes à 4 corps n'y contribuent pas, en vertu du principe d'exclusion de Pauli.

Analyse de sensibilité - Noyaux

Pour l'étude des noyaux, nous avons choisi six quantités : deux associées à l'appariement : $\langle V_{pp} \rangle$ et $\Delta_\kappa(^{44}\text{Ca})$; les énergies du fondamental du ^{40}Ca et ^{208}Pb ainsi que leur rayon de protons. Le protocole reste le même, les résultats sont synthétisés sur les figures 6.5 et 6.6. Nous pouvons remarquer les éléments suivants :

- (a) les variations des observables sont légèrement plus faibles que dans la matière infinie, à l'exception du gap spectral $\Delta_\kappa^{44}\text{Ca}$. La hiérarchie des paramètres plus ou moins importants semble conservée ;
- (b) les masses pour les deux noyaux choisis varient de manière quasiment identique. De même pour les rayons ;
- (c) le caractère fortement non linéaire de l'appariement se manifeste clairement à travers la variation du gap spectral dans le calcium ^{44}Ca . On remarque d'ailleurs que c'est la quantité qui varie le plus dans la majorité des cas. Lorsque la variation est importante, on voit clairement une partie où l'appariement est quasi nul puis une autre partie où il augmente violemment ;
- (d) Le rôle du spin-orbite W_0 est négligeable pour les masses et rayons, mais est nettement plus important sur l'appariement puisqu'il influence directement les écarts des niveaux d'énergie de particules individuelles ;
- (e) encore une fois, nous pouvons conclure que le terme à 4-corps n'influence que très peu les observables dans les noyaux.

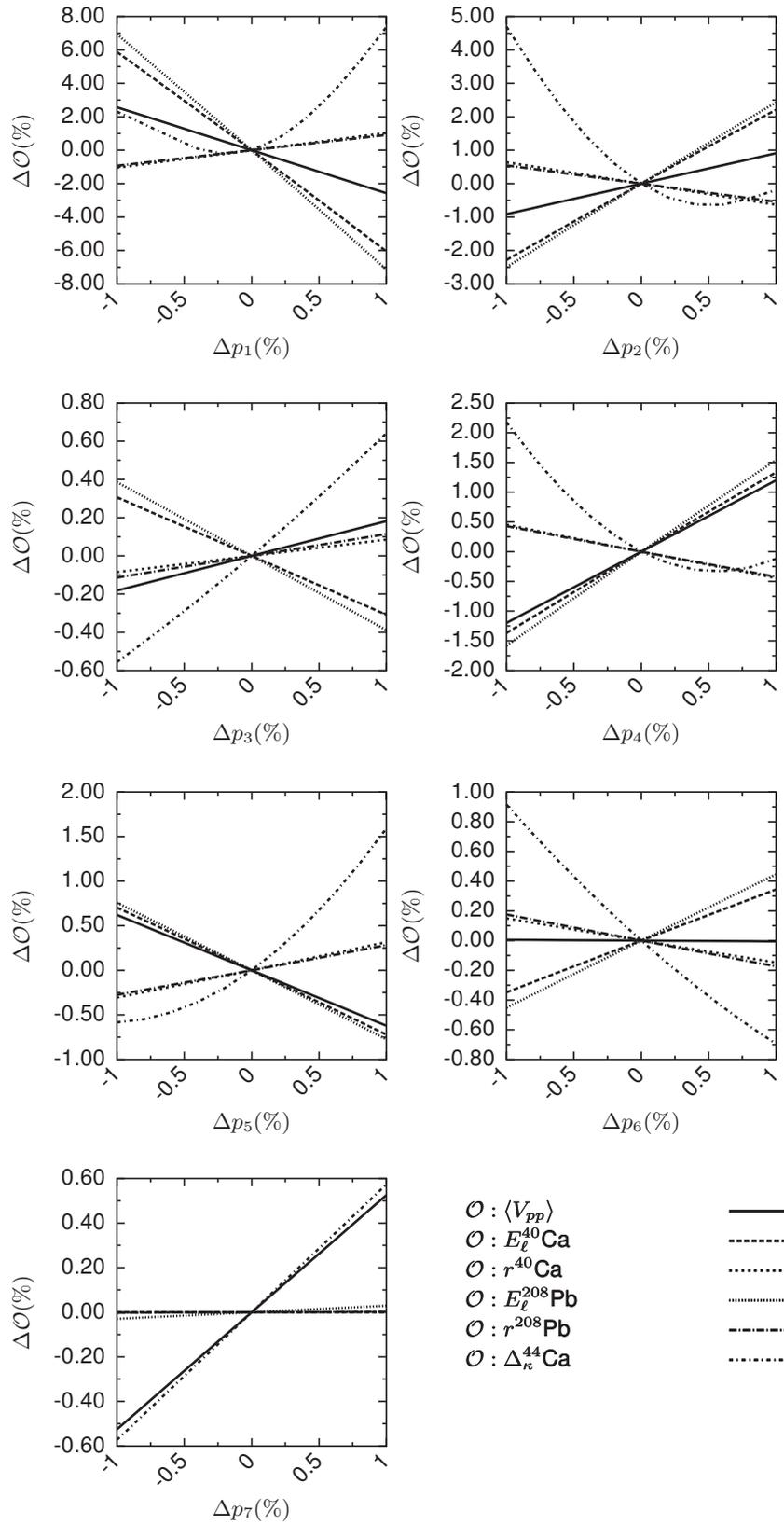


FIG. 6.5 : Variations relatives d'observables dans les noyaux en fonction de la variation relative des 14 paramètres naturels du potentiel de Skyrme. Ces variations relatives sont calculées par rapport aux valeurs des paramètres et observables obtenues avec la paramétrisation initiale SLyMR1.

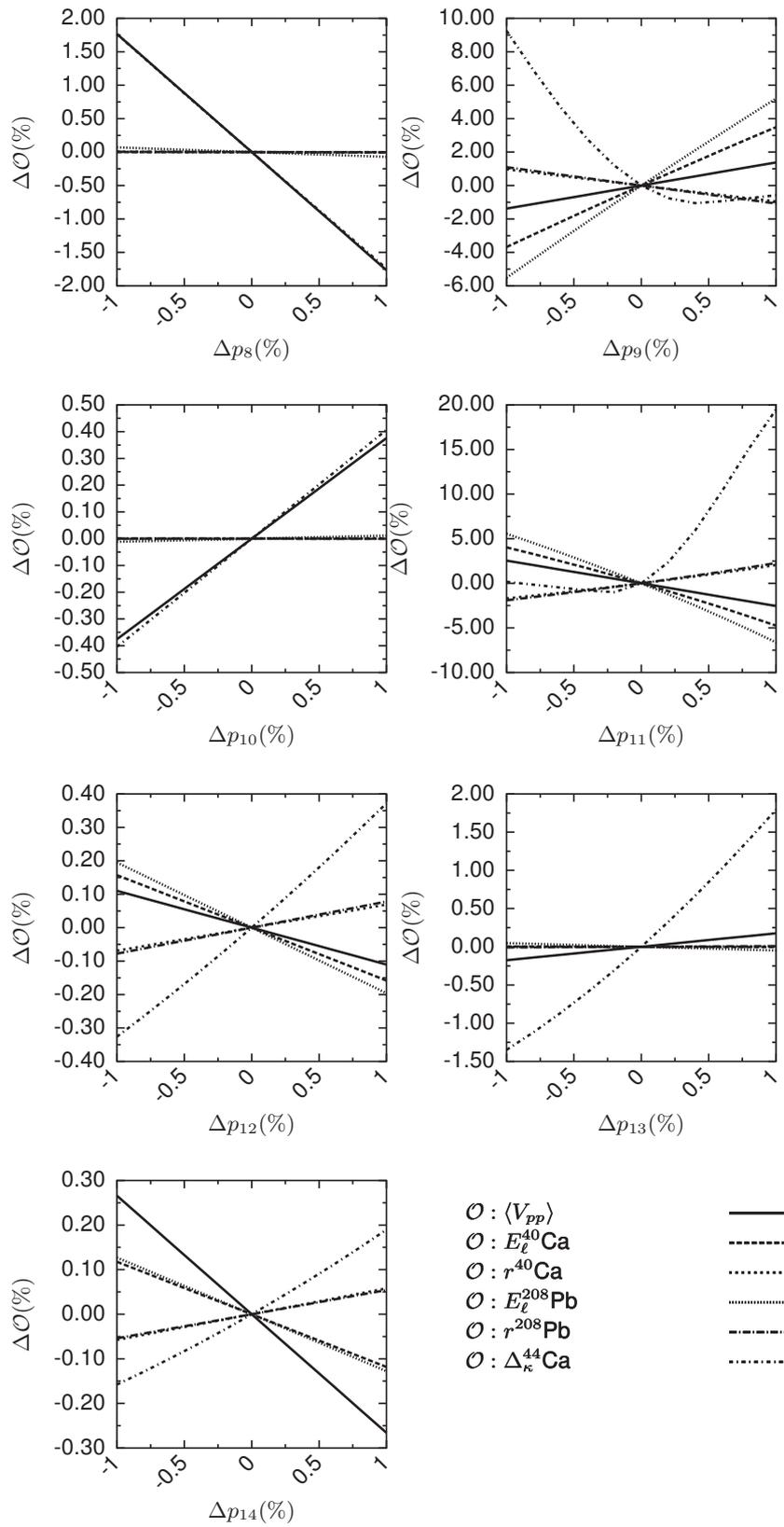


FIG. 6.6 : Suite de la FIG. 6.5.

6.3. Construction de nouvelles paramétrisations

6.3.1. Les échecs de SLyMR1 $_{\beta}$

Les premiers calculs effectués avec SLyMR1 $_{\beta}$ dans les noyaux ont montré qu'il était impératif de revoir le protocole d'ajustement des paramètres.

Profils de densité

Les profils de densité des nucléons du ^{208}Pb obtenus avec SLyMR1 $_{\beta}$ sont représentés sur le panneau de gauche de la FIG. 6.7. Malgré la contrainte sur la densité de charge, donnée (3.40), les densités de chaque espèce oscillent fortement dans le noyau. Ces oscillations sont de moindre importance avec SLyMR0 et presque inexistantes pour SLy5. Au centre, la densité isovectorielle est proche de zéro pour SLy5 alors qu'elle est de l'ordre de $0,25 \text{ fm}^{-3}$ pour SLyMR1. Sur le panneau de droite de la FIG. 6.7, on représente les profils de densité de charge dans le même noyau. Au cœur du noyau, pour une distance radiale inférieure à 2 fm, les densités de charge théoriques sont très éloignées des mesures. SLyMR1 $_{\beta}$ donne le plus mauvais résultat et montre encore une fois les oscillations les plus marquées.

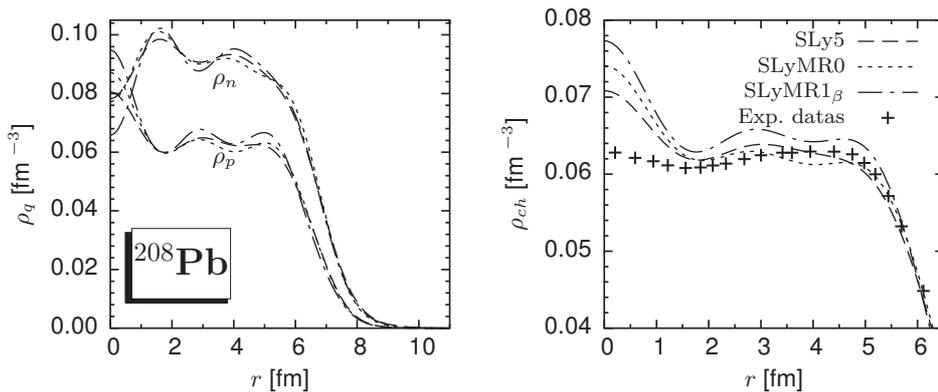


FIG. 6.7 : Gauche : profils de densité des neutrons et protons dans le ^{208}Pb . Droite : profils de densité de charge. Les croix noires correspondent aux données expérimentales.

Énergies des particules individuelles

La FIG. 6.8 montre les schémas de niveaux individuels des neutrons et protons dans le ^{40}Ca et le ^{208}Pb . Alors que SLy5 diffère du spectre expérimental, tout en respectant la hiérarchie des niveaux, le spin de l'état fondamental prédit dans le ^{39}Ca avec SLyMR1 $_{\beta}$ n'est pas le bon. Les états individuels $s_{1/2}$ et $d_{3/2}$ sont échangés et quasiment dégénérés. Comme il a déjà été mentionné dans la partie 6.2.1, le paramètre du spin-orbite W_0 est un peu faible. De ce fait, dans la couche $1d$, les écarts entre le doublet $d_{3/2}$ et $d_{5/2}$ sont faibles au point que l'échange entre $d_{3/2}$ et $s_{1/2}$ s'effectue. De plus, la couche $d_{3/2}$ est plus basse qu'attendu, ce qui explique pourquoi SLyMR1 $_{\beta}$ prédit un ^{40}Ca trop lié. De la même manière, à cause du *splitting* trop faible, la couche $f_{7/2}$ est trop haute, par conséquent le ^{56}Ni est trop faiblement lié.

Alors que le *splitting* $d_{3/2}$ - $d_{5/2}$ est trop faible dans le ^{40}Ca , celui des états de neutrons pour $p_{3/2}$ et $p_{1/2}$ dans le ^{208}Pb est un peu trop grand (FIG. 6.8). Envisager une contrainte sur le *splitting* $p_{3/2}$ - $p_{1/2}$, comme cela est fait dans le protocole de SLy5 [14], aurait encore réduit W_0 et donc dégradé les résultats dans le ^{40}Ca . On peut voir un agrandissement des états individuels de neutrons du ^{40}Ca et du ^{208}Pb sur la FIG. 6.9.

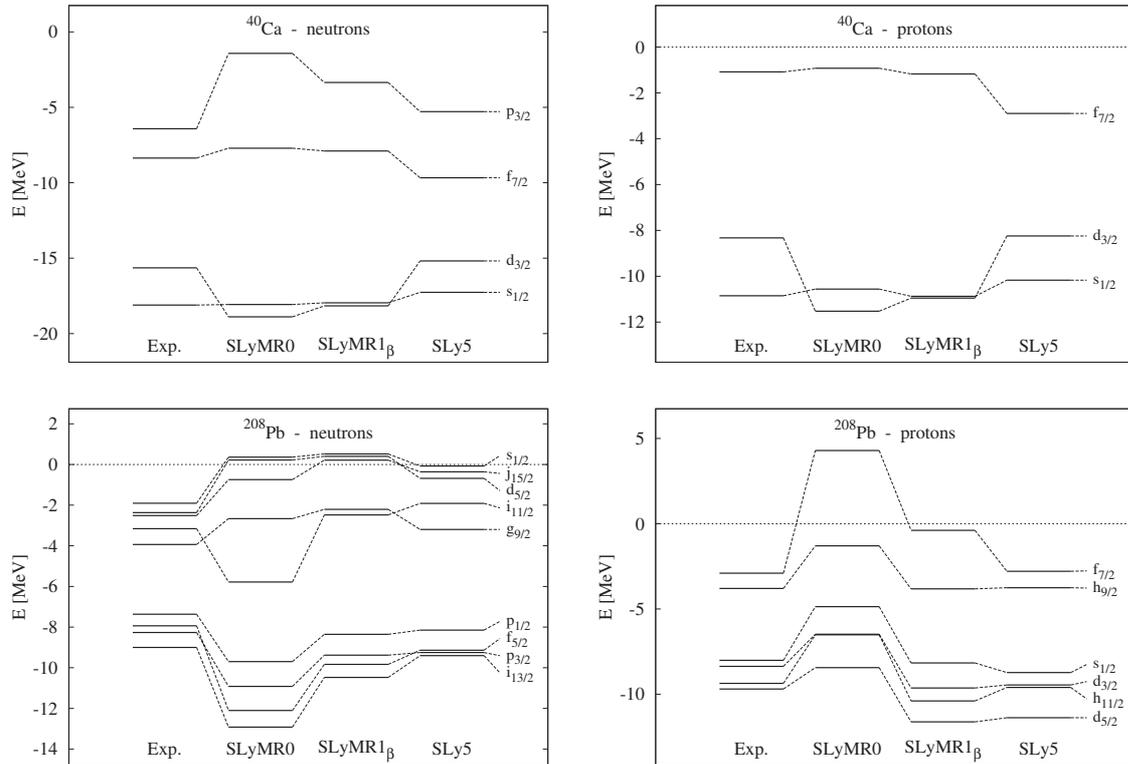


FIG. 6.8 : Schémas de niveaux individuels des neutrons et protons dans le ^{40}Ca et le ^{208}Pb obtenus avec SLyMR1 $_{\beta}$. Les spectres obtenus avec SLy5 et SLyMR0 ont été ajoutés pour information.

6.3.2. Amélioration du protocole d'ajustement

Le champ spin-orbite a des propriétés inhabituelles avec des *splittings* trop grands dans le plomb 208 et trop faibles dans le calcium 40. On suspecte que les fortes oscillations des profils de densités de neutrons et de protons, observées FIG. 6.7, ainsi qu'une masse effective trop faible sont à l'origine de ces propriétés fortuites. Il est donc nécessaire d'ajouter une contrainte au protocole d'ajustement.

