

Distribution spatiale de fermions fortement corrélés en interaction forte : formalisme, méthodes et phénoménologie en structure nucléaire

Raphaël-David Lasseri

► To cite this version:

Raphaël-David Lasseri. Distribution spatiale de fermions fortement corrélés en interaction forte : formalisme, méthodes et phénoménologie en structure nucléaire. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Paris-Saclay, 2018. Français. NNT : 2018SACLS248 . tel-01879656

HAL Id: tel-01879656 https://theses.hal.science/tel-01879656

Submitted on 24 Sep 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.





Distribution spatiale de fermions fortement corrélés en interaction forte : formalisme, méthodes et phénoménologie en structure nucléaire.

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay préparée à Université Paris-Sud

Ecole doctorale n°576 Particules, Hadrons, Énergie, Noyau, Instrumentation, Imagerie, Cosmos et Simulation (PHENIICS) Spécialité de doctorat : Structure et réactions nucléaires

Thèse présentée et soutenue à Orsay, le 5 Septembre 2018, par

RAPHAËL-DAVID LASSERI

Composition du Jury :

INSTITUT DE PHYSIQUE NUCLÉAIRE

ORSAY

| MARCELLA GRASSO Directrice de recherche, Institut de Physique Nucléaire d'Orsay | Président |
|---|-----------------------|
| GIANLUCA COLÒ Professeur, <i>Universita degli Studi, Milan et INFN</i> | Rapporteur |
| KARIM BENNACEUR Maitre de Conférence, <i>Institut de Physique Nucléaire de Lyon</i> | Rapporteur |
| MIGUEL MARQUES Chargé de recherche, <i>Laboratoire de Physique Corpusculaire, Caen</i> | Examinateur |
| ELIAS KHAN Professeur, <i>Université Paris-Saclay, Institut de Physique Nucléaire</i> d'Orsay | Directeur de thèse |
| JEAN-PAUL EBRAN Chercheur-Ingénieur, <i>Commissariat à l'Energie Atomique, Division des</i> <i>Applications Militaires</i> | Co-directeur de thèse |

A mes parents, A mon épouse chérie.

Remerciements

Cette section, expression du cœur et non de l'esprit est écrite à l'issue du long processus de rédaction mais est paradoxalement celle qui sera lue en premier. J'espère toutefois que le lecteur n'y accordera pas une importance trop poussée eu égards aux oublis bien involontaires que j'aurai pu commettre. Aussi, toute énumération étant troncation, j'adresse mes premiers remerciements à chaque lecteur prenant le temps de parcourir ce manuscrit. Néanmoins il est important pour moi de remercier individuellement quelques unes des personnes avec lesquelles j'ai eu le privilège d'interagir. Chronologiquement mes premiers remerciements vont à mes parents, qui ont su éveiller et nourrir ma curiosité scientifique tout en m'offrant parfois au prix de coûteux sacrifices éducation, conseils et écoute ce dont je leur serai à jamais redevable (je suis sur que vous ne m'en voulez pas trop de ne pas avoir fait médecine, après tout c'est encore enfant que vous m'avez offert mon premier télescope :)). J'ai également une pensée affectueuse pour ma tante Gaby (merci d'avoir fait 15h de voyage pour assister à ma soutenance). Une pensée également pour mes beaux-parents pour leur accueil chaleureux. Je souhaiterais également exprimer ma gratitude à mes enseignants de Maths Sup et Spé, particulièrement Émilie Auribault, Elsa Choubert ainsi que Didier Despinasse et Christophe Antonini qui ont su me donner le goût de l'effort intellectuel et de la rigueur scientifique et m'ont permis de rejoindre les rangs de L'École Normale Supérieure. En conséquence c'est à mes professeurs de l'ENS Cachan (Paris-Saclay c'est selon) que mes remerciements suivants s'adressent. En particulier à Nicolas Sator, Philippe Depondt, Bertrand Delamotte, Claude Aslangul, Eli Ben-Haïm et Alain Comtet (que j'ai eu le plaisir de retrouver à Orsay). Je voulais également remercier mes amis du CRANS (peb, [20-100], tudor, titemere, Bouill, iota et les autres), association, que j'ai eu le privilège de contribuer à gérer administrativement puis techniquement, vous m'avez beaucoup appris aussi bien sur GNU/Linux que sur la vie en général. De même j'adresse toute mon amitié à André, Joëlle, Esther ainsi qu'à la famille Braham pour leur accueil si chaleureux à Cachan vous m'avez apporté la chaleur d'une famille pendant les années où mon univers se restreignait quasi-uniquement à ma passion pour la physique et l'informatique. Progressons dans le temps jusqu'à l'année de Master II et je souhaiterais remercier ici mes enseignants en particulier Sébastien Descotes-Genon, Wolfram Korten et feu Pierre Binetruy.

Mes remerciements vont également à l'ensemble de mes condisciples avec qui nos échanges scientifiques m'ont permis d'apprendre au moins autant qu'auprès de nos professeurs. C'est à ce moment que j'ai commencé à fréquenter plus assidûment l'association D2I2 qui m'a permise de prendre conscience de la réalité doctorale et de partager interrogations et réflexions sur l'avenir des docteurs et doctorants.

Merci à ceux qui m'y ont accueilli, Guillaume, Noël, Marie-Coralie et les autres. Merci à ceux qui m'ont aidé à reprendre le flambeau, Louis, Claire (Putschiste va), Delphine, Victor, Anne et à ceux qui ont suivi Olivier et Antoine. J'en viens à présent à mes collègues et confrères de l'Institut de Physique Nucléaire, tout d'abord merci à Michael pour m'avoir si bien accueilli au sein du groupe de Physique Théorique, merci à Denis pour les discussions et les opportunités que tu m'as permis de saisir à Dubna et ailleurs, Marcella (en particulier merci d'avoir accepté de présider mon Jury de thèse) Guillaume (on continuera à râler sur nos codes respectifs même si plus d'une cloison nous sépare), Paolo (j'ai toute confiance en BLOB, reste à convaincre nos amis crackpots), Jean-Philippe (Condor aura fini par tourner) Giai et Peter pour l'ambiance chaleureuse et les discussions, pas systématiquement scientifiques mais toujours passionnantes. Marlène, merci de tes lumières expérimentales (notamment sur les noyaux miroirs) et de ta gentillesse à Trento ou à Orsay. Merci bien sûr à Petar, co-bureau, co-encadré de thèse (et officiellement sur le même sujet :p) pour tes encouragements et nos discussions enflammées sur la mauvaise convergence d'HFORSAY (Tell him Maxime ! !) pendant ces semaines à York en compagnie de Maxime (sans qui je n'aurais sans doute pas connu la physique nucléaire) de Pierre, bon courage à vous trois pour ces derniers jours avant vos soutenances j'espère bien que nous continuerons à échanger que ce soit à Livermore au CERN ou dans le Surrey.