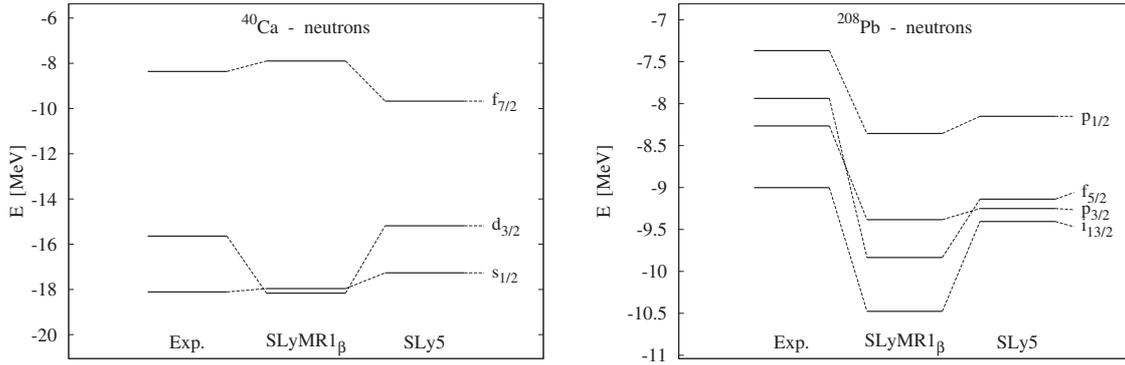


FIG. 6.9 : Schémas de niveaux individuels des neutrons et protons dans le ^{40}Ca et le ^{208}Pb : ces figures permettent de voir plus clairement les écarts entre les niveaux discutés dans le texte.

La contrainte la plus efficace trouvée pour améliorer la spectroscopie des noyaux a été celle sur l'écart entre les énergies de liaisons du ^{56}Ni et du ^{40}Ca :

$$\chi_{\text{split}}^2 = \frac{\left[\left(B_{\text{th}}(^{56}\text{Ni}) - B_{\text{th}}(^{40}\text{Ca}) \right) - \left(B_{\text{exp}}(^{56}\text{Ni}) - B_{\text{exp}}(^{40}\text{Ca}) \right) \right]^2}{\Delta_{\text{split}}^2} \quad (6.4)$$

avec $\Delta_{\text{split}}^2 = 0,1 \text{ MeV}$. En première approximation, cette différence de masse dépend directement de l'écart $f_{7/2}-d_{3/2}$ qui sont respectivement les derniers états occupés du Ni et du Ca. La contrainte directe de l'écart sur les énergies de particules individuelles est nettement plus délicate. La détermination précise de ces énergies nécessite : des calculs sur des noyaux impairs, la prise en compte de couplage particule-vibrations (calculs au-delà du champ moyen).

Nous appellerons la nouvelle interaction ainsi construite SLyMR1.

6.3.3. Paramétrisations SLyMR1 et SLyMR1_{3B}

Les paramètres ajustés et naturels de SLyMR1 sont respectivement donnés dans les TAB. 6.4 et TAB. 6.5. Les propriétés dans la matière infinie restent inchangées par rapport à celles de SLyMR1_β. On remarque une diminution de la masse effective de 0,02. La nouvelle contrainte a bien joué son rôle puisque W_0 vaut désormais $121,86 \text{ MeV fm}^5$, soit une augmentation d'environ 24 MeV fm^5 par rapport à la précédente force.

Les corrélations sont pratiquement les mêmes qu'avec SLyMR1_β et l'indétermination sur le paramètre v_0 est toujours aussi élevée. On aurait pu penser que l'ajoute de la nouvelle contrainte puisse réduire largement la barre d'erreur sur v_0 . Nous avons donc effectué un nouvel ajustement avec le protocole de SLyMR1, en retirant le terme d'interaction à 4 corps de la force, ce qui donne la paramétrisation SLyMR1_{3B}. Néanmoins, on ne peut pas conclure

que ce terme d'interaction est inutile dans une force de Skyrme, il l'est uniquement dans le protocole d'ajustement que l'on utilise.

En moyenne, les erreurs relatives sur les paramètres diminuent. On remarque une nette amélioration sur l'indétermination de l'élément de matrice d'appariement. Sur toutes les observables calculées, on ne remarque pas de différences notables en SLyMR1_{3B} et SLyMR1.

n°	par.	unité	SLyMR1			SLyMR1 _{3B}		
			p_i	Δp_i	$\Delta p_i/p_i$	p_i	Δp_i	$\Delta p_i/p_i$
1	ρ_{sat}	MeV	0,1548	0,0051	0,032	0,1549	0,0051	0,032
2	E/A	MeV	-16,1141	0,2318	0,014	-16,1035	0,2338	0,014
3	K_∞	MeV	275,5521	61,7843	0,224	276,8756	69,1567	0,249
4	m^*/m		0,5311	0,0866	0,163	0,5275	0,0809	0,153
5	J	MeV	33,3422	4,1554	0,124	32,8630	3,6925	0,112
6	$\langle V_{pp} \rangle$	MeV	-2,5225	1,4468	0,573	-2,1467	0,6161	0,287
7	x_0		0,2109	0,2033	0,964	0,2182	0,2244	1,028
8	x_1		0,6357	0,1912	0,300	0,6306	0,2129	0,337
9	x_2		-1,1410	0,1008	0,088	-1,1598	0,0909	0,078
10	y_1		1,0200	0,8684	0,851	0,9880	0,7790	0,788
11	y_{21}		-1,1162	0,0577	0,051	-1,1253	0,0581	0,051
12	y_{22}		-0,0810	0,0199	0,245	-0,0793	0,0209	0,263
13	W_0	MeV fm ⁵	121,8615	24,2763	0,199	124,6466	23,4142	0,187
14	v_0	MeV fm ⁹	-9534,4014	33327,2331	3,495	0,0000	0,0000	0,000

TAB. 6.4 : Paramètres ajustés des interaction SLyMR1 et SLyMR1_{3B}. Chaque paramètre p_i est donné avec sa barre d'erreur ainsi que son erreur relative.

n°	par.	unité	SLyMR1			SLyMR1 _{3B}		
			p_i	Δp_i	$\Delta p_i/p_i$	p_i	Δp_i	$\Delta p_i/p_i$
1	t_0	MeV fm ³	-1237,3861	95,7048	0,077	-1249,4750	93,5217	0,074
2	t_1	MeV fm ⁵	895,5612	240,6086	0,268	943,8259	174,2182	0,184
3	t_2	MeV fm ⁵	-1197,2729	622,9209	0,520	-1141,4670	598,0673	0,523
4	u_0	MeV fm ⁶	3706,7093	1570,6056	0,423	3436,7619	1298,8601	0,377
5	u_1	MeV fm ⁸	-3857,1379	2372,0167	0,615	-4471,9381	670,1806	0,149
6	u_2	MeV fm ⁸	14392,9437	5428,4774	0,377	13596,1295	4644,6638	0,341
7	x_0		0,2109	0,2033	0,964	0,2182	0,2244	1,028
8	x_1		0,6357	0,1912	0,300	0,6306	0,2129	0,337
9	x_2		-1,1410	0,1008	0,088	-1,1598	0,0909	0,078
10	y_1		1,0200	0,8684	0,851	0,9880	0,7790	0,788
11	y_{21}		-1,1162	0,0577	0,051	-1,1253	0,0581	0,051
12	y_{22}		-0,0810	0,0199	0,245	-0,0793	0,0209	0,263
13	W_0	MeV fm ⁵	121,8615	24,2763	0,199	124,6466	23,4142	0,187
14	v_0	MeV fm ⁹	-9534,4014	33327,2331	3,495	0,0000	0,0000	0,000

TAB. 6.5 : Paramètres naturels de l'interaction SLyMR1 et SLyMR1_{3B}. Chaque paramètre p_i est donné avec sa barre d'erreur ainsi que son erreur relative.

6.4. Matière nucléaire infinie

Les contraintes choisies dans la matière infinie servent à la construction d'une interaction reproduisant au mieux le point de saturation et son voisinage dans la matière nucléaire symétrique et asymétrique. Nous comparerons les équations d'état des matières infinies symétrique, asymétrique et de neutrons, obtenues avec SLy5 [14], SLyMR0 [24] et SLyMR1_{3B}. SLyMR0, ajustée par notre groupe, dont on donne la paramétrisation et les principales propriétés TAB. 6.6-6.7, est la première fonctionnelle généralisée de Skyrme, utilisable pour des calculs MR-EDF. Elle dérive d'un potentiel avec un terme de contact pour le 3 et 4 corps. Cependant, elle n'est même pas en mesure de satisfaire les propriétés du *bulk*. En plus d'une saturation trop faible et d'une énergie par particules trop élevée, la masse effective isoscalaire est tout particulièrement mauvaise tout comme son énergie de symétrie J qui est de 23 MeV contre les 32 ± 2 MeV attendus. Cette première paramétrisation n'est qu'une étape exploratoire dans la phase de développement des nouvelles interactions de Skyrme.

param.	unité	p_i
t_0	MeV fm ³	-1229,0932
t_1	MeV fm ⁵	632,4601
t_2	MeV fm ⁵	45,0813
x_0		0,2838
x_1		-0,0380
x_2		1,8500
W_0	MeV fm ⁵	122,6185
u_0	MeV fm ⁶	2529,1512
v_0	MeV fm ⁹	-14750,0000

TAB. 6.6 : Paramètres naturels de l'interaction SLyMR0 [24].

\mathcal{O}_i	unité	valeur
ρ_{sat}	fm ⁻³	0,152
E/A	MeV	-15,04
K_{∞}	MeV	264,2
m_0^*/m		0,47
J	MeV	23,0

TAB. 6.7 : Principales propriétés de l'interaction SLyMR0 [24].

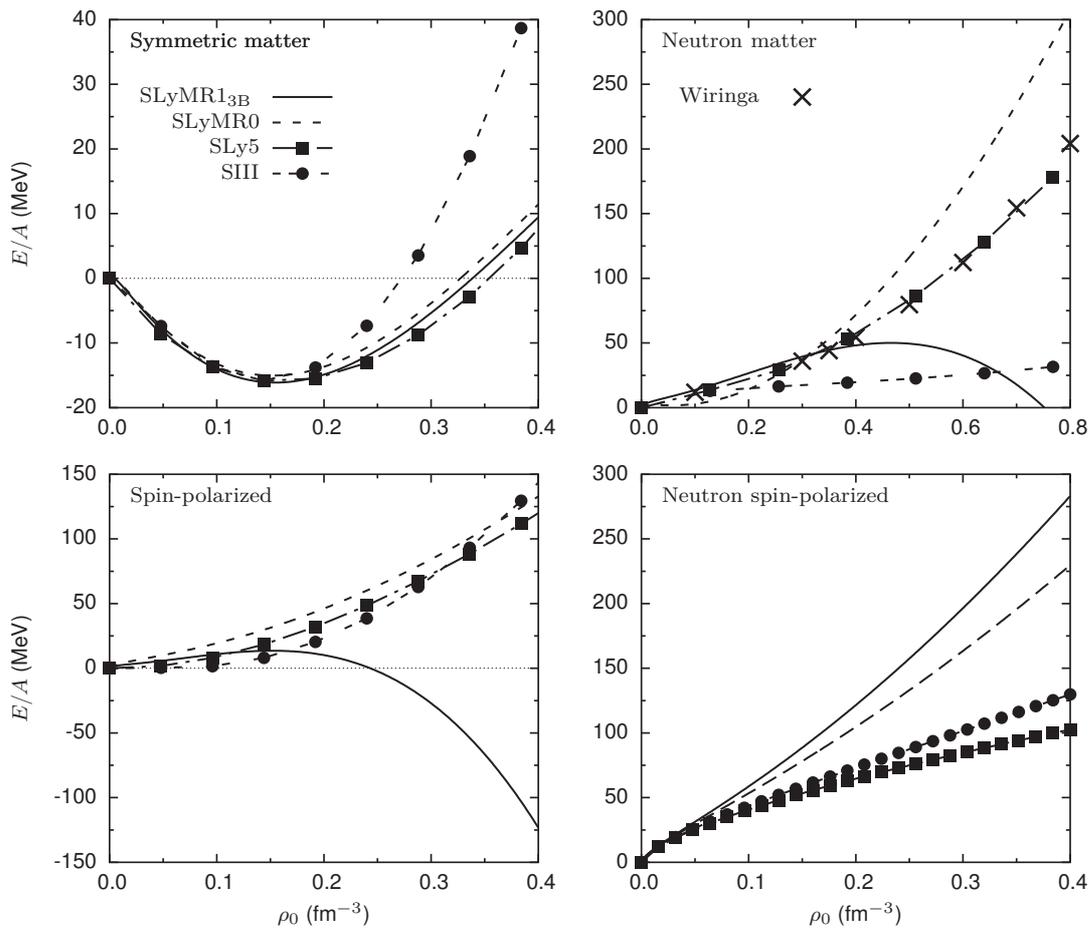


FIG. 6.10 : Équations d'état de la matière nucléaire infinie symétrique pour SLyMR1_{3B}, SLyMR0, SLy5 et SIII en fonction de la densité (haut, gauche). *Idem* pour la matière de neutron (haut, droite), la matière nucléaire infinie polarisée en spin (bas, gauche) et la matière de neutrons polarisée en spins (bas, droite). Les croix noires correspondent aux résultats de calculs *ab initio* effectués par Wiringa *et al.* [154]

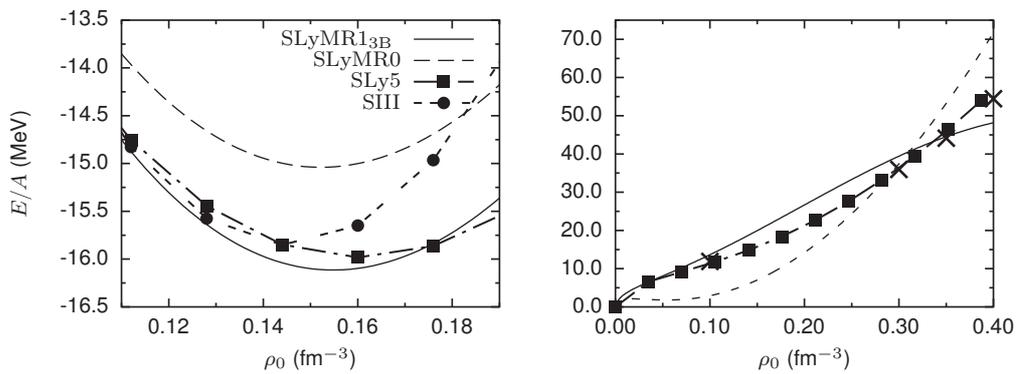


FIG. 6.11 : Agrandissements des équations d'état de la matière symétrique (gauche) et de neutrons (droite) pour SLyMR1_{3B}, SLyMR0, SLy5 et SIII en fonction de la densité.

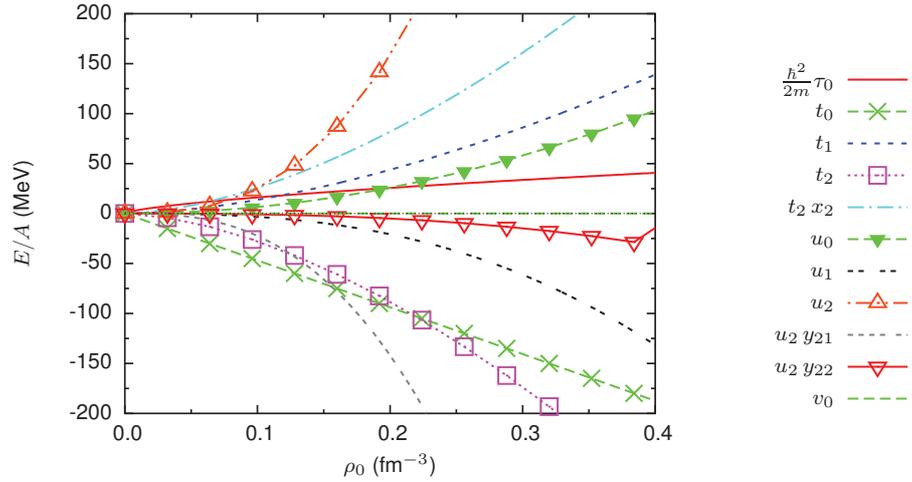


FIG. 6.12 : Contributions individuelles de chaque paramètre (ou combinaisons de paramètres) à l'équation d'état en fonction de la densité. Les calculs sont effectués avec SLyMR1_{3B}.

6.4.1. Matière symétrique

Équation d'état

Au cours d'ajustements préliminaires, nous avons constaté que la densité de saturation était toujours un peu faible ($\simeq 0,15 \text{ fm}^{-3}$) [23]. C'est encore le cas pour les SLyMR où, ρ_{sat} est plus faible que la valeur canonique visée EQ. (3.12a). Pour SLyMR1_{3B}, dont on a extrait les barres d'erreurs, la valeur obtenue (TAB.6.5) avec son indétermination $\Delta\rho_{\text{sat}}$ est compatible à la donnée contrainte de $0,16 \text{ fm}^{-3}$. Pour l'énergie par particule à la saturation E/A , on obtient une matière un peu plus liée qu'avec les forces standards SLy5 ou SIII. Comme on peut le voir sur la figure 6.10, l'ajout de termes supplémentaires, par rapport à SLyMR0, améliore sensiblement la qualité de reproduction du point de saturation puisque l'on passe de $-15,04 \text{ MeV}$ à $-16,11 \text{ MeV}$. Cette différence dans l'énergie peut s'expliquer par la présence du terme cinétique à 3 corps $B_0^T \rho_0 \rho_0 \tau_0$, inexistant avec SLyMR0.

On représente sur la figure 6.12 les contributions de chacun des termes dépendant des paramètres de SLyMR1_{3B} à l'équation d'état totale E/A . On constate tout d'abord que l'énergie totale par nucléon est le fruit de fortes compensations entre ces différents termes. Les termes directs t_2 et u_2 se compensent quasiment mutuellement avec leur terme d'échange $t_2 x_2$ et $u_2 y_{21}$. À des densités inaccessibles et bien au-delà du domaine de validité du modèle, les termes en t_2 et $u_2 y_{21}$ dominent et conduisent à une condensation non physique de la matière nucléaire. On peut voir, sur la FIG. 6.13, qu'au voisinage de la saturation, si l'on regarde les contributions termes à termes, aucune hiérarchie ne se dégage entre les termes de l'interaction à 2 et 3 corps. Les contributions sommées montrent, quant à elles, que l'interaction à 2 corps contribue majoritairement à l'énergie.

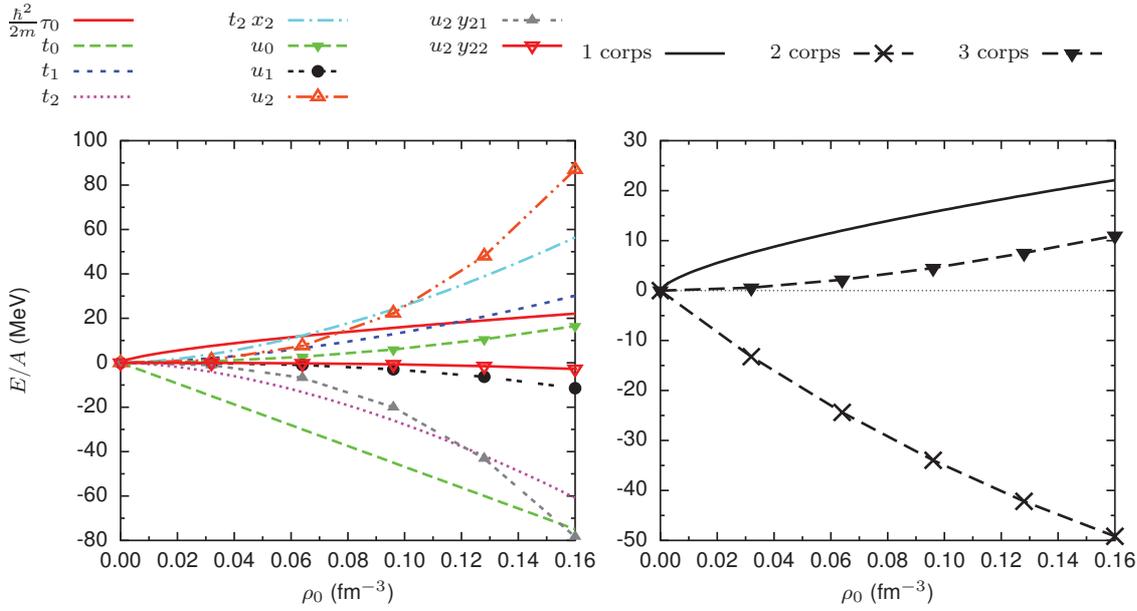


FIG. 6.13 : Contributions individuelles de chaque paramètre (ou combinaisons de paramètres) à l'équation d'état en fonction de la densité. Coupure après ρ_{sat} (gauche); contribution totale des termes à un, deux et trois corps à l'équation d'état (droite). Les calculs sont effectués avec SLyMR1_{3B}.

Masse effective isoscalaire

La forme analytique de la masse effective isoscalaire EQ. (3.21) laisse entrevoir la possible existence de pôles pour une densité donnée. La présence de ces pôles a été confirmée dans la thèse de Sadoudi [23]. Les paramétrisations étudiées montraient des pôles pour des densités avoisinant $2,5 \rho_{\text{sat}}$ ce qui est sans conséquence, car ce domaine de densité reste inexploré dans les noyaux. La FIG. 6.14 montre l'évolution de la masse effective en fonction de la densité. On remarque que : (i) les masses effectives de SLyRM0, SIII et SLy5 sont des fonctions monotones décroissantes dans l'intervalle de densités étudiées alors que (ii) SLyMR1_{3B} admet un minimum vers $0,5 \text{ fm}^{-3}$ puis évolue vers un pôle situé au-delà de $0,8 \text{ fm}^{-3}$; (iii) les courbes pour SLy5 et SIII ont la même allure.

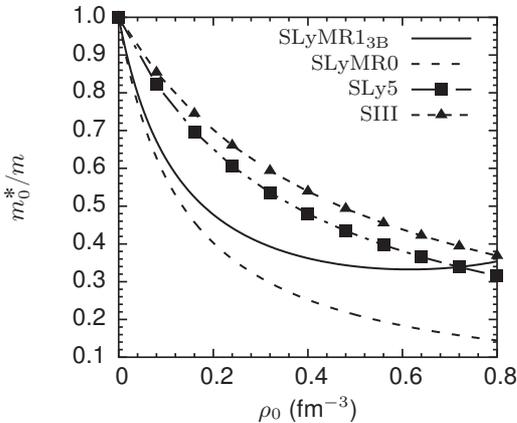


FIG. 6.14: Masse effective isoscalaire dans la matière nucléaire infinie symétrique en fonction de la densité pour SLyMR0, SLyMR1_{3B}, SLy5 et SIII.

6.4.2. Matière de neutrons

On représente l'équation d'état de la matière neutronique sur la FIG. 6.10 (à droite, en haut). La fonctionnelle SLy5 reproduit très bien les points de Wiringa *et al.* [154] sur lesquels elle a été ajustée^[c]. Les résultats obtenus avec les trois autres fonctionnelles sont, quant à eux, moins satisfaisants (voir FIG. 6.11). SLyMR1_{3B} reproduit assez bien les trois points que nous avons choisi de contraindre (entre 0,1 et 0,35 fm⁻³). Au-delà, la courbe s'éloigne des données jusqu'à s'effondrer aux hautes densités. Par conséquent, il ne sera pas question d'utiliser cette interaction en astrophysique nucléaire (ce qui n'était pas un objectif que nous nous étions fixé).

6.4.3. Matières polarisées

Les deux sous-figures de la partie inférieure de la FIG. 6.10 montrent le comportement des équations d'état des matières nucléaires infinies symétriques et de neutrons, polarisées en spin. Dans la matière symétrique polarisée, SLyMR0, SLy5 et SIII ont un comportement similaire alors que SLyMR1_{3B} s'effondre pour des densités au-delà de 0,22 fm⁻³. On peut espérer que cette densité est suffisamment élevée pour que cela ne pose aucun problème lors de calculs sur les noyaux polarisés. Pour terminer, dans la matière de neutrons polarisée, on remarque deux comportements distincts : celui des forces SLyMR1_{3B} et SLyMR0 et celui des forces standards. Dans la région des hautes densités, les croissances en énergies des forces SLyMR sont nettement plus importantes que celles des forces standards.

6.4.4. Instabilités

On montre sur la FIG. 6.15 les évolutions des densités critiques, dont nous avons parlé dans la partie 3.2.5 du chapitre III, en fonction du moment transféré. Dans la matière infinie symétrique et de neutrons, ces densités sont contraintes au-delà de 0,26 fm⁻³. Ce critère est parfaitement respecté que ce soit pour SLyMR1_{3B} ou SLyMR1. Dans le canal (0,0,0), pour les densités inférieures à la saturation, on remarque une « bulle » qui correspond à la transition liquide-gaz de la matière nucléaire. Alors que les forces standards avec une dépendance en densité ne montrent jamais d'instabilités au-delà de la densité de saturation dans le canal (0,0,0), on constate que ce n'est pas le cas pour les SLyMR. Il est possible que ce soit une particularité des forces à trois corps ou des contraintes ajoutées dans le canal d'appariement.

[c]. Pour être plus précis, on remarque en réalité une légère déviation, croissante, vers les hautes densités. Elle est causée par des tolérances sur chaque point augmentant avec la densité du milieu.

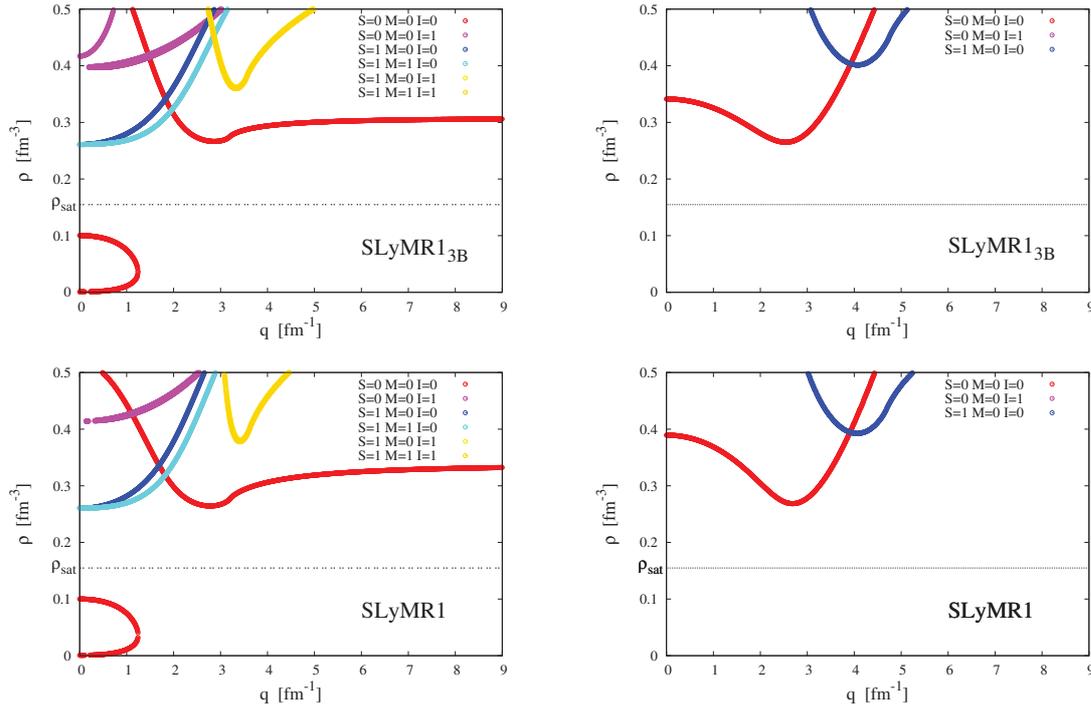


FIG. 6.15 : Évolution des densités critiques, en fonction du moment transféré, dans les canaux (S, M, I) de la matière infinie symétrique (gauche) et dans les canaux (S, M) de la matière de neutrons (droite).

6.5. Matière nucléaire semi-infinie

6.5.1. Champs de la fonctionnelle

Les différents champs de la fonctionnelle, dans la matière semi-infinie, sont représentés sur la FIG. 6.16 en fonction de la coordonnée z pour deux paramétrisations : SLy5 et SLyMR1_{3B}. On décompose les contributions aux différents potentiels des termes à 2, 3 et 4 corps pour SLyMR1_{3B} ; des termes à 2 corps et des termes dépendant de la densité pour SLy5 (notés SLy5-3c sur les graphiques).

Le panneau supérieur (a) représente les champs cinétiques des deux fonctionnelles. Il ne s'agit pas du champ cinétique complet puisque nous ne prenons pas en compte la contribution du terme cinétique à un corps. On remarque que : (i) la contribution des termes à deux corps (tirets noirs) de SLyMR1_{3B} est répulsive alors que celle des termes à trois corps (tirets et points noirs) est attractive ; (ii) les valeurs asymptotiques des champs de SLy5 (ligne bleue) et SLyMR1_{3B} (ligne noire) diffèrent beaucoup, ce qui s'explique par la différence notable entre les masses effectives isoscalaires de ces deux interactions ; (iii) dans un second plan, on remarque que le champ de SLyMR1_{3B} montre des oscillations de Friedel de plus grande amplitude que celui de SLy5.

Le panneau intermédiaire (b) représente les champs centraux, on peut voir que : (i) les contributions des termes à trois corps de SLyMR1_{3B} et des termes dépendant de la densité

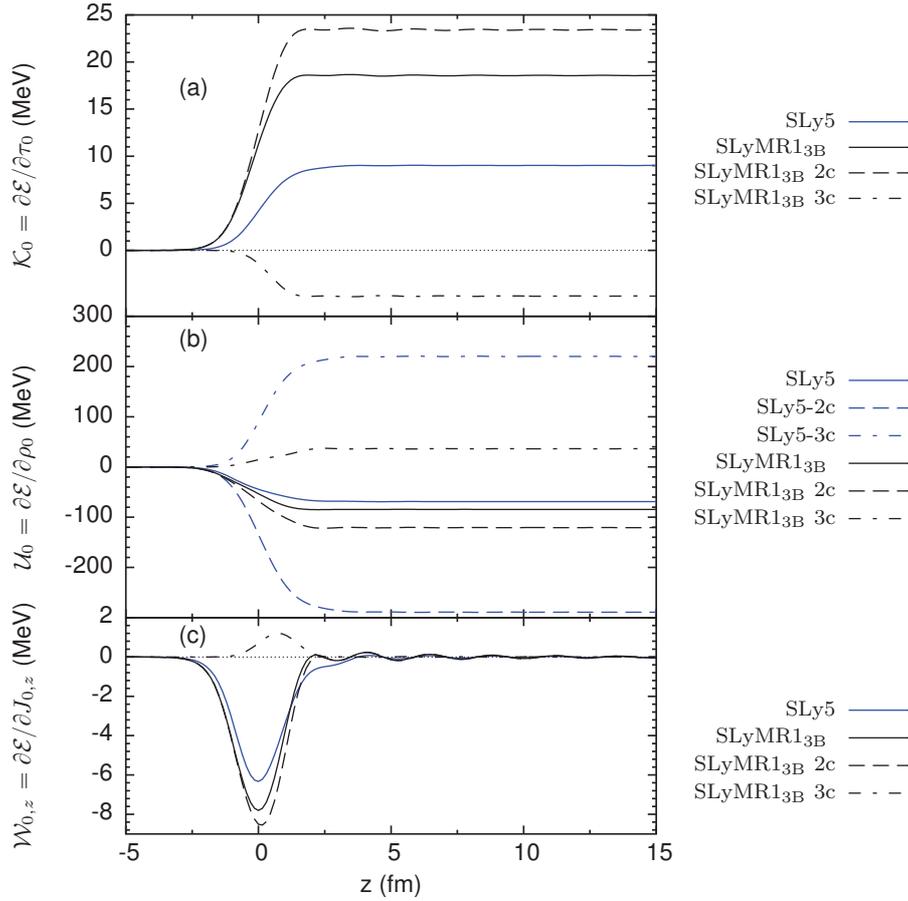


FIG. 6.16 : Champs de la fonctionnelle dans la matière semi-infinie pour SLy5 et SLyMR1_{3B}. Le tableau supérieur (a) représente le champ cinétique ; le tableau du milieu (b) le champ central ; le tableau inférieur (c) représente le champ spin-orbite. On montre la décomposition des contributions des termes à 2-, 3- et 4 corps pour SLyMR1_{3B} et des termes à 2 corps et dépendant de la densité (notés 3c) pour SLy5.

pour SLy5 sont de même signe. Même remarque pour les termes à deux corps ; (ii) les champs totaux pour SLy5 et SLyMR1_{3B} ont des valeurs asymptotiques semblables, cependant SLy5 est le fruit de la compensation de deux grands termes alors que pour SLyMR1_{3B}, ces termes sont trois à quatre fois plus petits.

Le panneau inférieur (c) représente le potentiel spin-orbite, on remarque que : (i) les champs sont caractérisés par d'importantes oscillations de Friedel, se propageant loin dans la matière nucléaire. Les oscillations sont marquées puisque ce potentiel dépend de termes en gradient de la densité ; (ii) les contributions des termes à 2- et 3 corps de SLyMR1_{3B} sont de signes opposés et leurs *extrema* légèrement décalés. Les contributions des termes à 2 corps sont proportionnelles à $J_z(z)$ et $\partial_z \rho(z)$ donc avec un maximum centré en zéro. Celles des termes à 3 corps sont en $J_z(z)\rho(z)$ ce qui explique le minimum décalé côté matière.

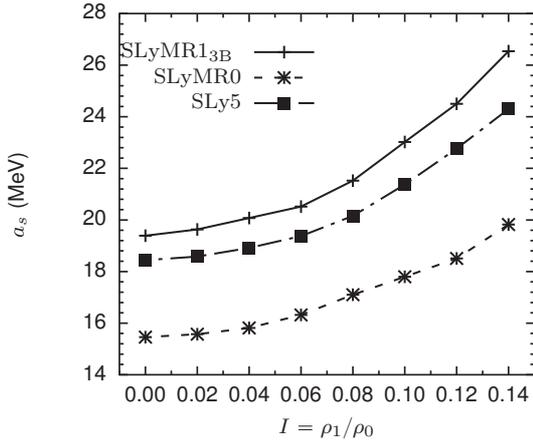


FIG. 6.17: Évolution de l'énergie de surface a_s en fonction de l'asymétrie d'isospin dans la matière nucléaire semi-infinie. Les calculs sont effectués avec SLyMR0, SLyMR1_{3B}, et SLy5.

6.5.2. Énergie de surface

Comme nous l'avons confirmé dans le chapitre V, l'énergie de surface est une quantité importante pour l'étude des propriétés de fission et déformation des noyaux lourds même si sa valeur reste assez mal définie. Elle est de l'ordre de $18,5 \pm 2$ MeV d'après différents ajustements des coefficients de la formule de la goutte liquide. Les résultats obtenus dans la matière semi-infinie symétrique ($N = Z$) montrent que SLy5 et SLyMR1_{3B} satisfont cette condition alors que SLyMR0 possède une énergie de surface un peu trop faible.