Merci aux autres doctorants de l'IPN et des labos proches, Aurélien, Hadrien, Anastasia, Olivier, Antoine, David, Anne et j'en oublie avec qui nous avons partagé émotions et réflexions. Aux amis du CEA, Mehdi, Alexander, Julien et bien sûr Thomas Duguet que je tiens à remercier de m'avoir permis de mettre un pied dans la communauté *ab-initio* et pour nos discussions à Darmstadt ou à l'Orme j'espère que nous continuerons à collaborer dans les années à venir. Merci également à mes collaborateurs Hélène Pihan-Le Bars, Christine Guerlin, Nicolae Sandulescu et Daniel Negrea.

Je tenais également à remercier Laure-Amélie Couturié pour ses précieux *sudo*'s et sa disponibilité constante pour mes problèmes Mail/HPC/AdminSys/etc... ainsi qu'à Vincent Lafage pour les conseils avisés concernant OPENACC.

J'ai également une pensée particulière pour les collègues du département de physique, enseigner avec vous fut une expérience intéressante et enrichissante, je n'oublierai sans doute jamais le premier cours que j'ai pu donner en amphi grâce à vous.

J'en arrive à mes deux anciens colocataires et amis fidèles, Olivier (Dr_eleve_oc) et Thomas (bientôt futur Dr Pyromane), cela fait bientôt 6 ans que l'on se connaît, depuis les révisions communes de "Cohésion de la Matière" jusqu'à DARKSIDE (Si l'on a survécu à ça on peut survivre à tout), plus le temps passe plus j'apprécie votre compagnie, votre écoute ; votre amitié m'est précieuse et que ce soit à Nantes où à Cologne j'espère bien que nous resterons aussi proches. Antonin (Promis on ne parlera plus de grutalité) et Régis (On aura bien besoin de ton aileron un de ces quatre) entre fous-rires, vacances communes et projets Boliviens je compte bien continuer à vous voir.

Je tiens également à adresser mes remerciements sincères à Karim Bennaceur, Gianluca Colo, Miguel Marques et Marcella Grasso d'avoir accepté de constituer mon Jury de thèse et de l'attention particulière portée à ce manuscrit, c'était un honneur pour moi de vous présenter ce travail.

J'en arrive à présent à mes deux directeurs de thèse, Elias et Jean-Paul, au delà des considérations académiques la thèse est une tranche de vie, je tenais à vous dire que je n'aurais pu espérer de meilleurs encadrants mais surtout de meilleurs esprits avec qui la construire. Dés le début de ces travaux, vous m'avez accordé une très grande confiance se traduisant par une grande liberté de recherche ponctuée d'échanges très enrichissants pour moi. Au delà de vos qualités scientifiques votre écoute, votre considération et votre amitié me marqueront bien au-delà de cette thèse et je ferai beaucoup pour que notre collaboration et amitié perdure. En quelque sorte le fait que vous fussiez mes témoins de mariage me rassure sur ce dernier point (merci encore d'ailleurs :))

A présent une nouvelle page commence à s'écrire, et je tenais à remercier celles et ceux qui me suivent dans l'aventure Magic-LEMP en particulier Thomas (pour ta créativité sans borne), Antonin (pour tes fantastiques compétences techniques et ta bonne humeur), Marie (sans qui mon nombre d'heures de sommeil aurait fini par tendre vers un nombre négatif), Inés (pour ton enthousiasme et ta bonne humeur), je suis conscient de la confiance que vous m'avez accordé et j'espère être à la hauteur. Merci également à Hadrien, Aurélien, Miho, Pierre et les autres, l'aventure continue ensemble !

Pour conclure, après avoir travaillé sur l'appariement je suis heureux de pouvoir affirmer avoir trouvé ma partenaire *time-reversed*, aussi c'est naturellement que je terminerai par remercier de tout cœur mon épouse chérie. Ruth, merci de tout l'amour dont tu m'as entouré en particulier pendant cette dernière année de thèse, merci d'avoir supporté mon tempérament sanguin et mes humeurs changeantes accompagnant calculs et phases intenses de rédaction et merci de ton indéfectible soutien et j'espère que nous donnerons corps à notre conviction commune que la volonté peut forger la réalité.

Il me reste à vous souhaiter une bonne lecture.

Orsay, le 17 Septembre 2018

Table des matières

| Re | Remerciements iii | | | |
|--|------------------------|--|------|--|
| Ta | Table des matières vii | | | |
| Li | ste de | es figures | ix | |
| Li | ste de | s tableaux | xvii | |
| In | trodu | ction | 1 | |
| 1 | Syst | èmes de fermions en interaction forte | 5 | |
| | 1.1 | Systèmes quantiques à N-corps : Éléments de formalisme | 6 | |
| | 1.2 | Systèmes nucléaires : Particularités et singularités | 12 | |
| | 1.3 | Conclusions | 29 | |
| | 1.4 | Références | 29 | |
| 2 | Trai | tement relativiste du noyau atomique | 33 | |
| | 2.1 | Description relativiste du système | 35 | |
| | 2.2 | Théorie Hartree-Fock | 40 | |
| | 2.3 | Prise en compte des corrélations particules-trous dites de <i>bulk</i> | 41 | |
| | 2.4 | Corrélations de type particules particules | 52 | |
| | 2.5 | Conclusions | 67 | |
| | 2.6 | Références | 68 | |
| 3 Symétries brisées, phénomènes émergents et agrégation nucléaire | | étries brisées, phénomènes émergents et agrégation nucléaire | 71 | |
| | 3.1 | Symétries spatiales | 73 | |
| | 3.2 | Réalisation pratique | 82 | |
| | 3.3 | Champ-moyen sous contraintes multiples | 95 | |
| | 3.4 | Agrégation nucléaire | 99 | |
| | 3.5 | Transition de phases quantiques | 112 | |
| | 3.6 | Conclusions | 115 | |
| | 3.7 | Références | 116 | |
| 4 | Cor | rélations à 2 et 4 corps : Impact sur la structure nucléaire | 121 | |
| | 4.1 | Appariement et structure nucléaire | 122 | |
| | 4.2 | Structure spatiale des corrélations d'appariement | 126 | |
| | 4.3 | Corrélations à 4 corps | 145 | |
| | 4.4 | Conclusions | 154 | |
| | 4.5 | Références | 155 | |
| Co | onclus | sions générales | 159 | |
| A | List | es des acronymes utilisés | Ι | |

| B | MBPT : Expressions et diagrammes à l'ordre 4 | III |
|---|---|-------|
| С | BMBPT : Expressions et diagrammes à l'ordre 2 | XI |
| D | PBCS : Relations de récurrences | XV |
| E | QCM : Relations de récurrences | XVII |
| F | Coefficients de Talmi : Dérivations | XXI |
| G | Éléments de matrices triaxiaux (parité brisée) | XXIII |
| H | Stabilité du système : Influence des paramètres de base | XXV |
| I | Cosmologie et physique nucléaire | XXVII |