On montre sur la figure 6.17 l'évolution de l'énergie de surface en fonction de l'asymétrie d'isospin pour SLy5 et les deux forces SLyMR. Globalement, le comportement pour les trois interactions est identique. Plus précisément, la pente en chaque point de ces courbes est similaire. Comme nous pouvions l'attendre, l'énergie de surface augmente avec l'asymétrie d'isospin jusqu'à ce que la matière semi-infinie ne soit plus liée.

6.6. Propriétés des noyaux

6.6.1. Densités

On trace à nouveau les profils de densité des nucléons dans le ^{208}Pb obtenus avec SLyMR1_{3B} sur le panneau de gauche FIG. 6.18. Les changements entre SLyMR1 _{β} et SLyMR1_{3B} ne sont pas décelables. Les oscillations sont toujours très présentes et l'augmentation de la valeur du paramètre du spin-orbite W_0 n'améliore pas l'allure des profils de densité dans les noyaux.

6.6.2. Champs

On représente sur les figures 6.19 les champs centraux dans le ^{208}Pb pour SLyMR0, SLyMR1_{3B} et SLy5. La figure de gauche montre les contributions des termes à deux, trois à ce champ. Concernant ces dernières, on remarque que les comportements et ordres de grandeur sont les mêmes que ce que l'on vient de voir dans la matière semi-infinie (partie 6.5.1). Le rôle des termes à deux corps est deux fois plus important que celui des termes à trois corps. Le quatre corps est négligeable. À cause de leurs faibles masses effectives, les potentiels cen-

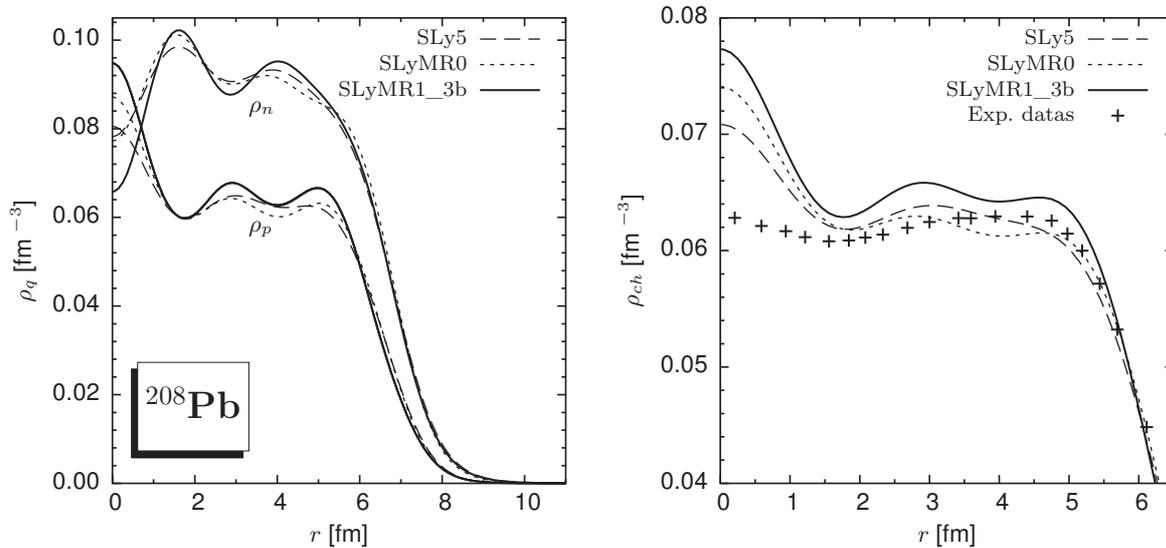


FIG. 6.18 : Profils de densité des neutrons et protons dans le ^{208}Pb (gauche). Profils de densité de charge (droite). Les croix noires correspondent à des données expérimentales.

traux des SLyMR sont plus profonds qu'avec SLy5. Encore une fois, les oscillations sont très marquées (10 MeV d'amplitude pour SLyMR1_{3B}).

Les masses effectives de neutrons dans le noyau représentées FIG. 6.20. On voit que la contribution des termes à trois corps est faible devant celle des termes à 2 corps.

Les oscillations dans les potentiels spin-orbite FIG. 6.21, au centre du plomb, sont à nouveau fortes puisqu'une partie de ce champ dépend des gradients de la densité. Le pic à la surface du noyau est légèrement décalé vers la matière pour SLyMR1_{3B}. En effet, c'est la seule interaction où l'on aura des termes en $J\rho$ dans le champ. Les deux autres possèdent que des termes proportionnels à J , le minimum sera donc centré sur la surface du noyau. Pour la décomposition des contributions des termes deux et trois corps, nous tirons les mêmes conclusions que pour le champ spin-orbite dans la matière semi-infinie 6.5.1 p.100.

6.6.3. Énergies de liaison

On représente sur la FIG. 6.22 les différences d'énergies de liaison calculées et expérimentales des isotopes du calcium, du nickel, de l'étain et du plomb. La zone colorée représente les barres d'erreur sur chaque énergie de liaison calculée avec SLyMR1_{3B}. On voit que :

- (i) la qualité des prédictions obtenues avec SLy5 est largement supérieure à celle de SLyMR1_{3B} pour les noyaux semi-magiques, mais rappelons que, dans le premier cas, l'interaction particule-particule a été ajustée indépendamment de l'interaction particule-trou ;

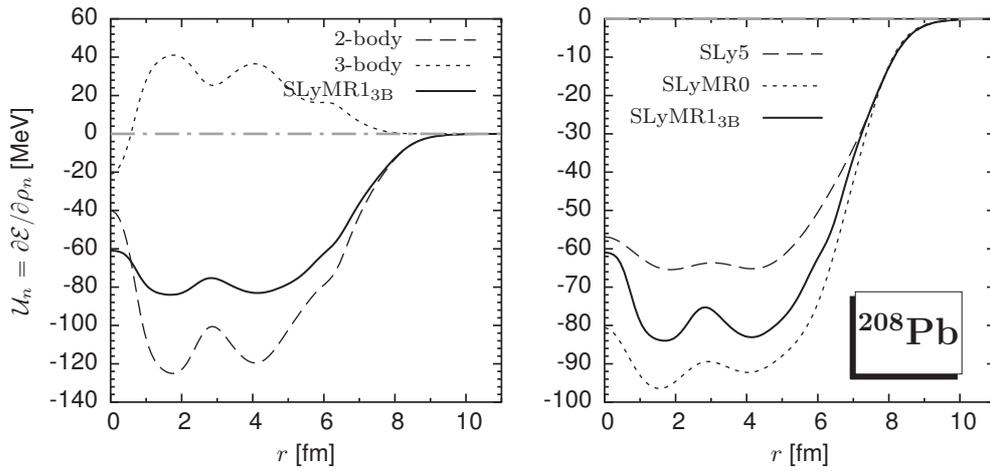


FIG. 6.19 : Champ central des neutrons dans le ^{208}Pb . À gauche décomposition des contributions des termes à 2, 3 et 4 corps, à droite comparaison avec SLyMR0 et SLy5.

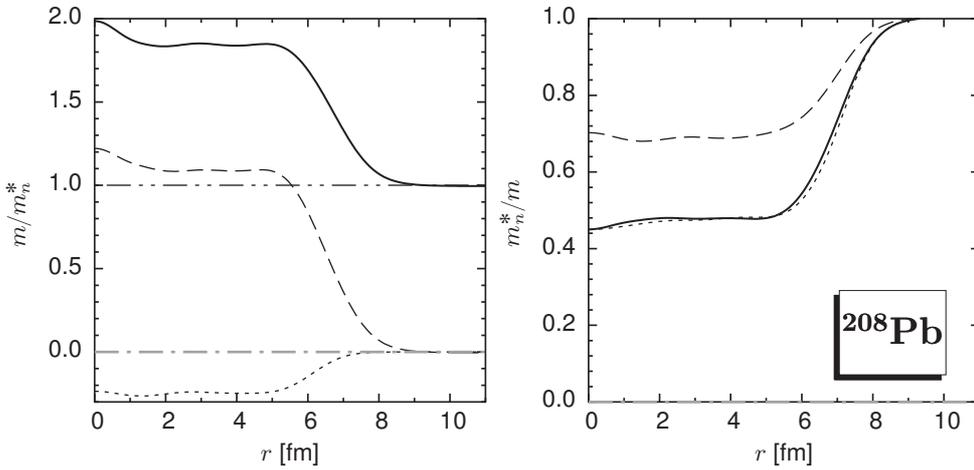


FIG. 6.20 : Idem pour la masse effective des neutrons dans le ^{208}Pb .

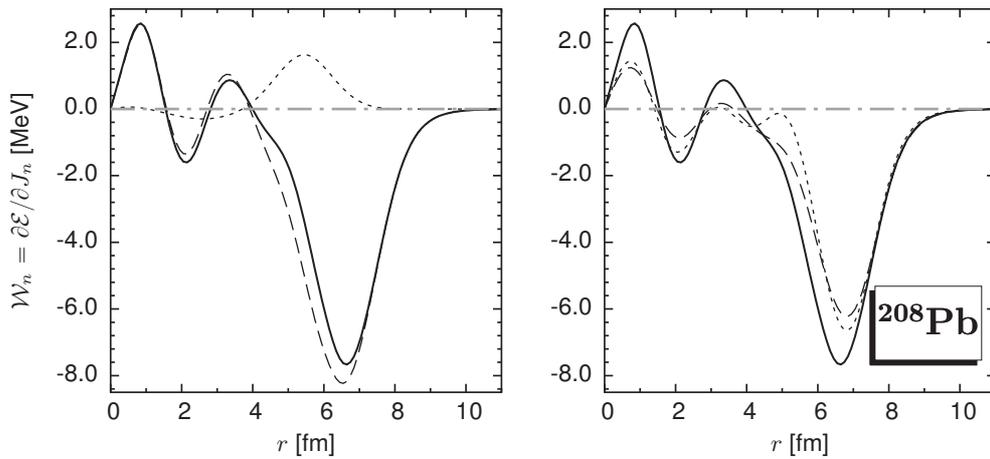


FIG. 6.21 : Idem pour le champ spin-orbite des neutrons dans le ^{208}Pb .

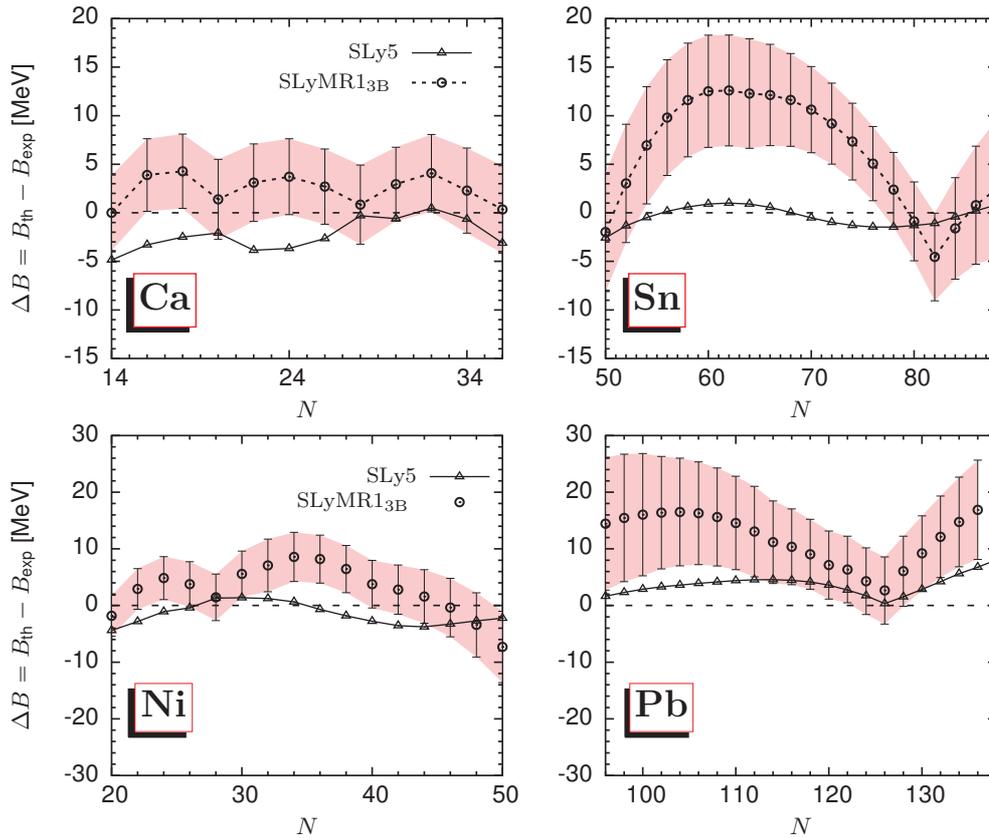


FIG. 6.22 : Écarts entre les énergies de liaison calculées et les énergies mesurées expérimentalement [103] pour les isotopes du calcium et de l'étain. Les écarts pour SLyMR1_{3B} sont fournis avec des barres d'erreur pour chaque noyau.

- (ii) plus le nombre de masse augmente, plus la qualité des résultats se dégrade rapidement. Les écarts maximums observés sont de l'ordre de 15 MeV pour la force à trois corps contre 5 MeV pour SLy5 ;
- (iii) l'erreur sur la détermination des énergies des calciums est de l'ordre de ± 4 MeV, soit 1% de la valeur totale. Toutes les énergies calculées sont compatibles avec les mesures expérimentales ;
- (iv) la série des nickels est déjà moins bien reproduite, toutes les valeurs prédites ne sont désormais plus compatibles avec les mesures. Les barres d'erreur sont à peu près constantes et de l'ordre de $\pm 5,5$ MeV ;
- (v) pour la série des étains, les écarts théorie-expérience deviennent très importants. Il n'y a qu'au voisinage des noyaux doublement magiques que l'on observe des écarts raisonnables ;
- (vi) même remarque pour les plombs ;
- (vii) les barres d'erreur s'accroissent avec le nombre de masse, mais, il est important de remarquer que le rapport $\Delta B/B$ reste du même ordre de grandeur, pour tous les noyaux calculés ici. L'indétermination moyenne sur les énergies de liaison est d'environ 1%.

6.6.4. Prédiction dans les noyaux riches en neutrons

La FIG. 6.23 de gauche montre l'évolution de l'énergie de liaison par nucléons prédite sur la série isotopique des étains. Les calculs numériques sont effectués jusqu'à ce que le potentiel chimique des neutrons devienne positif soit, pour SLyMR1_{3B}, jusqu'à $N = 116$. On voit que les barres d'erreur diminuent de $N = 50$ à $N = 82$ puis augmentent significativement dès que l'on entre dans la *terra incognita*.

La FIG. 6.23 de droite sert à montrer les différences entre SLyMR1 et SLyMR1_{3B}. Plus particulièrement, en quoi le retrait d'un paramètre fortement indéterminé (ici v_0) peut influencer la qualité des extrapolations dans des zones inaccessibles expérimentalement. On trace quatre courbes représentant les écarts entre des calculs effectués avec SLyMR1 et SLyMR1_{3B} :

$$\Delta(\mathcal{O}) = \mathcal{O}_{\text{Sn},N}^{\text{SLyMR1}} - \mathcal{O}_{\text{Sn},N}^{\text{SLyMR1}_{3B}}, \quad (6.5a)$$

$$\Delta(\Delta\mathcal{O}) = \Delta\mathcal{O}_{\text{Sn},N}^{\text{SLyMR1}} - \Delta\mathcal{O}_{\text{Sn},N}^{\text{SLyMR1}_{3B}}, \quad (6.5b)$$

où \mathcal{O} est une observable et $\Delta\mathcal{O}$ son erreur associée.

Les différences sur les gaps et leurs barres d'erreur sont faibles. De plus, le comportement paraît un peu erratique et difficilement interprétable. Les différences observées sur les énergies de liaisons sont beaucoup plus intéressantes, on remarque que :

- (i) tant que l'on effectue les calculs entre deux isotopes dont l'énergie de liaison est contrainte dans le protocole, les écarts observés entre SLyMR1 et SLyMR1_{3B} sont très petits et varient peu ;
- (ii) lorsque l'on s'éloigne des données contraintes, pour des noyaux riches en neutrons, la différence d'énergie de liaison augmente entre les deux forces et montre que SLyMR1 lie beaucoup plus les noyaux riches en neutrons ;
- (iii) on constate également que l'indétermination sur l'énergie de liaison est plus faible avec SLyMR1_{3B} et qu'elle croît plus lentement.

Les deux derniers points démontrent qu'un paramètre mal contraint dans un ajustement peut être à l'origine de mauvais résultats dès que l'on s'éloigne du domaine de prédiction interne du modèle, ce qui corrobore une de nos conclusions du chapitre IV.