Liste des figures

| 1 | Illustration de l'émergence d'un ordre macroscopique à partir d'un système microscopique complexe. | 1 |
|------|--|----|
| 1.1 | Illustration de l'approximation de particules indépendantes, on rem- place les particules en interaction par un ensemble de particules in- dépendantes soumises à un champ moyen généré par l'ensemble des particules. | 7 |
| 1.2 | Représentation de la partie centrale du potentiel nucléon-nucléon, ob- tenu en utilisant le potentiel Reid93 | 8 |
| 1.3 | Impact de l'appariement : Les discontinuités entres systèmes pairs et impairs traduisent les effets de l'appariement sur l'énergie de liaison | 11 |
| 1.4 | Spectre d'excitation du ²³⁸ Pu, présentant une structure de bandes ro- tationnelles, c'est à dire dont les niveaux d'énergies s'agencent pro- portionnellement à un facteur $J(J + 1)$ J étant le moment angulaire de l'état considéré. Il s'agit d'un signe de la déformation du système. | 11 |
| 1.5 | Les énergies (à gauche du spectre) sont données en keV Hiérarchie des contributions à l'interaction nucléaire dans le cadre d'une théorie effective chirale. (Les nucléons sont représentés en traits | 11 |
| | pleins, et les pions en pointillés) [MS16]. | 15 |
| 1.6 | Graphe de Feynman représentant l'échange au niveau arbre d'un pion entre nucléons | 16 |
| 1.7 | Exemples de diagrammes irréductibles d'échanges de 2 pions corré- lés, le baryon Δ est un état isobarique résonant virtuel | 16 |
| 1.8 | Exemple d'un terme correspondant à l'échange de 3 pions corrélés (les pions sont représentés en pointillés) | 16 |
| 1.9 | Équation d'état de la matière nucléaire pour différents schémas de troncation du lagrangien effectif (en haut). Comparaison à l'expérience des spectres d'excitations obtenues pour différentes interac- | |
| | tions chirales pour quelques noyaux légers | 17 |
| 1.10 | Graphe de Feynman représentant l'interaction entre nucléons dans le cadre de l'approximation OBE | 17 |
| 1.11 | Potentiel central d'interaction nucléon-nucléon en termes d'échange de mésons | 18 |
| 1.12 | Spectre des désintégrations $\pi - \pi$ dans le cadre d'une collision or-or à 200GeV/nucléon. En rouge une distribution de Breit-Wigner maté- rialisant la présence d'une résonance ; le méson ρ [DtSC12] | 18 |
| 1.13 | Spectre obtenu suite à la diffusion de pions sur des noyaux de ¹² C, ⁴⁰ Ca, et ²⁰⁸ Pb on note la présence d'une résonance correspondant au σ [ACSW99] | 19 |
| 1.14 | Représentation schématique de l'équation de Bethe-Salpeter. en traits | 1) |
| | doubles le propagateur nucléonique exact | 21 |

| 1.15 | Equation de Bethe-Salpeter dans le cadre où l'on ne considère que les contributions "en échelle" de l'interaction nue (zigzags), le pro- | |
|------|--|----|
| | pagateur exact est représenté en traits doubles | 21 |
| 1.17 | Impact schématique des corrélations à deux-corps sur une fonction d'onde à deux nucléons en fonction de leur distance relative, le po- tentiel nucléon-nucléon est représenté schématiquement. Figure tirée | |
| | de [MP00] | 22 |
| 1 16 | Représentation schématique de l'équation auto-cohérente de Dyson | |
| | à deux points, la self-energy est notée Σ | 22 |
| 1.18 | Saturation de la matière nucléaire symétrique pour des modèles re- | |
| | lativistes (symboles pleins) et non-relativistes (symboles vides), le | |
| | rectangle bleu indique la zone empirique de saturation. Figure issue | |
| | de [Fuc04] | 23 |
| 1.19 | Différentes paramétrisations de la force forte dans l'espace réel (à gauche) et représentation de cette interaction dans l'espace des mo- | 22 |
| 1 20 | Évolution des éléments de matrices de l'interaction dans l'espace des | 23 |
| 1.20 | moments, par souci de simplicité on introduit le paramètre $\lambda = s^{-1/4}$ quantifiant la suppression des éléments extra-diagonaux. Adapté de | |
| | [BFS10] | 25 |
| 1.21 | Représentation diagrammatique des contributions à la fonction de | |
| | vertex dans le milieu Ξ décrite par l'équation (1.43). Les vertex d'in- | |
| | teraction dans le vide sont materialises par des points les propaga- | |
| | en traits pleins | 26 |
| 1 22 | Dépendance en densité des constantes de couplages normalisés des | 20 |
| 1.22 | mésons σ (à gauche) et ω à droite. les symboles pleins correspondent | |
| | à des résultats issus de Dirac-Brueckner, la paramétrisation (1.49) est | |
| | tracée en trait plein, figure issue de [TW99] | 28 |
| 2.1 | Energy de discourses discourses de temp relationtion du side in | |
| 2.1 | Exemple de diagrammes divergents de type polarisation du vide in- | 30 |
| 22 | Comparaison des techniques de renormalisation NSET et de l'an- | 39 |
| 2.2 | proximation no-sea sur l'énergie par nucléon dans la matière nu- | |
| | cléaire uniforme. Figure issue de [Kar10] | 39 |
| 2.3 | Diagramme représentant la correction du second ordre à l'énergie | |
| | Hartree-Fock dans le cadre MBPT | 43 |
| 2.4 | Exemple d'un graphe orienté à 4 sommets et 5 arcs | 44 |
| 2.5 | Diagrammes de Hugenholtz contribuant à la correction à l'ordre 3 en | |
| | perturbation de l'énergie. | 45 |
| 2.6 | Énergie de liaison par nucléon à l'ordre trois en perturbations (cercles | |
| | rouges) et dans le cadre d'une approche <i>Coupled-Cluster</i> (triangles | |
| | bleus) pour plusieurs noyaux, la valeur expérimentale est indiquée en | 16 |
| 0.7 | noir, figure adaptee de [ILBR16]. | 46 |
| 2.7 | | 48 |
| 2.8 | Companying de l'énergie de réception à des services à la companying de l'énergie de réception à de la companying de la compan | 49 |
| 2.9 | comparaison de l'energie de separation à deux neutrons pour des | |
| | MF2) en noir les valeurs expérimentales (Issu de [FKD AV11]) | 50 |
| 2 10 | Contributions directes à la self-énergie (S et V) | 51 |
| 2.11 | Schéma de résolution dans le cadre d'annroche d'un champ moven | 51 |
| | relativiste auto-cohérent | 52 |
| | · · · · · · · · · · · · · · · · · · · | |