6.6.5. Gaps d'appariement

L'évaluation des gaps de neutron expérimentaux se fait à l'aide de formule de différences de masses à trois points donnée (3.42). Dans la FIG. 6.24, on compare cette donnée aux gaps spectraux théoriques évalués sur les noyaux pairs-pairs des séries isotopiques du calcium et de l'étain. Les forces à trois corps donnent en moyenne des gaps plus petits que ceux attendus ce qui met en évidence une densité d'état trop faible au voisinage du niveau de Fermi. Néanmoins, des paramétrisations d'essais construites avec des valeurs de m_0^* plus élevées n'ont pas montré d'améliorations des propriétés d'appariement. Au contraire, elles ont montré des gaps encore plus faibles ce qui est en accord avec la discussion (partie 6.2.2) sur la corrélation fortuite entre m_0^* et l'intensité de l'appariement $\langle V_{pp} \rangle$. On remarque, pour SLyMR0, des coupures inattendues de l'appariement pour $N=18$ et $N=58$, certainement dues à des réarrangements entre les niveaux. Comme pour les énergies de liaison, les gaps théoriques

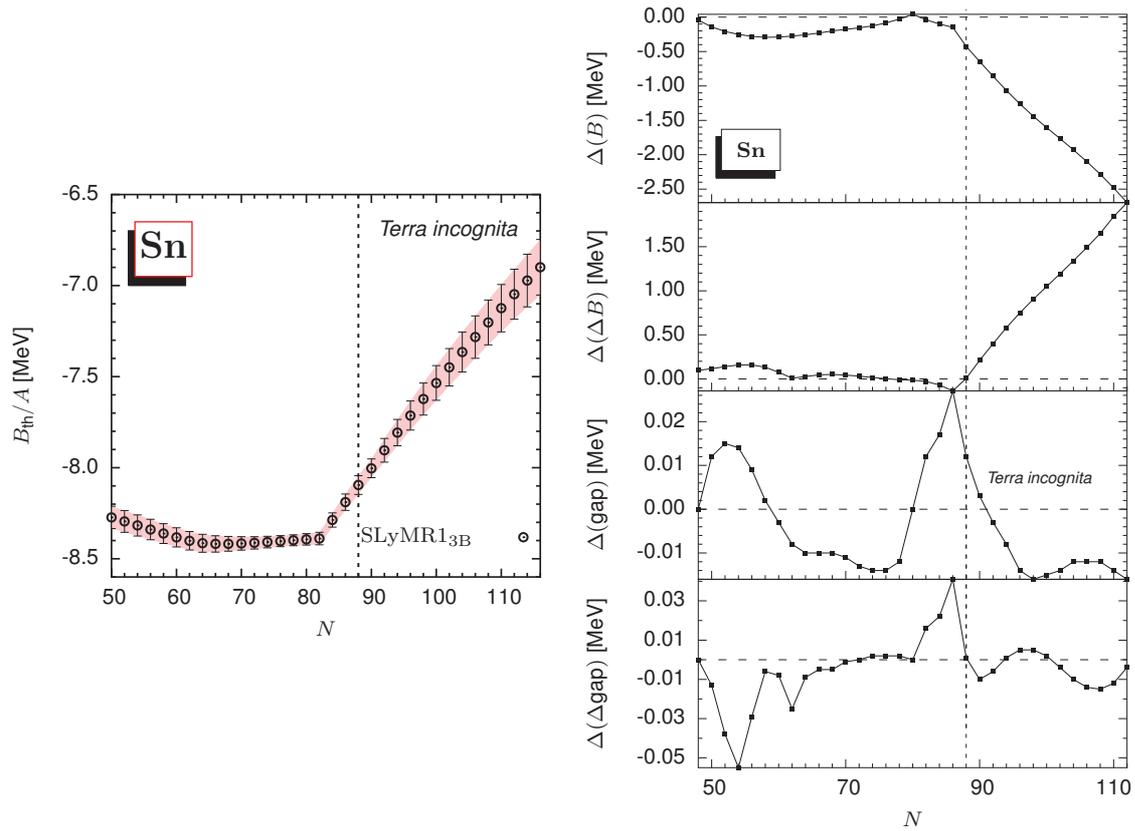


FIG. 6.23 : Énergie de liaison par nucléons des isotopes de l'étain. La droite verticale en pointillés sert de démarcation de *terra incognita* (gauche). Représentation des écarts entre l'énergie de liaison, leurs barres d'erreur associées, le gap et sa barre d'erreur, calculés avec SLyMR1 et SLyMR1_{3B} pour la série des Sn (droite). $\Delta(\mathcal{O}) = \mathcal{O}_{\text{SLyMR1}} - \mathcal{O}_{\text{SLyMR1}_{3B}}$.

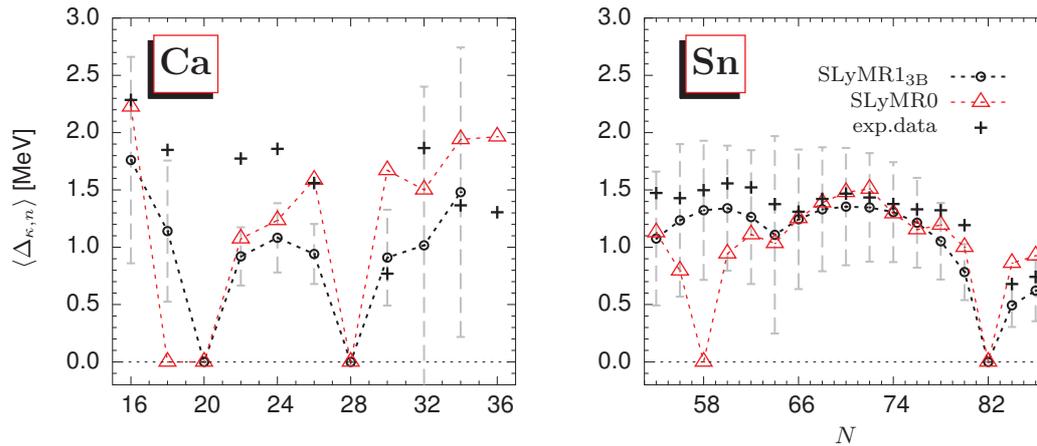


FIG. 6.24 : Gaps spectraux de neutrons pour les isotopes du calcium et de l'étain calculés avec SLyMR0 et SLyMR1_{3B}. Les croix noires correspondent aux gaps extraits à l'aide d'une formule de différence de masses à trois points(3.42). Les gaps de neutrons calculés avec SLyMR1_{3B} sont fournis avec leur barre d'erreur.

deviennent supérieures aux valeurs expérimentales pour les fortes asymétries de neutrons. La dépendance en isospin de l'interaction particule-particule n'est donc pas correcte.

6.6.6. Énergies des particules individuelles

Pour terminer cette étude des propriétés de la force SLyMR1_{3B}, regardons les énergies de particules individuelles dans les noyaux doublement magiques. Les spectres sont regroupés sur les FIG. 6.25 et FIG. 6.26. Nous constatons les faits suivants :

- (i) les spectres obtenus avec SLyMR1_{3B} sont tous trop dilatés ce qui est dû à la masse effective trop faible de cette interaction ;
- (ii) néanmoins, la hiérarchie des niveaux est respectée par rapport aux spectres expérimentaux ;
- (iii) on peut même voir que, dans certains cas, les résultats obtenus avec SLyMR1_{3B} sont meilleurs que ceux avec SLy5. C'est le cas, par exemple, pour les spectres de neutrons et protons du ⁴⁸Ca où les niveaux $d_{3/2}$ et $s_{1/2}$ sont échangés avec SLy5. On remarque également un échange entre $g_{7/2}$ et $d_{5/2}$ dans le spectre des neutrons dû ¹³²Sn avec SLy5.

En ce qui concerne la spectroscopie, la qualité des résultats ne pourra être discutée que lorsque des calculs au-delà du champ moyen auront été réalisés. Bien que les spectres semblent ici trop dilatés, on peut rester raisonnablement optimistes en voyant les résultats relativement encourageants obtenus par Bally *et al.* [155] avec SLyMR0.

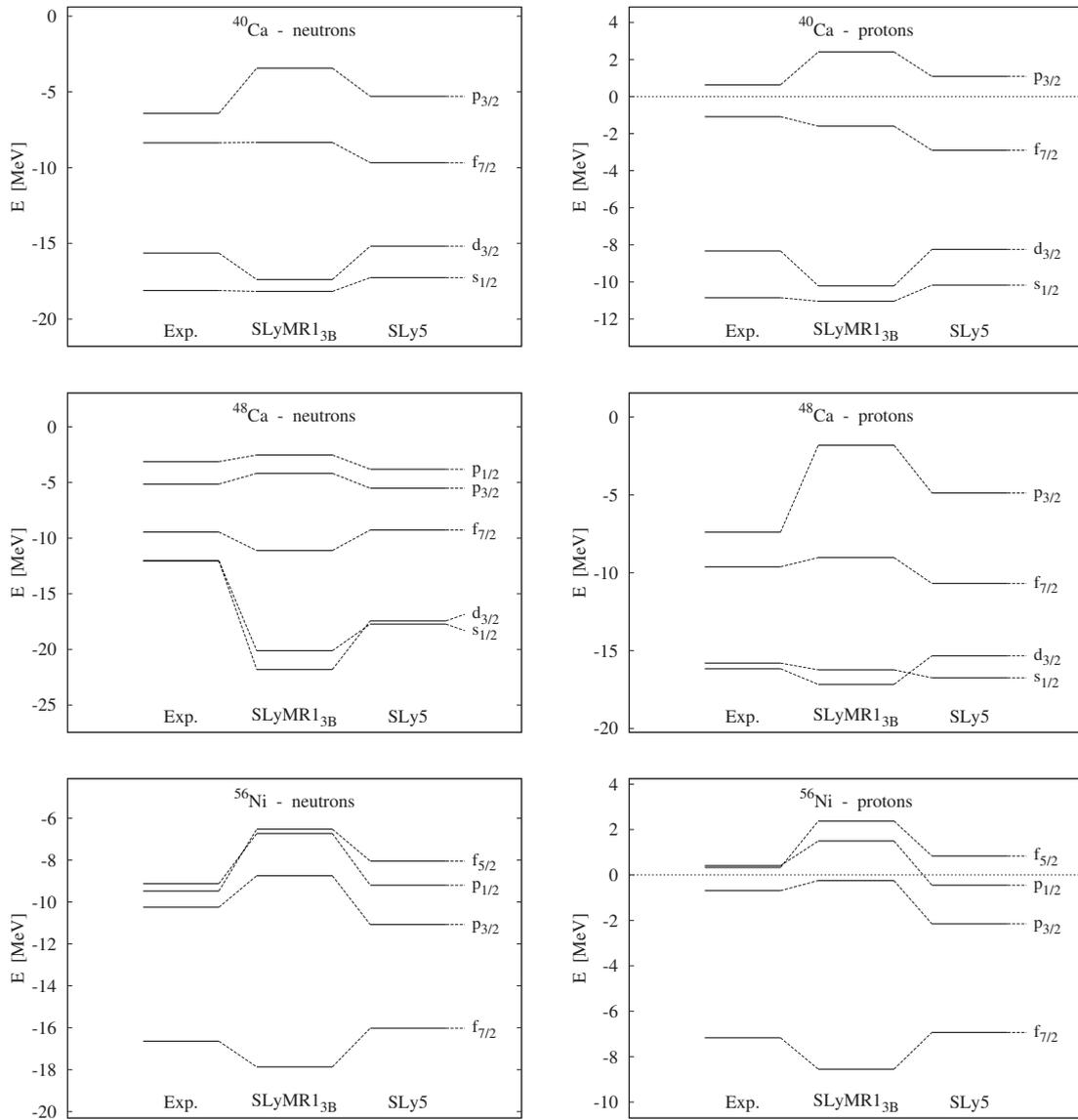


FIG. 6.25 : Schémas de niveaux individuels des neutrons et protons calculés avec SLyMR1_{3B}.

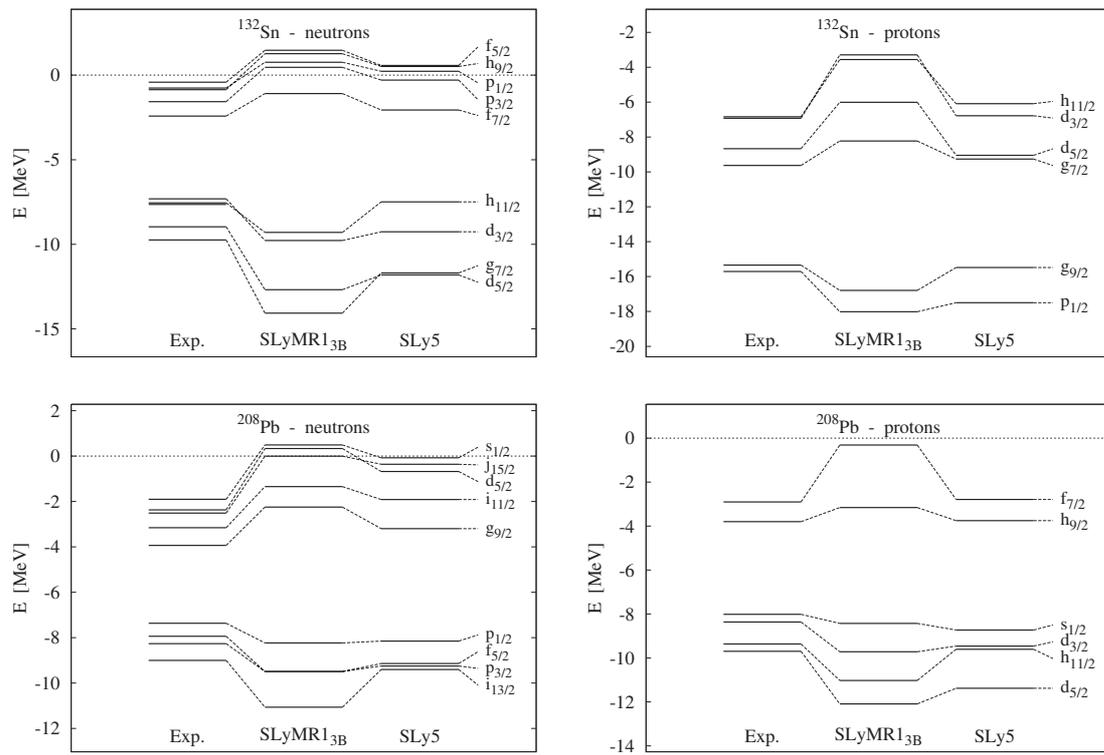


FIG. 6.26 : Suite de la FIG. 6.25.

Conclusion et perspectives

Le principal objectif de ce travail a été d'ajuster la première paramétrisation de nouvelles interactions de Skyrme avec termes d'interaction à trois et quatre corps : (i) utilisable dans le canal d'appariement, (ii) ne conduisant pas à des instabilités dans la matière nucléaire infinie [29] et (iii) contenant des termes dérivatifs jusqu'à l'ordre deux dans la partie à trois corps. Cette paramétrisation va ainsi permettre d'effectuer les premiers calculs MR-EDF sans qu'aucune pathologie se manifeste, comme ce fut le cas avec les anciennes générations de forces de Skyrme [19–21] et sans qu'il soit nécessaire d'envisager une quelconque méthode de régularisation.

Au moyen d'outils simples [31, 156], nous avons pu fournir une paramétrisation avec des barres d'erreurs à la fois sur les paramètres et sur des observables. Les incertitudes sur les constantes de couplages ont permis de voir que certaines d'entre elles étaient fortement indéterminées. L'importance de la barre d'erreur sur l'unique paramètre du quatre corps v_0 nous a, en partie, permis de comprendre que son rôle était négligeable. Sa valeur étant par ailleurs compatible avec zéro nous a permis d'envisager un nouvel ajustement sans ce terme. Les incertitudes théoriques relatives sur les énergies de liaison obtenues sont conformes à nos attentes et se situent entre 0,3% et 1,5%. Celles sur les pseudo-observables de la matière infinie sont plus importantes et varient de 1,3 à 22,5%, valeurs qui s'expliquent par l'antagonisme de certaines contraintes, ce qui nous a conduit à choisir des tolérances plus importantes lors de la construction du protocole d'ajustement. Nous avons, en particulier, mis en évidence, une anti-corrélation entre l'appariement et la masse effective, ce qui semble être à l'origine d'une part des défauts des forces SLyMR.

L'interaction SLyMR1_{3B} montre des résultats néanmoins encourageants. Les améliorations, par rapport à SLyMR0, sont nombreuses. En premier lieu, les propriétés de la matière infinie ont été sensiblement optimisées et sont pour une majorité d'entre elles compatibles avec les valeurs canoniques attendues. L'énergie de symétrie et la masse effective isoscalaire sont les deux quantités qui ont le plus été corrigées en passant de SLyMR0 à SLyMR1_{3B}. Il faut aussi noter que les propriétés d'appariement ont été très nettement améliorées. Enfin, l'énergie de surface a également été optimisée.

Toutefois, la qualité des prédictions pour des calculs SR-EDF reste bien au-dessous de celle atteinte par les fonctionnelles standards comme SLy5 [14, 15] ou encore UNEDF [17, 18, 157]. Suite à l'étude effectuée dans ce chapitre, nous retiendrons que les défauts principaux de cette première paramétrisation SLyMR1_{3B} sont les suivants :

- une masse effective isoscalaire m_0^* encore trop faible comparée aux valeurs canoniques attendues ;
- une incompressibilité K_∞ un peu trop élevée qui risque de donner de mauvaises propriétés de fission et déformation lors de calculs CHF ;
- les propriétés de la matière de neutrons ne sont pas correctes puisque son équation d'état s'effondre au-delà deux fois la densité de saturation ;
- la description des corrélations d'appariement est certes meilleure que pour SLyMR0, mais il reste encore des progrès à faire ;
- les profils de densité de nucléons oscillent fortement au cœur de certains noyaux ;
- concernant les instabilités, et contrairement aux fonctionnelles standards, c'est maintenant dans le canal $S = T = 0$ qu'il est le plus difficile de contrôler les densités critiques.

En parallèle de la problématique sur l'ajustement des paramètres de SLyMR1_{3B}, nous avons généralisé la méthode MTF [114, 123] pour des forces de Skyrme prenant en compte des termes d'interaction : tenseur [16], à trois et quatre corps. L'intérêt de cette méthode semi-classique est qu'elle nous permet de déterminer analytiquement une estimation de l'énergie de surface d'une force de Skyrme.

La première partie du travail a été de tester la validité de cette formule en effectuant des calculs systématiques d'énergies de surface avec trois méthodes : HF, ETF4 et MTF et un large ensemble de paramétrisations de fonctionnelles. Nous avons ainsi montré que la différence entre l'estimation MTF et HF de l'énergie de surface est à peu près constante sur l'ensemble des forces utilisées.

Dans une deuxième partie, nous avons mis en évidence de très fortes corrélations entre la valeur de l'énergie de surface, l'énergie d'excitation de l'isomère déformé et la hauteur barrière de fission d'un actinide. Généralement, les fonctionnelles de Skyrme reproduisent assez mal les barrières de fission [54]. En guise de raffinement aux futures interactions de type SLyMR, il sera possible avec cette formule de poche MTF de contraindre, *a posteriori*, sans consommer de temps de calcul, l'énergie de surface de l'interaction de façon à ce qu'elle reproduise, de manière optimale, les barrières de fission. Le réajustement des paramètres de l'interaction se fera suivant quatre étapes :

- (a) SLyMR x sert d'interaction de départ ;
- (b) on effectue un calcul complet CHFB sur un actinide fissible (ex : ^{240}Pu) pour obtenir ses propriétés de fission/déformation ;
- (c) on confronte ces données théoriques aux données expérimentales ;
- (d) on réajuste alors l'énergie de surface afin d'avoir des barrières de fission plus réalistes ;
- (e) on recommence les étapes (b) à (d) jusqu'à la convergence, soit, quelques itérations.

Afin de remédier aux problèmes les plus évidents : faible masse effective, appariement relativement faible et proximité de densités critiques dans le canal $S = T = 0$; il semble nécessaire d'ajouter de nouveaux termes au potentiel d'interaction. Parmi les possibilités, nous avons :

- (a) un terme tenseur à deux corps, ce qui est simple à implémenter, pourra améliorer la spectroscopie, mais n'aura qu'un effet limité sur l'appariement et n'agira pas dans le canal $S = T = 0$;
- (b) des termes spin-orbites et tenseurs à trois corps ce qui permettra d'ajuster plus finement l'évolution du champ spin-orbite en fonction de l'isospin ;
- (c) des termes dérivatifs d'ordres supérieurs [61], par exemple, ceux contribuant dans l'onde D [60].

Constantes de couplage de la fonctionnelle de Skyrme

	u_0	u_1	$u_1 y_1$	u_2	$u_2 y_{21}$	$u_2 y_{22}$	v_0
$B_0^\rho =$	$+\frac{3}{16}$						
$B_1^\rho =$	$-\frac{3}{16}$						
$B_0^\tau =$	$+\frac{3}{32}$			$+\frac{15}{64}$	$+\frac{3}{16}$	$+\frac{3}{32}$	
$B_{10}^\tau =$	$-\frac{1}{32}$	$+\frac{1}{32}$		$-\frac{5}{64}$	$-\frac{1}{16}$	$-\frac{7}{32}$	
$B_1^\tau =$	$-\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{32}$		$+\frac{1}{32}$	$+\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{16}$	
$B_0^{\nabla\rho} =$	$+\frac{15}{128}$			$-\frac{15}{256}$	$-\frac{3}{64}$	$-\frac{3}{128}$	
$B_{10}^{\nabla\rho} =$	$-\frac{5}{64}$	$+\frac{1}{32}$		$+\frac{5}{128}$	$+\frac{1}{32}$	$+\frac{7}{64}$	
$B_1^{\nabla\rho} =$	$-\frac{5}{128}$	$-\frac{1}{32}$		$-\frac{7}{256}$	$-\frac{1}{32}$	$-\frac{5}{128}$	
$B_0^J =$	$+\frac{1}{32}$	$-\frac{1}{16}$		$-\frac{7}{64}$	$-\frac{1}{8}$	$+\frac{1}{32}$	
$B_{10}^J =$	$-\frac{1}{16}$	$+\frac{1}{16}$		$+\frac{1}{32}$		$+\frac{3}{16}$	
$B_1^J =$	$+\frac{1}{32}$			$-\frac{7}{64}$	$-\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{32}$	
$D_0^\rho =$							$+\frac{3}{64}$
$D_{10}^\rho =$							$-\frac{3}{32}$
$D_1^\rho =$							$+\frac{3}{64}$

TAB. 1.1 : Constantes de couplage de la partie normale de la fonctionnelle de Skyrme à trois et quatre corps EQS.(2.26b)-(2.26c).

	t_0	$t_0 x_0$	t_1	$t_1 x_1$	t_2	$t_2 x_2$	$t_3 \rho^\alpha(\mathbf{R})$	$t_3 x_3 \rho^\alpha(\mathbf{R})$	W_0
$A_0^\rho =$	$+\frac{3}{8}$								
$A_1^\rho =$	$-\frac{1}{8}$	$-\frac{1}{4}$							
$A_0^s =$	$-\frac{1}{8}$	$+\frac{1}{4}$							
$A_1^s =$	$-\frac{1}{8}$								
$A_0^\tau =$			$+\frac{3}{16}$		$+\frac{5}{16}$	$+\frac{1}{4}$			
$A_1^\tau =$			$-\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{8}$	$+\frac{1}{16}$	$+\frac{1}{8}$			
$A_0^{\nabla\rho} =$			$+\frac{9}{64}$		$-\frac{5}{64}$	$-\frac{1}{16}$			
$A_1^{\nabla\rho} =$			$-\frac{3}{64}$	$-\frac{3}{32}$	$-\frac{1}{64}$	$-\frac{1}{32}$			
$A_0^J =$			$+\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{8}$	$-\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{8}$			
$A_1^J =$			$+\frac{1}{16}$		$-\frac{1}{16}$				
$A^{\nabla J_0} =$									$-\frac{3}{4}$
$A^{\nabla J_1} =$									$-\frac{1}{4}$
$A^{\rho_0, \alpha} =$							$+\frac{3}{48}$		
$A^{\rho_1, \alpha} =$							$-\frac{1}{48}$	$-\frac{1}{24}$	
$A^{\tilde{\rho}} =$	$+\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$							
$A^{\tilde{\tau}} =$			$+\frac{1}{8}$	$-\frac{1}{8}$					
$A^{\nabla\tilde{\rho}} =$			$+\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{16}$					
$A^{\tilde{J}} =$					$+\frac{1}{4}$	$+\frac{1}{4}$			
$A^{\nabla\tilde{J}} =$									$-\frac{1}{2}$

TAB. 1.2 : Constantes de couplage de la fonctionnelle bilinéaire de Skyrme, EQS. (2.18)-(2.19) et (2.26a)-(2.27a), en fonction des paramètres du potentiel défini EQS. (2.1a)-(2.1e).

	u_0	u_1	$u_1 y_1$	u_2	$u_2 y_{21}$	$u_2 y_{22}$	v_0
$B_0^\rho =$	$+\frac{3}{16}$						
$B_1^\rho =$	$-\frac{3}{16}$						
$B_0^\tau =$		$+\frac{3}{32}$		$+\frac{15}{64}$	$+\frac{3}{16}$	$+\frac{3}{32}$	
$B_{10}^\tau =$		$-\frac{1}{32}$	$+\frac{1}{32}$	$-\frac{5}{64}$	$-\frac{1}{16}$	$-\frac{7}{32}$	
$B_1^\tau =$		$-\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{32}$	$+\frac{1}{32}$	$+\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{16}$	
$B_0^{\nabla\rho} =$		$+\frac{15}{128}$		$-\frac{15}{256}$	$-\frac{3}{64}$	$-\frac{3}{128}$	
$B_{10}^{\nabla\rho} =$		$-\frac{5}{64}$	$+\frac{1}{32}$	$+\frac{5}{128}$	$+\frac{1}{32}$	$+\frac{7}{64}$	
$B_1^{\nabla\rho} =$		$-\frac{5}{128}$	$-\frac{1}{32}$	$-\frac{7}{256}$	$-\frac{1}{32}$	$-\frac{5}{128}$	
$B_0^J =$		$+\frac{1}{32}$	$-\frac{1}{16}$	$-\frac{7}{64}$	$-\frac{1}{8}$	$+\frac{1}{32}$	
$B_{10}^J =$		$-\frac{1}{16}$	$+\frac{1}{16}$	$+\frac{1}{32}$		$+\frac{3}{16}$	
$B_1^J =$		$+\frac{1}{32}$		$-\frac{7}{64}$	$-\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{32}$	
$D_0^\rho =$							$+\frac{3}{64}$
$D_{10}^\rho =$							$-\frac{3}{32}$
$D_1^\rho =$							$+\frac{3}{64}$

TAB. 1.3 : Même contenu que le Tab. 1.2 pour la partie normale de la fonctionnelle à trois et quatre corps EQS.(2.26b)-(2.26c).

	u_0	u_1	$u_1 y_1$	u_2	$u_2 y_{21}$	$u_2 y_{22}$	v_0
$B^{\tilde{\rho}_1 \tilde{\rho}_1 \rho_2} =$	$+\frac{3}{4}$						
$B^{\tilde{\tau}_1 \tilde{\rho}_1 \rho_2} =$		$+\frac{3}{16}$	$-\frac{3}{32}$				
$B^{\tau_1 \tilde{\rho}_1 \tilde{\rho}_1} =$				$+\frac{3}{16}$	$+\frac{3}{16}$	$-\frac{3}{16}$	
$B^{\tau_2 \tilde{\rho}_1 \tilde{\rho}_1} =$		$+\frac{1}{8}$	$+\frac{1}{16}$	$+\frac{1}{8}$	$+\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{16}$	
$B^{\nabla \tilde{\rho}_1 \nabla \tilde{\rho}_1 \rho_1} =$				$+\frac{3}{64}$	$+\frac{3}{64}$	$-\frac{3}{64}$	
$B^{\nabla \tilde{\rho}_1 \nabla \tilde{\rho}_1 \rho_2} =$		$+\frac{1}{8}$	$-\frac{1}{32}$	$+\frac{1}{32}$	$+\frac{1}{64}$	$-\frac{1}{64}$	
$B^{\nabla \tilde{\rho}_1 \nabla \rho_1 \tilde{\rho}_1} =$				$-\frac{3}{64}$	$-\frac{3}{64}$	$+\frac{3}{64}$	
$B^{\nabla \tilde{\rho}_1 \nabla \rho_2 \tilde{\rho}_1} =$		$+\frac{5}{32}$	$+\frac{1}{32}$	$-\frac{1}{32}$	$-\frac{1}{64}$	$+\frac{1}{64}$	
$B^{\nabla \tilde{\rho}_1 \nabla \rho_1 \tilde{\rho}_1} =$				$-\frac{3}{64}$	$-\frac{3}{64}$	$+\frac{3}{64}$	
$B^{\tilde{J}_1 \tilde{J}_1 \rho_1} =$				$+\frac{3}{16}$	$+\frac{3}{16}$	$-\frac{3}{16}$	
$B^{\tilde{J}_1 \tilde{J}_1 \rho_2} =$				$+\frac{3}{8}$	$+\frac{5}{16}$	$+\frac{7}{16}$	
$B^{\tilde{J}_1 J_1 \tilde{\rho}_1} =$				$-\frac{3}{16}$	$-\frac{3}{16}$	$+\frac{3}{16}$	
$B^{\tilde{J}_1 J_2 \tilde{\rho}_1} =$			$-\frac{1}{16}$		$-\frac{1}{16}$	$+\frac{1}{16}$	
$D^{\tilde{\rho}_1 \tilde{\rho}_1 \rho_2 \rho_2} =$							$+\frac{3}{4}$
$D^{\tilde{\rho}_1 \tilde{\rho}_1 \tilde{\rho}_2 \tilde{\rho}_2} =$							$+\frac{3}{8}$

TAB. 1.4 : Même contenu que le Tab. 1.2 pour la partie anormale de la fonctionnelle à trois et quatre corps EQS.(2.27b)-(2.27c).

Densité de spin-orbite $J_{\mu\nu}(\vec{r})$ dans la matière nucléaire semi-infinie

Les composantes du tenseur $J_{\mu\nu}$ peuvent être calculées suivant la définition 2.9 :

$$J_{q\mu\nu} = -\frac{i}{2} [\nabla_\mu - \nabla'_\mu] \sum_{\lambda k} \psi_\lambda^*(z', k_z, k_t, q) e^{-i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}'} \langle \chi_\lambda(\mathbf{k}_t) | \sigma_\nu | \chi_\lambda(\mathbf{k}_t) \rangle \psi_\lambda(z, k_z, k_t, q) e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}} \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \quad (2.1)$$

Le calcul nécessite de passer par les étapes intermédiaires suivantes :

$$\begin{aligned} \langle \chi_\lambda(\mathbf{k}_t) | \sigma_x | \chi_\lambda(\mathbf{k}_t) \rangle &= -\lambda \sin \phi_k, \\ \langle \chi_\lambda(\mathbf{k}_t) | \sigma_y | \chi_\lambda(\mathbf{k}_t) \rangle &= \lambda \cos \phi_k, \\ \langle \chi_\lambda(\mathbf{k}_t) | \sigma_z | \chi_\lambda(\mathbf{k}_t) \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2.2)$$

D'après ces résultats, nous voyons clairement que :

$$J_{xz} = J_{yz} = J_{zz} = 0 \quad (2.3)$$

Dans le modèle unidimensionnel que l'on utilise pour la matière semi-infinie on a une invariance par translation dans le plan (x, y) , ce qui implique alors :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}}}{\partial x} &= ik_t \cos \phi_k e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}}, \\
 \frac{\partial e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}}}{\partial y} &= ik_t \sin \phi_k e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}}, \\
 \frac{\partial e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}}}{\partial z} &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Les intégrales angulaires sur ϕ_k contiennent $\sin \phi_k$, $\cos \phi_k$ ou $\sin \phi_k \cos \phi_k$, on aura alors trivialement :

$$J_{zx} = J_{zy} = J_{xx} = J_{yy} = 0 \tag{2.5}$$

Les seules composantes contenant une intégrale non nulle sur ϕ_k sont J_{xy} and J_{yx} . L'invariance par translation impose la dépendance z et ses composantes s'écrivent :

$$J_{xy}(z) = -J_{yx} = \frac{3}{8} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{1/3} \rho_0^{4/3} \sum_{\lambda=\pm 1} \lambda \int_0^{L_q} dl \int_0^{\sqrt{L_q^2 - l^2}} dt |\psi_\lambda(z, lk_F, tk_F, q)|^2 \tag{2.6}$$

On peut décomposer ce tenseur d'ordre 2 en trois contributions : un pseudo-scalaire, un vecteur et un pseudo-tenseur symétrique de trace nulle :

$$J_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{3} \delta_{\mu\nu} J^{(0)}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\kappa=x}^z \epsilon_{\mu\nu\kappa} J_\kappa^{(1)}(\vec{r}) + J_{\mu\nu}^{(2)}(\vec{r}), \tag{2.7}$$

où $\delta_{\mu\nu}$ est le symbol de Kronecker et $\epsilon_{\mu\nu\kappa}$ le tenseur de Levi-Civita.

Seule la contribution du vecteur est non-nulle d'après ce que l'on a vu en (C.5), on aura alors finalement :

$$\begin{aligned}
 J^{(0)}(\mathbf{r}) &= 0, \\
 J_{\mu\nu}^{(2)}(\mathbf{r}) &= 0, \\
 J_z^{(1)}(\mathbf{r}) &= [J_{xy}(z) - J_{yx}(z)] = 2 J_{xy}(z).
 \end{aligned}$$

Propriétés des interactions SLy5sX

Le protocole d'ajustement de la série de forces Sly5sX est le même que celui de la force SLy5 [14, 15] avec une contrainte supplémentaire sur l'énergie de surface de l'interaction, calculée à l'aide de la formule de poche donnée EQ. (5.46). La paramétrisation SLy5 constitue le point de départ des ajustement. On réajuste cette forces pour des valeurs d'énergie de surface MTF a_s^{MTF} allant de 18,0 à 19,4 MeV. Les huit paramétrisations ainsi que leurs principales propriétés sont données dans cette annexe.

Fonction de mérite

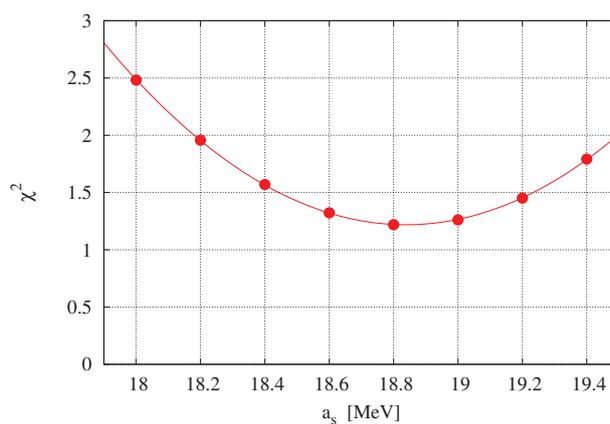


FIG. 3.1 : fonction de mérite des interactions SLy5sx en fonction du coefficient d'énergie de surface a_s^{MTF} .