| 2.12 | Spectre théorique des noyaux miroirs ¹⁸ N et ¹⁸ Na, le décalage des états 0^- est liée à la formation de paires, issu de [FS07] | 53 |
|------|---|----------|
| 2.13 | Représentation en terme de graphe orienté de la matrice A_3 | 55 |
| 2.14 | Graphe G_t après transformation, les sommets extrémaux sont fusion- nés, le poids des boucles supplémentaires vaut 1 dans ce cas | 56 |
| 2.15 | Représentation des bases intervenant dans la décomposition de Bloch- Messiah-Zumino de la transformation de Bogoliubov | 59 |
| 2.16 | Énergies de séparation à deux neutrons pour des isotopes de l'étain. Les lignes brisées représentent l'interaction relativiste pure, les traits pleins l'approche hybride ; les points correspondent aux données ex- périmentales. Figure issue de [SR02] | 62 |
| 2.17 | Les différents agencements possibles pour les paires nucléoniques. T indique l'isospin total, et S le spin total. | 65 |
| 2.18 | Figure récapitulative des théories et modèles présentés dans ce cha- pitre. Les hexagones grisés indiquent un formalisme. Les indications le long des flèches les techniques employées. | 68 |
| | | 00 |
| 3.1 | Représentation schématique de l'effet des modes collectifs sur la forme du noyau, à gauche une configuration de champ-moyen figée, à droite l'interaction résiduelle engendre des déformations dites <i>prolate</i> (en | 74 |
| 3.2 | Deux chemins de fission du ²⁴⁰ Pu, en trait plein les solutions axiales, en pointillés les solutions triaxiales. Les solutions d'énergie minimale | /4 |
| | sont celles de symétrie axiale. Figure issue de [BHR03] | 77 |
| 3.3 | Représentation des dégénérescences (points noirs) associées à une symétrie continue du Hamiltonien. Dans ce cas il s'agit de la symétrie | 70 |
| 3.4 | Spectre expérimental du ²⁰ Ne présentant une structure en bandes ro- tationnelles caractéristique de la déformation nucléaire | 79 80 |
| 3.5 | Exemples d'action d'opérateurs multipolaires sur la distribution de matière au sein du noyau, les codes axiaux permettent d'obtenir des déformations quadripolaires, les codes brisant la parité permettent d'obtenir en plus des déformations octupolaires et enfin les codes triaxiaux permettent d'incorporer en plus les déformations hexadeca- | 81 |
| 3.6 | Coupe de la densité de l'état fondamental de l'Uranium 234 dans le référentiel intrinsèque obtenue dans le cadre d'une approche relativiste | 87 |
| 37 | Énergie totale de l' 234 U vis-à-vis du moment quadrinolaire β_{0} | 87 |
| 3.8 | Énergie totale de l' ²²⁴ Ra vis-à-vis du moment quadripolaire β_2 | 88 |
| 3.9 | Représentation spatiale de la densité du Radium 224 dans le référen- tiel intrinsèque du noyau, la contribution octupolaire est responsable | 00 |
| 3.10 | de la forme en "poire" de ce noyau | 89 |
| | énergie, présentant une déformation axiale et octupolaire. | 90 |
| 3.11 | Evolution de l'énergie de liaison totale du ¹⁹⁰ Pt en fonction du mo- ment quadripolaire β_2 | 93 |
| 3.12 | PES du Platine 190 dans l'espace des moments quadripolaire β_2 et octupolaires β_3 . Le point rouge indique le minimum global de cette | |
| | carte | 93 |

xi

| Énergies de ligison dans le plan (β_{2}, α) les contours indiquent les | |
|---|---|
| lignes isoénergétiques, le minimum global de cette surface est indi- qué par le point rouge, figure issue de [NcvacRV ⁺ 10], utilisant la même paramétrisation relativiste que dans cette étude | 94 |
| Densité du ¹⁹⁰ Pt dans le référentiel intrinsèque du noyau en vue de coupe selon les Ozx (en haut à gauche) Ozy (en haut à droite) et Oux (en has) | 94 |
| Densité du ¹⁹⁰ Pt dans le référentiel intrinsèque du noyau en représen- tation tridimensionnelle | 95 |
| Représentation schématique d'un algorithme génétique usuel | 96 |
| Évolution de l'énergie de liaison rapportée au nombre de nucléons, pour plusieurs éléments légers. Les noyaux N=Z sont plus liés que leurs isotopes respectifs (adaptée de [C10]) | 100 |
| Réponse en énergie du 20 Ne vis-à-vis d'une déformation axiale. | 101 |
| Densité dans le référentiel intrinsèque du ²⁰ Ne, on note l'apparition de deux agrégats de densité qui correspondent à des clusters. | 102 |
| Densités nucléoniques en vis-à-vis de la mesure de localisation $C_{\tau\sigma}$, le panel de gauche correspond à l' ⁴ He et le panel de droite à l' ¹⁶ O. | 103 |
| Densité dans le référentiel intrinsèque du ²⁰ Ne à droite, mesure de localisation associée au même élément à droite. | 104 |
| Énergie totale normalisée du système dans le plan (β_2, β_3) le mini- mum global est indiqué par le point rouge. Figure issue de [MacEK ⁺ 18 |]105 |
| Densité dans le référentiel intrinsèque de l'état $J = 0^+$ du ²⁰ Ne (à droite), mesure de localisation associée (à droite). Le cluster est localisé entre les traits en pointillés. | 105 |
| Densités dans le référentiel intrinsèque du ²⁰ Ne, pour des paramé- trisations relativistes et non-relativistes de portée nulle et de portée finie | 106 |
| Représentation schématique des trois phases possibles dans le noyau caractérisé par le paramètre α_{loc} . | 107 |
| Dispersion radiale des fonctions d'ondes du 288 Cf modélisé par un oscillateur harmonique (symboles pleins). Dispersions minimales et maximales pour chaque <i>n</i> dans le cadre des approximations (3.95) et (3.98) (symboles vides) | 109 |
| Évolution des états neutroniques occupés des blocs de spin-parité du ²⁰ Ne dans une approche RMF (traits pleins), dispersion de la fonc- tion d'onde du dernier état occupé (trait bleu en pointillés). Le panel du bas présente les densités des neutrons de valences pour les défor- mations correspondantes aux minima (a,b,c,d) et maxima (A,B,C,D) | |
| de la dispersion | 111 |
| finie | 111 |
| Représentation schématique du passage dune forme sphérique cor- respondante au groupe de rotation $O(3)$, au groupe ponctuel tétra- édrique T_d | 112 |
| | Énergies de liaison dans le plan (β_2, γ) les contours indiquent les lignes isoénergétiques, le minimum global de cette surface est indiqué par le point rouge, figure issue de [NevaeRV ⁺ 10], utilisant la même paramétrisation relativiste que dans cette étude Densité du ¹⁹⁰ Pt dans le référentiel intrinsèque du noyau en vue de coupe selon les O_{2x} (en haut à gauche) O_{2y} (en haut à droite) et O_{yx} (en bas) |