Paramétrisations

	t_0	t_1	t_2	t_3	x_0	x_1	x_2	x_3	W
SLy5s1	-2558.057	419.917	-476.597	14629.881	0.529674	-0.081714	-0.973427	0.784514	115.480
SLy5s2	-2548.750	426.515	-488.720	14527.587	0.549185	-0.084917	-0.977337	0.818566	114.282
SLy5s3	-2539.426	432.713	-498.927	14425.920	0.567723	-0.089298	-0.980362	0.851218	112.863
SLy5s4	-2530.966	438.428	-507.607	14334.363	0.583984	-0.092942	-0.982117	0.879542	111.339
SLy5s5	-2523.384	443.718	-515.145	14252.967	0.598108	-0.095506	-0.982824	0.903677	109.744
SLy5s6	-2516.593	448.643	-521.790	14180.723	0.610335	-0.096977	-0.982676	0.924029	108.101
SLy5s7	-2510.521	453.250	-527.698	14116.773	0.620866	-0.097416	-0.981807	0.940945	106.423
SLy5s8	-2505.070	457.581	-532.993	14060.030	0.629905	-0.096939	-0.980339	0.954818	104.724

Propriétés de la matière (semi-)infinie

	a_s	ρ_{sat}	E/A	K_{∞}	m^*/m	S	L	κ_v
SLy5s1	18.00	0.1598	-15.7724	222.1252	0.7392	31.4275	48.1281	0.3047
SLy5s2	18.20	0.1603	-15.8182	223.2324	0.7350	31.6007	48.2457	0.3063
SLy5s3	18.40	0.1607	-15.8641	224.3376	0.7309	31.7685	48.3607	0.3082
SLy5s4	18.60	0.1612	-15.9106	225.3911	0.7273	31.9379	48.4847	0.3105
SLy5s5	18.80	0.1618	-15.9576	226.3926	0.7243	32.1101	48.6163	0.3131
SLy5s6	19.00	0.1623	-16.0050	227.3473	0.7217	32.2853	48.7537	0.3160
SLy5s7	19.20	0.1629	-16.0528	228.2596	0.7196	32.4633	48.8948	0.3191
SLy5s8	19.40	0.1634	-16.1009	229.1347	0.7178	32.6438	49.0382	0.3225

Paramètres de Landau

	F_0	F'_0	G_0	G'_0	F_1	F'_1	G_1	G'_1
SLy5s1	-0.257	0.893	1.007	-0.041	-0.782	-0.107	0.040	0.958
SLy5s2	-0.259	0.889	1.027	-0.060	-0.795	-0.120	0.034	0.975
SLy5s3	-0.261	0.885	1.042	-0.076	-0.807	-0.132	0.033	0.990
SLy5s4	-0.262	0.881	1.052	-0.091	-0.818	-0.141	0.032	1.003
SLy5s5	-0.264	0.880	1.057	-0.105	-0.827	-0.147	0.033	1.016
SLy5s6	-0.265	0.879	1.059	-0.117	-0.835	-0.151	0.034	1.028
SLy5s7	-0.266	0.880	1.057	-0.130	-0.841	-0.152	0.035	1.040
SLy5s8	-0.266	0.881	1.053	-0.142	-0.846	-0.152	0.036	1.051

Noyaux

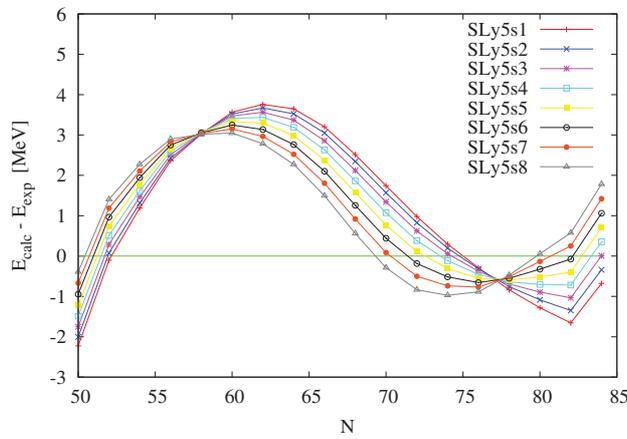
Énergies de liaison

	^{40}Ca	^{48}Ca	^{56}Ni	^{78}Ni	^{100}Sn	^{132}Sn	^{208}Pb
SLy5s1	-347.137	-419.320	-484.960	-648.253	-827.020	-1104.506	-1629.678
SLy5s2	-346.961	-418.682	-484.194	-647.279	-826.799	-1104.198	-1630.694
SLy5s3	-346.851	-418.074	-483.396	-646.286	-826.548	-1103.886	-1631.726
SLy5s4	-346.759	-417.476	-482.586	-645.282	-826.285	-1103.569	-1632.769
SLy5s5	-346.673	-416.884	-481.769	-644.271	-826.014	-1103.249	-1633.821
SLy5s6	-346.588	-416.295	-480.949	-643.256	-825.740	-1102.926	-1634.878
SLy5s7	-346.501	-415.708	-480.129	-642.239	-825.463	-1102.602	-1635.939
SLy5s8	-346.410	-415.123	-479.309	-641.222	-825.185	-1102.276	-1637.003
Exp.	-342.034	-415.982	-483.953	-641.742	-825.130	-1102.673	-1635.861

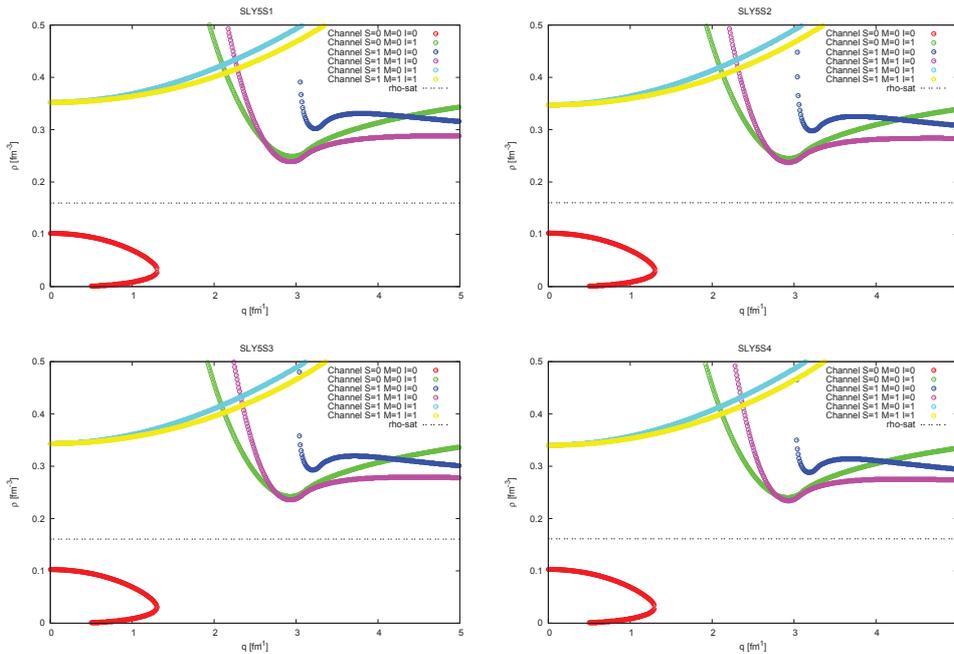
Rayons de protons

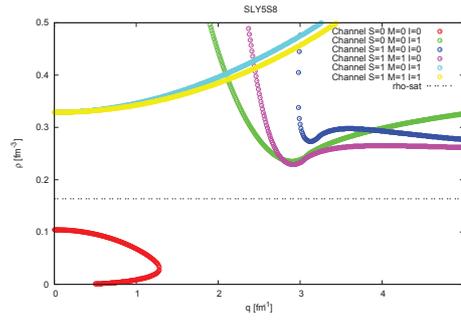
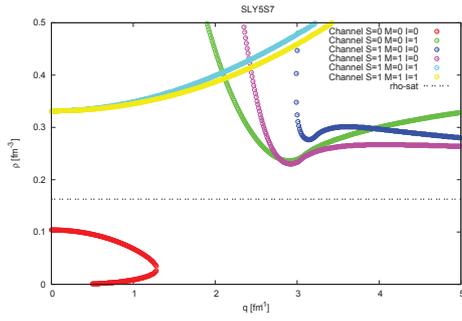
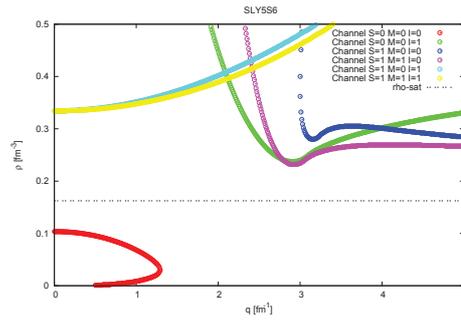
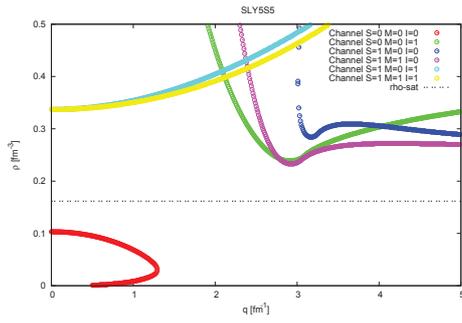
	⁴⁰ Ca	⁴⁸ Ca	⁵⁶ Ni	¹³² Sn	²⁰⁸ Pb
SLy5s1	3.4018	3.4382	3.6869	4.6564	5.4477
SLy5s2	3.4017	3.4385	3.6880	4.6546	5.4446
SLy5s3	3.4013	3.4386	3.6890	4.6527	5.4414
SLy5s4	3.4007	3.4386	3.6899	4.6508	5.4381
SLy5s5	3.4001	3.4386	3.6908	4.6488	5.4347
SLy5s6	3.3995	3.4385	3.6916	4.6467	5.4312
SLy5s7	3.3989	3.4384	3.6925	4.6445	5.4276
SLy5s8	3.3982	3.4382	3.6933	4.6423	5.4239
Exp.	3.3828	3.3907	3.6619	4.6475	5.4501

Isotopes de l'étain



Stabilité





Bibliographie

- [1] Rutherford, E. *Philosophical Magazine* **21**(6), 669–688 (1911).
- [2] Chadwick, J. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* **136**(830), 692–708 (1932).
- [3] Weizsacker, C. *Zeitschrift fur Physik* **96**(7-8), 431–458 (1935).
- [4] Mayer, M. G. *Phys. Rev.* **74**, 235–239 (1948).
- [5] Skyrme, T. H. R. *Nuclear Physics* **9**(4), 615–634 (1958-1959).
- [6] Dechargé, J. and Gogny, D. *Phys. Rev. C* **21**, 1568–1593 (1980).
- [7] Walecka, J. *Annals of Physics* **83**(2), 491–529 (1974).
- [8] Todd-Rutel, B. G. and Piekarewicz, J. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 122501 (2005).
- [9] Bender, M., Heenen, P. H., and Reinhard, P. G. *Reviews of Modern Physics* **75**(1), 121 (2003).
- [10] Bogolyubov, N. N. *J. Phys. (USSR)* **11**, 23–32 (1947).
- [11] Meyer, J. EDP Sciences (2003).
- [12] Vautherin, D. and Brink, D. M. *Phys. Rev. C* **5**(3), 626–647 (1972).
- [13] Beiner, M., Flocard, H., Van Giai, N., and Quentin, P. *Nuclear Physics A* **238**(1), 29–69 (1975).
- [14] Chabanat, E., Bonche, P., Haensel, P., Meyer, J., and Schaeffer, R. *Nuclear Physics A* **627**(4), 710–746 (1997).
- [15] Chabanat, E., Bonche, P., Haensel, P., Meyer, J., and Schaeffer, R. *Nuclear Physics A* **635**(1-2), 231–256 (1998).
- [16] Lesinski, T., Bender, M., Bennaceur, K., Duguet, T., and Meyer, J. *Phys. Rev. C* **76**(1), 014312 (2007).
- [17] Kortelainen, M., Lesinski, T., Moré, J., Nazarewicz, W., Sarich, J., Schunck, N., Stoitsov, M. V., and Wild, S. *Phys. Rev. C* **82**(2), 024313 (2010).
- [18] Kortelainen, M., McDonnell, J., Nazarewicz, W., Reinhard, P. G., Sarich, J., Schunck, N., Stoitsov, M. V., and Wild, S. *Phys. Rev. C* **85**(2), 024304 (2012).
- [19] Anguiano, M., Egido, J., and Robledo, L. *Nuclear Physics A* **696**(3-4), 467–493 (2001).

- [20] Dobaczewski, J., Stoitsov, M., Nazarewicz, W., and Reinhard, P. G. *Physical Review C* **76**(5), 054315 (2007).
- [21] Bender, M., Duguet, T., and Lacroix, D. *Physical Review C* **79**(4), 044319 (2009).
- [22] Lacroix, D., Duguet, T., and Bender, M. *Physical Review C* **79**(4), 044318 (2009).
- [23] Sadoudi, J. *Constraints on the nuclear energy density functional and new possible analytical forms*. PhD thesis, CEA Saclay, (2011).
- [24] Sadoudi, J., Bender, M., Bennaceur, K., Davesne, D., Jodon, R., et al. *Phys. Scripta* **T154**, 014013 (2013).
- [25] Davesne, D., Martini, M., Bennaceur, K., and Meyer, J. *Phys. Rev. C* **80**(2), 024314 (2009).
- [26] Pastore, A., Davesne, D., Lallouet, Y., Martini, M., Bennaceur, K., and Meyer, J. *Phys. Rev. C* **85**, 054317 (2012).
- [27] Pastore, A., Martini, M., Buridon, V., Davesne, D., Bennaceur, K., and Meyer, J. *Phys. Rev. C* **86**, 044308 (2012).
- [28] Pastore, A., Bennaceur, K., Davesne, D., and Meyer, J. *International Journal of Modern Physics E* **21**(05) (2012).
- [29] Hellemans, V., Pastore, A., Duguet, T., Bennaceur, K., Davesne, D., Meyer, J., Bender, M., and Heenen, P.-H. *Phys. Rev. C* **88**, 064323 (2013).
- [30] Lesinski, T., Bennaceur, K., Duguet, T., and Meyer, J. *Phys. Rev. C* **74**(4), 044315 (2006).
- [31] Fattoyev, F. J. and Piekarewicz, J. *Phys. Rev. C* **84**(6), 064302 (2011).
- [32] Hill, D. L. and Wheeler, J. A. *Phys. Rev.* **89**, 1102–1145 (1953).
- [33] Griffin, J. J. and Wheeler, J. A. *Phys. Rev.* **108**, 311–327 (1957).
- [34] Ring, P. and Schuck, P. Springer (2000).
- [35] Bohm, D. and Pines, D. *Phys. Rev.* **82**, 625–634 (1951).
- [36] Pines, D. and Bohm, D. *Phys. Rev.* **85**, 338–353 (1952).
- [37] Bohm, D. and Pines, D. *Phys. Rev.* **82**, 625–634 (1951).
- [38] Bohr, N. and Wheeler, J. A. *Phys. Rev.* **56**, 426–450 (1939).
- [39] Royer, G. and Rousseau, R. *The European Physical Journal A* **42**(3), 541–545 (2009).
- [40] Royer, G., Guilbaud, M., and Onillon, A. *Nuclear Physics A* **847**(1-2), 24–41 (2010).
- [41] Royer, G. and Rousseau, R. In *European physical Journal A*, volume 42, 541–545 (, Ryn, Pologne, 2009). ENAM 08.
- [42] Stoks, V. G. J., Klomp, R. A. M., Terheggen, C. P. F., and de Swart, J. J. *Phys. Rev. C* **49**, 2950–2962 (1994).
- [43] Wiringa, R. B., Stoks, V. G. J., and Schiavilla, R. *Phys. Rev. C* **51**, 38–51 (1995).
- [44] Machleidt, R., Sammarruca, F., and Song, Y. *Phys. Rev. C* **53**, R1483–R1487 (1996).
- [45] Epelbaum, E., Krebs, H., Lähde, T. A., Lee, D., Meißner, U.-G., and Rupak, G. *Phys. Rev. Lett.* **112**, 102501 (2014).
- [46] Pudliner, B. S., Pandharipande, V. R., Carlson, J., Pieper, S. C., and Wiringa, R. B. *Phys. Rev. C* **56**, 1720–1750 (1997).
- [47] Lawson, R. D. *Theory of the nuclear shell model*. Oxford Studies in Nuclear Physics Series. Clarendon Press, (1980).