| 3.30 | Évolution de l'énergie totale de l' ¹⁶ O lorsque l'on augmente son rayon. Le trait noir indique l'état fondamental du système, le trait bleu indique la transition entre distribution continue et distribution tétraédrique. Trois approches sont présentées, un calcul sphérique sans appariement (en rouge) un calcul sphérique avec appariement(en vert) l'énergie d'appariement associée est représentée en gris, un cal- cul où l'on n'impose aucune symétrie (en jaune). | 113 |
|------|---|------------|
| 3.31 | Densité de l' ¹⁶ O dans le référentiel intrinsèque, à gauche densité de l'état fondamental à droite densité tétraédrique au point critique correspondant au rayon $R_{\rm rms}^{\rm (Critique)} = 5.9$ | 114 |
| 3.32 | Évolution du moment tétraédrique en fonction du rayon dans le cadre de l'approche RHB, la transition a lieu pour $R_{\rm rms}^{\rm (Critique)} = 5.9. \ldots$ | 115 |
| 4.1 | Comparaison des gaps d'appariements dans la matière nucléaire en fonction des densités prédites par les paramétrisations D1 et D1S (en traits pleins) avec l'évolution issue de l'interaction séparable. Figure | 100 |
| 4.2 | Évolution de la déformation axiale β_2 du ²⁰ Ne en fonction de l'inten- sité des corrélations d'appariements matérialisés par l'énergie d'ap- pariement en MeV. En lettres capitales 4 configurations spécifiques | 123 |
| 4.3 | Évolution pour le ²⁰ Ne de la densité (à gauche) et de la mesure de lo- calisation (à droite) lorsque l'on augmente l'intensité des corrélations d'appariement. Les configurations A,B,C,D sont celles indiquées en figure 4.2 et correspondent aux valeurs de 4.1. Calculs effectués dans | 120 |
| 4.4 | une approche <i>RMF</i> pour la paramétrisation DD-ME2 Évolution pour le ²⁰ Ne de la densité (à gauche) et de la partie locale du tenseur d'appariement associé (à droite) lorsque l'on augmente l'intensité des corrélations d'appariements. Les configurations B,C,D sont celles de la figure 4.2. A noter que l'échelle de la norme de κ | 126 |
| 4.5 | change pour chaque configuration | 128 |
| 4.6 | Illustration de l'apparition d'une symétrie artificielle sur le produits de deux fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique (à droite). Même produit de fonction d'ondes en restreignant la transformation à \mathbb{R}^+ (à gauche), la symétrie en $r_1 = r_2$ disparaît. | 129 |
| 4.7 | Produits des fonctions d'ondes l'oscillateur harmonique axial en pro- jection selon l'axe Oz prise en $r_1 = r_2 = 0$, en abscisse la coordon- née du centre de masse Z en ordonnée la coordonnée relative z . Les valeurs des nombres quantiques n_{z_1}, n_{z_2} sont indiquées pour chaque configuration. | 133 |
| 4.8 | Produits des fonctions d'ondes l'oscillateur harmonique axial en pro- jection selon l'axe Or prise en $z_1 = z_2 = 0$, en abscisse la coor- donnée du centre de masse R en ordonnée la coordonnée relative r . Les valeurs des nombres quantiques n_{r_1} , n_{r_2} ainsi que les différentes projections du moment angulaire associées m_{l_1} , m_{l_2} sont indiquées | |
| 4.9 | pour chaque configuration | 133 134 |
| | (a diote) | 1.77 |

| 4.10 | ¹²⁴ Sn : Densité à 1-corps et en vis-à-vis la partie locale du tenseur | |
|--------------|---|------|
| | d'appariement (à gauche), Partie non locale de $ \kappa(R,r) ^2$ dans le sys- | |
| | tème du centre de masse R et relatives r de la paire (à droite) | 134 |
| 4.11 | ²⁰⁰ Pb : Densité à 1-corps et en vis-à-vis la partie locale du tenseur | |
| | d'appariement (à gauche), Partie non locale de $ \kappa(R,r) ^2$ dans le sys- | |
| | tème du centre de masse \mathbf{R} et relatives \mathbf{r} de la paire (à droite) | 134 |
| 4.12 | A gauche, Longueur de cohérence associée au tenseur d'appariement | |
| | dans le cadre d'une approche de type <i>RHB</i> pour le ⁶⁶ Ni, ¹²⁴ Sn et | |
| | ²⁰⁰ Pb. A droite, le numérateur et le dénominateur de (4.39) sont re- | |
| | présentés. | 135 |
| 4.13 | Partie non locale de tenseurs d'appariements dans le cadre d'une ap- | |
| | proche de type $RMF+PBCS$ pour le ⁶⁶ Ni (a'), ¹²⁴ Sn (b') et ²⁰⁰ Pb | |
| | (c') | 137 |
| 4.14 | A gauche, Longueur de cohérence associée au tenseur d'appariement | |
| | dans le cadre d'une approche de type $RMF+PBCS$ pour le ⁶⁶ Ni, | |
| | 124 Sn et 200 Pb. A droite, le numérateur et le dénominateur de (4.39) | |
| | sont représentés. | 138 |
| 4.15 | Comparaison des approches <i>RMF</i> + <i>PBCS</i> et <i>RHB</i> sur l'évolution du | |
| | tenseur d'appariement en fonction de la coordonnée relative pour | |
| | trois valeurs de la coordonnée du centre de masse, $\mathbf{R} = 1.0$ fm (à | |
| | droite), $\mathbf{K} = r_n$ (au centre) et $\mathbf{K} = r_{\min(\kappa)}$ (a gauche). Pour les noyaux | 120 |
| 4.10 | $\operatorname{NI}(a)$, $\operatorname{SII}(b)$ et $\operatorname{SII}(b)$ et $\operatorname{SII}(b)$. | 138 |
| 4.10 | Longueurs de concrence calculees dans le cadre de l'approche $RMF + PE$ | scs |
| | pour 1 Sn, pour differences valeurs de l'intensité d'appartement, | |
| | a L'énergie d'appariement pour chaque valeur de ce paramètre sont | |
| | également présentés | 139 |
| 4 17 | Evolution de la quantité quar pour les états des couches majeures de | 157 |
| T. 17 | particules individuelles pour le 120 Sn | 140 |
| 4 18 | Longueur de cohérence associée au tenseur d'appariement dans une | 110 |
| 1.10 | approche <i>RHB</i> pour le 84 Ni (à gauche). Longueurs de cohérences | |
| | associées aux isotopes du Nickel dans le cadre d'une approche Bo- | |
| | golioubov non relativiste (à droite Figure issue de [PSS07]). | 141 |
| 4.19 | A gauche, Longueur de cohérence associée à la fonction d'onde de | |
| | Cooper dans le cadre d'une approche de type <i>RHB</i> (en haut) et dans | |
| | une approche <i>RMF</i> + <i>PBCS</i> (en bas) pour le ⁶⁶ Ni, ¹²⁴ Sn et ²⁰⁰ Pb. A | |
| | droite, les numérateurs et les dénominateurs de (4.47) sont représentés. | 143 |
| 4.20 | Évolution du ratio (4.49) entre la longueur de cohérence associée à | |
| | la paire de Cooper et la distance entre neutrons pour le ⁶⁶ Ni, dans le | |
| | cadre <i>RHB</i> (en rouge) et dans l'approche <i>RMF</i> + <i>PBCS</i> (en vert) | 144 |
| 4.21 | Schéma de la composition d'un quartet décrit par (4.50) en rouge les | |
| | protons, en noir les neutrons, la projection du spin est indiquée par | |
| | l'orientation de la flèche. | 145 |
| 4.22 | Chemins de convergences schématisés, dans un cadre RMF en noir, | |
| | <i>RMF</i> + <i>QCM</i> sans optimisation en rouge, <i>RMF</i> + <i>QCM</i> avec optimisa- | |
| | tion de mélange en bleu. En ordonnée, on note convergence l'écart | 1 47 |
| 1.00 | de l'iteration n a l'iteration $n-1$ que l'on normalise | 147 |
| 4.23 | Energies <i>single-particle</i> des neutrons dans la base canonique. A gauche | |
| | i evolution des energies lorsque i on augmente β_2 jusqu'à la valeur obtenue pour l'état fondementel et l'on concerne β_2 fixé à 0. A directer | |
| | on fixe β_2 à la valeur de l'état fondemental puis l'on fait évaluer ρ | |
| | Un nac p_2 a la valcur de l'etat fondamental puis i on fait evoluer p_3 . | 1/18 |
| | Le inveau de l'ernir est murque par la light grise discontinue. | 140 |

| 4.24 | Densité du ²⁰ Ne dans le référentiel intrinsèque contraint à une confi- guration ($\beta_2 = 0.5, \beta_3 = 0.47$). A droite dans le cas <i>RMF</i> à gauche dans le cas <i>RMF</i> + <i>QCM</i> . | 149 |
|------|---|------|
| 4.25 | Mesure de localisation (à gauche) et densité (à droite) du ²⁰ Ne dans le référentiel intrinsèque contraint à une configuration ($\beta_2 = 0.5, \beta_3 = 0.47$) en coupe selon l'axe (Oz). Courbes obtenues dans un cadre | 1.40 |
| 4.26 | <i>RMF</i> (en bleu) et <i>RMF</i> + <i>QCM</i> (en vert) . Densité du ²⁰ Ne dans le référentiel intrinsèque dans le cadre du for- malisme <i>RHB</i> (appariement) à droite, et dans le cadre <i>RMF</i> + <i>QCM</i> | 149 |
| 4.27 | (quartets) à gauche | 150 |
| 4.28 | résultats dans le formalisme <i>RHB</i> , en bleu <i>RMF</i> + <i>QCM</i> ²⁰ Ne : Mesure de localisation (à gauche) et probabilité de trouver une structure corrélée, paire ou quartet (à droite). Le panel de gauche | 150 |
| | correspond a l'approche $RMF + QCM$, le panel de droite a l'approche RHB | 151 |
| 4.29 | ²⁰ Ne : Localisation spatiale de la partie locale des corrélations à 4- corps, dans le cas neutrons-neutrons A, protons-neutrons B et contri- | |
| | bution totale C. | 152 |
| 4.30 | On a représenté dans le panel de droite ; à gauche la densité dans le référentiel intrinsèque, et en vis-à-vis la mesure de localisation. Pour le panel de droite ; à gauche la mesure de localisation et à droite la | |
| 4.31 | partie locale de l'opérateur de quartet pour le ⁸ Be Pour les panels en lettres majuscules, on a représenté à gauche la densité dans le référentiel intrinsèque, et en vis-à-vis la mesure de localisation. Pour les figures indicées par une minuscule, à gauche la mesure de localisation et à droite la partie locale de l'opérateur de | 153 |
| | quartet. La lettre A se réfère au 20 Ne et la lettre B au 24 Mg | 154 |
| H.1 | Évolution de l'énergie du ²⁰ Ne lorsque l'on augmente β_2 pour différents nombres de couches d'oscillateur Nf | XXV |
| H.2 | Évolution de l'énergie du ²⁰ Ne lorsque l'on augmente β_2 pour différentes valeurs de $\hbar\omega$, le nombre de couches étant fixé à 8 | XXVI |

Liste des tableaux

| 2.1 | Nombre de diagrammes de Hugenholtz dans le cadre du formalisme MBPT et temps d'exécution du programme ADG sur un ordinateur portable | 46 |
|-----|--|-----|
| 3.1 | Tableau récapitulatif de l'impact des paramètres d'un algorithme gé- nétique sur l'efficacité mesurée par le nombre d'itérations avant conver- | 00 |
| 32 | Tableau récapitulatif de l'efficacité en terme de nombre d'itérations | 98 |
| 5.2 | des algorithmes biomimétiques par rapport à l'approche classique. | 99 |
| 4.1 | Energie d'appariement en MeV pour les 4 configurations présentées | 125 |
| 4.2 | Énergie de l'état fondamental (E) , rayon <i>rms</i> de la distribution neu- tronique (r_n) et énergie d'appariement (E_{pair}) calculés au niveau des approximations <i>RHB</i> et <i>RMF+PBCS</i> . La colonne notée "Exp" in- dique les valeurs expérimentales des énergies des états fondamentaux | |
| | de chacun des noyaux[WAK ⁺ 17] | 136 |
| 4.3 | Longueurs de cohérences moyennes pour le tenseur d'appariement et la fonction d'onde de Cooper. $\langle d_n \rangle$ est la distance moyenne entre | |
| | neutrons du noyau. | 143 |
| 4.4 | Comparaison du nombre d'itérations nécessaires à l'obtention d'une convergence pour deux types de systèmes, dans le cadre d'une approche RMF, de la méthode <i>RMF</i> + <i>QCM</i> classique et avec l'optimi- | |
| | sation décrite précédemment. | 147 |

Introduction

The history of atomism is one of reductionism – the effort to reduce all the operations of nature to a small number of laws governing a small number of primordial objects.

Cette phrase du prix Nobel 1988, Léon Lederman, illustre le fait que la construction de la physique moderne a longtemps été mue par une pensée réductionniste. Le réductionnisme c'est ce principe, érigé au rang de nécessité cognitive, qui nous permet de classifier nos observations. Ainsi, face à une bibliothèque, on regroupera immédiatement l'ensemble des objets qui encombrent ses rayons sous le qualificatif de "livres". Il en va de même pour bien des théories physiques. En mécanique céleste, l'infinité des trajectoires que peuvent emprunter les astres deviennent toutes calculables par les trois lois Kepleriennes. De même les lois de l'électromagnétisme et de l'interaction faible peuvent s'unifier dans le cadre du modèle standard. Les physiciens ont longtemps cherché¹ à toujours diminuer le nombre de paramètres et degrés de liberté nécessaires pour décrire la nature. Toutefois il peut exister une certaine limite au réductionnisme, comme l'illustre les systèmes nucléaires. En effet si l'on comprend relativement bien la structure des interactions fortes, faibles et électromagnétiques, il nous est pour l'instant impossible de décrire de manière exacte le comportement d'un ensemble de fermions composites, les nucléons, soumis à ces trois interactions. Les fortes corrélations entre particules, induites par la nature quantique du système rendent le système complexe et sous-tendent son agencement et la distribution spatiale de ses constituants. Les noyaux atomiques sont ainsi parmi les plus complexes des objets de la nature, ce qui les rend d'autant plus fascinants. En effet cette complexité entraîne l'émergence de comportement collaboratif ne pouvant par essence s'expliquer par une réduction aux seuls comportements individuels des nucléons. Historiquement l'idée de comportements collectif fut très vite incluse