-
- [48] Caurier, E., Martinez-Pinedo, G., Nowacki, F., Poves, A., and Zuker, A. *P. Rev. Mod. Phys.* **77**, 427–488 (2005).
- [49] Griffin, J. J. *Phys. Rev.* **132**, 2204–2211 (1963).
- [50] Bardeen, J., Cooper, L. N., and Schrieffer, J. R. *Phys. Rev.* **108**(5), 1175–1204 (1957).
- [51] Bender, M., Duguet, T., and Lacroix, D. *Phys. Rev. C* **79**, 044319 (2009).
- [52] Sheikh, J. A. and Ring, P. *Nuclear Physics A* **665**(1-2), 71–91 (2000).
- [53] Dobaczewski, J., Flocard, H., and Treiner, J. *Nuclear Physics A* **422**(1), 103–139 (1984).
- [54] Bartel, J., Quentin, P., Brack, M., Guet, C., and Håkansson, H. B. *Nuclear Physics A* **386**(1), 79–100 (1982).
- [55] Meyer, J., Bonche, P., Weiss, M., Dobaczewski, J., Flocard, H., and Heenen, P.-H. *Nuclear Physics A* **588**(3), 597–622 (1995).
- [56] Terasaki, J., Flocard, H., Heenen, P.-H., and Bonche, P. *Nuclear Physics A* **621**(3), 706–718 (1997).
- [57] Sadoudi, J., Duguet, T., Meyer, J., and Bender, M. *Phys. Rev. C* **88**, 064326 (2013).
- [58] Lesinski, T. *Microscopic and Beyond-Mean-Field Constraints for a New Generation of Nuclear Energy Density Functionals*. PhD thesis, UCB Lyon, (2008).
- [59] Tondeur, F., Goriely, S., Pearson, J. M., and Onsi, M. *Phys. Rev. C* **62**, 024308 (2000).
- [60] Becker, P., Davesne, D., Meyer, J., Pastore, A., and Navarro, J. *arXiv*, nucl-th/1406.0340.
- [61] Raimondi, F., Carlsson, B. G., and Dobaczewski, J. *Phys. Rev. C* **83**, 054311 (2011).
- [62] Klüpfel, P., Reinhard, P. G., Bürvenich, T., and Maruhn, J. A. *Phys. Rev. C* **79**(3), 034310 (2009).
- [63] Rohoziński, S. G., Dobaczewski, J., and Nazarewicz, W. *Phys. Rev. C* **81**(1), 014313 (2010).
- [64] Bennaceur, K. and Jodon, R. *Non publie* (2013).
- [65] Perlińska, E., Rohoziński, S. G., Dobaczewski, J., and Nazarewicz, W. *Phys. Rev. C* **69**, 014316 (2004).
- [66] Horowitz, C. J. and PREX Collaboration. *Physical Review Letters* **108**(11), 112502 (2012).
- [67] Davesne, D., Pastore, A., and Navarro, J. *arXiv*, nucl-th/1402.4284v1.
- [68] Dobaczewski, J., Nazarewicz, W., and Stoitsov, M. In *The Nuclear Many-Body Problem 2001*, Nazarewicz, W. and Vretenar, D., editors, volume 53 of *NATO Science Series*, 181–188. Springer Netherlands (2002).
- [69] Lesinski, T., Duguet, T., Bennaceur, K., and Meyer, J. *Eur.Phys.J.* **A40**, 121 (2009).
- [70] Duguet, T., Bender, M., Bennaceur, K., Lacroix, D., and Lesinski, T. *Physical Review C* **79**(4), 044320 (2009).
- [71] Nikolov, N., Schunck, N., Nazarewicz, W., Bender, M., and Pei, J. *Phys. Rev. C* **83**(3), 034305 (2011).
- [72] Dobaczewski, J., Nazarewicz, W., and Reinhard, P.-G. *J.Phys.* **G41**, 074001 (2014).
- [73] Nelder, J. A. and Mead, R. *The Computer Journal* **7**(4), 308–313 (1965).
- [74] Bertsekas, D. P. *Nonlinear Programming*. Athena Scientific, (1995).

- [75] Ravenhall, D. G., Herman, R., and Clark, B. C. *Phys. Rev.* **136**, B589–B596 (1964).
- [76] Ford, K. W. and Wills, J. G. *Phys. Rev.* **185**, 1429–1438 (1969).
- [77] Faessler, A., Galonska, J., and Goeke, K. *Zeitschrift fur Physik* **250**(5), 436–445 (1972).
- [78] Friar, J. L. and Negele, J. W. *Comments Nucl.Part.Phys.* **5**, 181–188 (1972).
- [79] Friar, J. and Negele, J. *Nuclear Physics A* **212**(1), 93–137 (1973).
- [80] Wang, C. S., Chung, K. C., and Santiago, A. J. *Phys. Rev. C* **60**, 034310 (1999).
- [81] Buchinger, F., Crawford, J. E., Dutta, A. K., Pearson, J. M., and Tondeur, F. *Phys. Rev. C* **49**, 1402–1411 (1994).
- [82] Nayak, R., Uma Maheswari, V. S., and Satpathy, L. *Phys. Rev. C* **52**, 711–717 (1995).
- [83] Blaizot, J. *Physics Reports* **64**(4), 171–248 (1980).
- [84] Bohigas, O., Lane, A., and Martorell, J. *Physics Reports* **51**(5), 267–316 (1979).
- [85] Gleissl, P., Brack, M., Meyer, J., and Quentin, P. *Annals of Physics* **197**(2), 205–264 (1990).
- [86] Moller, P., Myers, W., Swiatecki, W., and Treiner, J. *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **39**(2), 225–233 (1988).
- [87] Moller, P., Nix, J., Myers, W., and Swiatecki, W. *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **59**(2), 185–381 (1995).
- [88] Möller, P., Myers, W. D., Sagawa, H., and Yoshida, S. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 052501 (2012).
- [89] Lynch, W. et al. *Progress in Particle and Nuclear Physics* **62**(2), 427–432 (2009). Heavy-Ion Collisions from the Coulomb Barrier to the Quark-Gluon Plasma 30th Course International Workshop on Nuclear Physics.
- [90] Pearson, J. and Nayak, R. *Nuclear Physics A* **668**(1-4), 163–171 (2000).
- [91] Centelles, M., Roca-Maza, X., Viñas, X., and Warda, M. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 122502 (2009).
- [92] Warda, M., Viñas, X., Roca-Maza, X., and Centelles, M. *Phys. Rev. C* **80**, 024316 (2009).
- [93] Tsang, M. B. et al. *Phys. Rev. C* **86**, 015803 (2012).
- [94] Chen, L.-W., Ko, C. M., Li, B.-A., and Xu, J. *Phys. Rev. C* **82**, 024321 (2010).
- [95] Vidaña, I. *Phys. Rev. C* **85**, 045808 (2012).
- [96] Sotani, H., Nakazato, K., Iida, K., and Oyamatsu, K. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 201101 (2012).
- [97] Prakash, M., Ainsworth, T. L., and Lattimer, J. M. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2518–2521 (1988).
- [98] Lattimer, J. M. *Annual Review of Nuclear and Particle Science* **62**(1), 485–515 (2012).
- [99] Wiringa, R. B., Fiks, V., and Fabrocini, A. *Phys. Rev. C* **38**, 1010–1037 (1988).
- [100] Kortelainen, M. and Lesinski, T. *J.Phys.* **G37**, 064039 (2010).
- [101] Cao, L. G., Lombardo, U., Shen, C. W., and Giai, N. V. *Phys. Rev. C* **73**, 014313 (2006).
- [102] Hinke, C. et al. *NATURE* **486**(7403), 341 – 345 (2012).
- [103] Audi, G., Wang, M., Wapstra, A. H., and Kondev, F. G. *Chinese Physics C* **36**, 1287–1602 (2012).

-
- [104] Wang, M., Audi, G., Wapstra, A. H., and Kondev, F. G. *Chinese Physics C* **36**, 1603–2014 (2012).
- [105] Angeli, I. and Marinova, K. P. *Atomic data and nuclear data tables* (2012).
- [106] Ericson, T. E. O. and Weise, W. *Pions and nuclei*. Oxford Science Publications. Clarendon Press, (1988).
- [107] Duguet, T., Bonche, P., Heenen, P. H., and Meyer, J. *Phys. Rev. C* **65**(1), 014311 (2001).
- [108] Clemenger, K. *Phys. Rev. B* **32**, 1359–1362 (1985).
- [109] Bender, M., Rutz, K., Reinhard, P., and Maruhn, J. *Eur.Phys.J.* **A8**, 59–75 (2000).
- [110] Swiatecki, W. J. *Proceedings of the Physical Society. Section A* **64**(3), 226 (1951).
- [111] Reinhard, P.-G., Bender, M., Nazarewicz, W., and Vertse, T. *Phys. Rev. C* **73**, 014309 (2006).
- [112] Cote, J. and Pearson, J. M. *Nuclear Physics A* **304**(1), 104–126 (1978).
- [113] Lee, J. and Danielewicz, P. *Nuclear Physics A* **818**(1-2), 36–96 (2009).
- [114] Brack, M., Guet, C., and Hakansson, H.-B. *Physics Reports* **123**(5), 275–364 (1985).
- [115] Myers, W. D., Swiatecki, W. J., and Wang, C. S. *Nuclear Physics A* **436**(1), 185–204 (1985).
- [116] Farine, M., Côté, J., and Pearson, J. M. *Nuclear Physics A* **338**(1), 86–96 (1980).
- [117] Wilets, L. *Rev. Mod. Phys.* **30**, 542–549 (1958).
- [118] Ayachi, A. et al. *Zeitschrift für Physik A Atomic Nuclei* **327**(2), 141–148 (1987).
- [119] Bennaceur, K. and Jodon, R. *Non publie* (2013).
- [120] Kirkwood, J. G. *Phys. Rev.* **44**(1), 31–37 (1933).
- [121] Uhlenbeck, G. E. and Beth, E. *Physica* **3**, 729–745 (1936).
- [122] Grammaticos, B. and Voros, A. *Annals of Physics* **123**(2), 359–380 (1979).
- [123] Treiner, J. and Krivine, H. *Annals of Physics* **170**, 406–453 (1986).
- [124] Bartel, J., Bencheikh, K., and Meyer, J. *Phys. Rev. C* **77**(2), 024311 (2008).
- [125] Bartel, J., Brack, M., and Durand, M. *Nuclear Physics A* **445**(2), 263–303 (1985).
- [126] Soubbotin, V. B. and Vinas, X. *Nuclear Physics A* **665**(3-4), 291–317 (2000).
- [127] Centelles, M. and Vinas, X. *Nuclear Physics A* **563**(2), 173–204 (1993).
- [128] Centelles, M., Del Estal, M., and Viñas, X. *Nuclear Physics A* **635**(1), 193–230 (1998).
- [129] Krivine, H. and Treiner, J. *Physics Letters B* **88**(3), 212–215 (1979).
- [130] Agrawal, B. K., Shlomo, S., and Au, V. *Phys. Rev. C* **72**(1), 014310 (2005).
- [131] Margueron, J., Navarro, J., and Van Giai, N. *Phys. Rev. C* **66**(1), 014303 (2002).
- [132] Bonche, P., M. J. and Bennaceur, K. *Non publie* (2013).
- [133] Beiner, M., Flocard, H., Nguyen Van Giai, and Quentin, P. *Nucl. Phys.* **A238**, 29–69 (1975).
- [134] Köhler, H. S. *Nucl. Phys. A* **162**, 385 (1971).
- [135] Krivine, H., Treiner, J., and Bohigas, O. *Nucl. Phys. A* **366**, 155 (1980).
- [136] Bartel, J., Quentin, P., Brack, M., Guet, C., and Håkansson, H.-B. *Nucl. Phys. A* **386**, 79–100 (1982).

- [137] Tondeur, F., Brack, M., Farine, M., and Pearson, J. M. *Nucl. Phys.* **A420**, 297–319 (1984).
- [138] Chabanat, E., Bonche, P., Haensel, P., Meyer, J., and Schaeffer, R. *Nucl. Phys.* **A635**, 231–256 (1998). Erratum *Nucl. Phys.* **A643**, 441 (1998).
- [139] Chabanat, E., Bonche, P., Haensel, P., Meyer, J., and Schaeffer, R. *Nucl. Phys.* **A643**, 441 (1998).
- [140] Samyn, M., Goriely, S., and Pearson, J. *Phys. Rev. C* **72**(4), 044316 (2005).
- [141] Goriely, S., Samyn, M., and Pearson, J. M. *Nucl. Phys.* **A773**, 279 (2006).
- [142] Lesinski, T., Bennaceur, K., Duguet, T., and Meyer, J. *Phys. Rev. C* **74**(4), 044315 (2006).
- [143] Cao, L., Lombardo, U., Shen, C., and Giai, N. V. *Phys. Rev. C* **73**, 014313 (2006).
- [144] Roca-Maza, X., Colò, G., and Sagawa, H. *Phys. Rev. C* **86**, 031306(R) (2012).
- [145] Washiyama, K., Bennaceur, K., Bender, M., Heenen, P.-H., and Hellemans, V. *Phys. Rev. C* **86**, 054309 (2012).
- [146] Kortelainen, M., Lesinski, T., Moré, J., Nazarewicz, W., Sarich, J., Schunck, N., Stoitsov, M., and Wild, S. *Phys. Rev. C* **82**, 024313 (2010).
- [147] Pastore, A., Davesne, D., Bennaceur, K., Meyer, J., and Hellemans, V. *Phys. Scr.* **T154**, 014014 (2013).
- [148] Bender, M., Bennaceur, K., Duguet, T., Heenen, P. H., Lesinski, T., and Meyer, J. *Phys. Rev. C* **80**(6), 064302 (2009).
- [149] Sadoudi, J., Bennaceur, K., Duguet, T., Jodon, R., and Meyer, J. *Talk at the XIX Nuclear Physics Workshop Marie & Pierre Curie, Kazimierz Dolny, Poland* (2012).
- [150] Sadoudi, J., Bender, M., Bennaceur, K., Davesne, D., Jodon, R., and Duguet, T. *Phys. Scr.* **T154**, 014013 (2013).
- [151] Bjørnholm, S. and Lynn, J. E. *Rev. Mod. Phys.* **52**, 725–931 (1980).
- [152] Gómez, J., Prieto, C., and Navarro, J. *Nuclear Physics A* **549**(1), 125–142 (1992).
- [153] Roca-Maza, X., Paar, N., and Colò, G. *arXiv*, nucl-th/1406.1885.
- [154] Wiringa, R. B., Fiks, V., and Fabrocini, A. *Phys. Rev. C* **38**, 1010–1037 (1988).
- [155] Bally, B., Avez, B., Bender, M., and Heenen, P. H. *arXiv*, nucl-th/1406.5984 (2014).
- [156] Schunck, N. et al. *arXiv*, nucl-th/1406.4383.
- [157] Bogner, S. et al. *Comput. Phys. Commun.* **184**, 2235–2250 (2013).

NOM : JODON		DATE de SOUTENANCE		
Prénoms : Robin		26 septembre 2014		
TITRE : Ajustements de fonctionnelles de Skyrme généralisées				
Numéro d'ordre : 170-2014				
DIPLOME DE DOCT.	DOCTEUR- INGENIEUR	DOCTORAT D'ETAT	DOCTORAT DE 3e CYCLE	Spécialité :
X	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
<p>RESUME : La méthode de la fonctionnelle de la densité d'énergie (Energy Density Functional, EDF) est une approche phénoménologique permettant de calculer les propriétés élémentaires des noyaux atomiques (masses, dimensions et formes) à l'approximation du champ moyen. Elle permet également d'obtenir les spectres correspondant à certains états collectifs (vibrationnels et rotationnels) en mettant en œuvre des calculs « au-delà » du champ moyen (avec la méthode de la coordonnées génératrice (GCM) ou le mécanisme de brisure/restauration de symétries). Cette méthode, applicable sur toute la charte des noyaux hormis les plus légers, connaît un regain d'intérêt avec le développement de nouveaux faisceaux radioactifs tels SPIRAL2 au GANIL. Des travaux récents ont montré qu'une description des états collectifs des noyaux nécessitait la modification et la généralisation des formes habituellement utilisées pour la fonctionnelle de la densité d'énergie, notamment avec la suppression de termes dépendants de la densité. Il a également été montré que les fonctionnelles de Skyrme pouvaient conduire à des instabilités et transitions de phases non physiques dans la matière nucléaire et les noyaux, en particulier lorsque le système est autorisé à briser des symétries.</p> <p>Le but de ce travail de thèse a été d'achever la construction de la fonctionnelle de Skyrme généralisée, initiée par J. Sadoudi (<i>Constraints on the nuclear energy density functional and new possible analytical forms.</i>, CEA Saclay, 2011), puis d'en ajuster les paramètres. Le terme dépendant de la densité est remplacé par un potentiel d'interaction à 3 et 4 corps et la fonctionnelle associée est utilisée pour décrire le champ moyen et le champ d'appariement. Il a été nécessaire de construire un nouveau protocole d'ajustement afin de contraindre les paramètres de cette fonctionnelle. En particulier, l'ajustement est fait avec des contraintes sur les instabilités précédemment mentionnées.</p> <p>Parallèlement à la construction du protocole d'ajustement, l'utilisation de techniques d'analyse covariante a permis, dans un premier temps, d'estimer les erreurs statistiques associées à chaque paramètre ajusté et les barres d'erreurs des observables calculées. Dans un second temps, nous avons étudié les corrélations existantes entre les différentes contraintes choisies dans le protocole, ce qui a permis de mettre en évidence certains défauts de ces nouvelles interactions généralisées.</p> <p>Enfin, dans un travail annexe, nous avons utilisé des méthodes semiclassiques de type Thomas-Fermi modifiées (MTF) afin de dériver une formule analytique permettant d'estimer la valeur du coefficient d'énergie de surface d'une interaction de Skyrme généralisée. En réajustant les paramètres de la fonctionnelle SLy5 avec une contrainte sur ce coefficient, nous avons montré qu'il était fortement corrélé aux propriétés de fission des actinides. Nous aurons ainsi à notre disposition, grâce à cette estimation du coefficient d'énergie de surface, un outil simple à mettre en œuvre dans des protocoles d'ajustements futurs qui permettra de contraindre les propriétés de fission des noyaux.</p>				
MOTS-CLES : structure nucléaire, interaction effective, Skyrme, Trois corps, quatre corps, pairing, fit, ajustement de paramètres, Analyse de sensibilité, analyse covariante, semi classique, MTF, ETF.				
Directeurs de recherches : Karim Bennaceur et Dany Davesne				
Composition du jury : M. Bender, G. Chanfray, H. Goutte, P.-H. Heenen, B. Gall, K. Bennaceur, D. Davesne				132 pages