FIGURE 1 – Illustration de l'émergence d'un ordre macroscopique à partir d'un système microscopique complexe.

dans des approches phénoménologiques. Les physiciens ont ainsi construits des mo-

^{1.} Et continuent à le faire, notamment dans l'espoir de construire des théories totalement unifiés (GUT – Grand Unified Theory)

dèles macroscopiques (*plum-pudding*, goutte liquide) rendant compte de la collectivité des nucléons. Ces modèles, ont permis de décrire avec succès et pendant près d'un demi-siècle, le comportement nucléaire. Toutefois, la capacité d'observation expérimentale allant en s'affinant, des traces de comportements plus complexes vinrent nuire à cette vision simplifiée (structure en couche, radioactivité α et cluster). Ces observations varient grandement d'un noyau à l'autre, le fait d'enlever ou de rajouter un seul nucléon pouvant drastiquement changer le comportement du système. Aussi pour pouvoir décrire les propriétés de la structure nucléaire sur l'ensemble de la carte des noyaux d'un point de vue microscopique, un autre type de théorie s'avère nécessaire. Néanmoins la difficulté de traitement du problème nucléaire en partant des degrés de libertés fondamentaux, empêche une résolution exacte du problème. En conséquence, un nouveau type de théorie a émergé dans les années 70 en physique nucléaire, les théories EDF (Energy Density Functional) qui sont aujourd'hui en plein essor. Ces théories sont conceptuellement proches des théories fonctionnelles de la densité (DFT)² développées dans le cadre de l'étude de systèmes électroniques. L'approche EDF est en quelque sorte à la frontière entre réductionnisme et émergentisme, au sens où elle vise à décrire les noyaux avec des degrés de liberté nucléonique tout en reposant sur les mécanismes de brisure spontanée de symétries pour rendre compte des comportements collectifs. Ces approches sont les premières à avoir permis un traitement universel des comportements nucléaires et c'est dans le cadre d'une extension relativiste de ce formalisme que ces travaux s'inscrivent.

L'objectif principal de cette thèse est de décrire plus finement les agencements possibles des fermions du système sous l'effet des corrélations. Ainsi nous nous attacherons dans un premier temps à décrire, dans un cadre relativiste, un schéma de construction possible d'une EDF traduisant l'interaction les nucléons du système. Dans le premier chapitre, nous partirons tout d'abord des symétries de QCD pour construire une théorie effective chirale, traduisant l'interaction nucléon-nucléon nue. Suite à cela nous discuterons des différentes techniques permettant de prendre en compte les effets d'écrantage du milieu sur la précédente interaction, ce qui nous permettra *in-fine* d'aboutir à une fonctionnelle de la densité ne dépendant que d'un faible nombre de paramètres libres. Dans le second chapitre, nous présenterons dans le cadre des approches de type Hartree-Fock (HF), les méthodes de résolution du problème nucléaire. Tout d'abord en conservant explicitement les symétries du système, et en traitant les corrélations perturbativement. A cette fin, un nouvel outil développé pendant cette thèse, permettra d'exprimer les observables d'intérêt à un ordre quelconque en perturbation sera présenté.

Nous reviendrons ensuite à une approche non-perturbative, qui en autorisant la brisure de certaines symétries du système, capture des corrélations longues portées, que ce soit dans le canal particule-trou pour traiter de la déformation des noyaux, ou dans le canal particule-particule pour traiter des phénomènes d'appariement. A cette occasion nous discuterons également d'une manière possible de traiter la formation de paires de nucléons corrélés dans un formalisme issu de la théorie des graphes. Puis nous introduirons les plus classiques méthodes BCS et Hartree-Fock-Bogolioubov (HFB) pour traiter les corrélations particules-particules. Ces méthodes exploitent la brisure d'une symétrie U(1), pour inclure des corrélations d'appariement, mais par la même, brisent la conservation du nombre de particules du système. La restauration de cette symétrie par méthode projective sera discutée ainsi que son influence sur la structure spatiale du système. Pour conclure ce chapitre, une extension permettant la prise en compte de corrélations à 4-corps, les quartets, sera présentée.

Le chapitre 3 présente le formalisme et les avancées numériques réalisées pendant

^{2.} Notons toutefois que les brisures de symétrie au cœur des approches EDF fait formellement sortir du cadre de la DFT, cf Chapitre 1.

cette thèse pour la description des distributions spatiales des nucléons. On décrira ainsi des systèmes pouvant se déformer axialement, octupolairement ou triaxialement. Une nouvelle approche numérique basée sur des algorithmes génétiques pour optimiser les chemins de convergences des méthodes de champ-moyen sera présentée et son efficacité sera discutée. Nous nous focaliserons par la suite, sur l'émergence possible de sous-structures denses au sein des noyaux, les clusters. Dans un premier temps nous introduirons un paramètre de localisation à même de prédire la présence ou l'absence d'agrégat nucléaire sur l'ensemble de la carte des noyaux. Ensuite une mesure de la localisation des nucléons au sein du noyau sera proposée et utilisée pour discuter de l'émergence des clusters. Enfin nous discuterons d'un point de vue microscopique du mécanisme d'apparition des clusters en tant que transition de phase quantique.

Le dernier chapitre portera plus spécifiquement sur la localisation de structures corrélées au sein des noyaux. D'abord dans le cadre d'une approche HFB, nous reviendrons sur l'impact sur la structure nucléaire de l'intensité des corrélations d'appariement et de leurs effets sur les agrégats nucléaires. Ensuite nous étudierons la localisation spatiale des corrélations d'appariement ainsi que les agencements possibles des paires de Cooper formées sous l'effet des corrélations d'appariement. L'influence de la restauration du nombre de particules du système sur l'agencement des paires et la répartition des corrélations seront également discutées. Enfin nous proposerons la première implémentation, dans un cadre relativiste, de corrélations de quartets. Nous discuterons l'effet, pour les noyaux N=Z, de ce nouveau type de corrélations sur la préformation de structure à 4-corps localisés, des clusters- α .

Pour guider la lecture de ce manuscrit, vous trouverez ci-dessous la liste des publications issues de cette thèse ainsi que les références aux chapitres et sections concernées.

Listes des publications

Publiées

1. Localization of pairing correlations in nuclei within relativistic mean field models

R.-D. Lasseri, J.-P. Ebran, E. Khan, and N. Sandulescu Phys. Rev. C 98, 014310 (2018) (Chapitre 4. section 4.2)

- Single-particle spatial dispersion and clusters in nuclei J.-P. Ebran, E. Khan, R.-D. Lasseri, and D. Vretenar Phys. Rev. C 97, 061301(R), Rapid Communication (2018) (Chapitre 3. section 3.4.4)
- Axially deformed solution of the Skyrme–Hartree–Fock–Bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis (III) hfbtho (v3.00)
 R. Navarro-Perez N.Schunck, R.-D. Lasseri, C. Zhang, J. Sarich Computer Physics Communications, Volume 220 (2017) (Chapitre 3. section 3.2.1)
- 4. Automated generation and evaluation of many-body diagrams. The program ADG (v1.0.0) Bogoliubov many-body perturbation theory.
 P. Arthuis, T. Duguet, A. Tichai, R.-D. Lasseri, J.-P. Ebran Submitted to Computer Physics Communications (2018) (Chapitre 2. section 2.3.1)

A venir

- Density induced quantum phase transition in ¹⁶O
 R.-D. Lasseri, J.-P. Ebran, E. Khan, P. Schuck, M. Girod (Chapitre 2. section 3.5)
- 6. Impact and localization of quartets correlations in nuclei within relativistic mean field models
 R.-D. Lasseri, J.-P. Ebran, E. Khan, and N. Sandulescu (Chapitre 4. section 4.3)
- 7. Toward solutions of Relativistic-Hartree-Boglioubov equations using bio-inspired algorithms for even-even nuclei.
 R.-D. Lasseri, J.-P. Ebran (Chapitre 3. sous-section 3.3.2)

Publications transdisciplinaire

8. Lorentz-symmetry test at Planck-scale suppression with nucleons in a spin-polarized 133Cs cold atom clock
H. Pihan-Le Bars, C. Guerlin, R.-D. Lasseri, J.-P. Ebran, Q.G. Bailey, S. Bize, E. Khan, and P. Wolf
Phys. Rev. D 95, 075026, Editors suggestion (2017) (Conclusions et Annexe I)

Réalité augmentée – Projet NUCLEAR

Dans le cadre d'une initiative de médiation scientifique le développement d'une technologie de réalité augmentée à été initiée pendant cette thèse. Ainsi certaines figures (des Chapitres 3 et 4) ont été "augmentées" et présentent ainsi des animations ou des informations supplémentaires. Pour les visualiser le lecteur peut télécharger l'application mobile à l'adresse http://ipnwww. in2p3.fr/lasseri/nuclear.html, d'autres informations sont disponibles à cette même adresse.

Chapitre 1

Systèmes de fermions en interaction forte

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

Paul Dirac

Sommaire

| 1.1 | Systèr | nes quantiques à N-corps : Éléments de formalisme | 6 |
|-----|--------|---|----|
| | 1.1.1 | Hamiltonien à N-corps | 6 |
| | 1.1.2 | Approximation de particules indépendantes | 6 |
| | 1.1.3 | L'approximation Hartree-Fock | 7 |
| | 1.1.4 | Théorie de la fonctionnelle de la densité | 9 |
| | | Théorème de Kohn-Hohenberg | 9 |
| | | Schéma de Kohn-Sham | 9 |
| | 1.1.5 | DFT en physique nucléaire : Brisures de symétries | 10 |
| 1.2 | Systèr | nes nucléaires : Particularités et singularités | 12 |
| | 1.2.1 | Interaction forte | 12 |
| | | QCD : Chromodynamique quantique | 12 |
| | 1.2.2 | Théories effectives | 13 |
| | | Principe de construction | 13 |
| | | Symétrie chirale | 13 |
| | | Theorie effective chirale χ -EFT | 14 |
| | | Approximation OBE | 17 |
| | 1.2.3 | Interaction forte dans le milieu | 20 |
| | | Méthodes Dirac-Brueckner-Hartree-Fock | 21 |
| | | Méthodes de renormalisation | 23 |
| | 1.2.4 | Dépendance phénoménologique | 26 |
| | | Lagrangien phénoménologique | 27 |
| | | Formes des constantes de couplage | 27 |
| 1.3 | Concl | usions | 29 |
| 1.4 | Référe | ences | 29 |

1.1 Systèmes quantiques à N-corps : Éléments de formalisme

1.1.1 Hamiltonien à N-corps

Le noyau atomique est défini comme un assemblage mésoscopique de nucléons, les protons et neutrons, particules quantiques non-élémentaires de nature fermionique. Ces derniers sont confinés par une force effective résultante de l'interaction forte s'établissant entre leurs degrés de liberté internes. Cette force dite forte, particulièrement complexe à décrire, est attractive pour des distances inter-nucléons supérieures à 1.2 fm et présente un comportement répulsif pour des distances inférieures. La nature et l'origine de cette force fera l'objet d'une étude détaillée en section 1.2. Comprendre la structure nucléaire revient à décrire la dynamique des nucléons, et par conséquent à proposer une méthode de résolution du problème quantique à N-corps. La dynamique des systèmes nucléaires est encodée dans leur Hamiltonien qui, en toute généralité, peut s'exprimer :

$$H = T + V = \sum_{i=1}^{N} t_i + \sum_{i < j} V^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i < j < k} V^{(3)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots + V_{\text{ext}} \quad (1.1)$$

Ici, \mathbf{r}_i désigne la coordonnée spatiale, t_i représente l'opérateur cinétique libre du système, $V^{(2)}$ représente l'interaction nucléaire à 2-corps, $V^{(3)}$ l'interaction à 3-corps, V_{ext} modélise une interaction extérieure. Tout l'enjeu des approches microscopiques consiste à extraire de l'Hamiltonien l'information minimale nécessaire au calcul des observables du système, une extraction répondant au nom de problème à N-corps. Or dès que le nombre de particules dépasse quelques unités (typiquement 3 ou 4) ou que la complexité de l'interaction augmente, on ne peut que très difficilement exhiber des solutions exactes aux equations d'Hamilton-Jacobi, lesquelles permettent d'obtenir l'expression de la fonction d'onde $|\Psi\rangle$ du système. Pour être à même de décrire un système nucléaire il faut par conséquent proposer des méthodes de résolution approchées de ce problème.

1.1.2 Approximation de particules indépendantes

A priori, une approximation permettant de résoudre les équations du mouvement d'un système à N-corps quantique revient à exhiber une application injective ¹ d'une théorie en interaction vers une théorie auxiliaire de particules indépendantes. Le remplacement du système en interaction par ce système auxiliaire est un processus hautement non-trivial illustré en Figure 1.1. Toutefois dans ce cadre, toutes les observables peuvent se calculer grâce à la connaissance de la matrice-densité à un corps, quantité dont la complexité est bien moindre que celle caractérisant une matrice densité à N-corps. De prime abord ce remplacement semble effectivement incongru au vu de l'éminente complexité du problème nucléaire mais surtout de part l'existence du cœur dur répulsif de la force forte. Pourtant l'utilisation de cette approximation permet la compréhension de nombreux phénomènes dans le noyau. Ainsi la mise en évidence d'effets de couches par des expériences de diffusion Coulombienne d'électrons est cohérente avec un modèle de protons indépendants, évoluant dans un potentiel central à un corps. D'autre part les profils de densité nucléaire, obtenus eux aussi par diffusion d'électrons (de plus faible énergie), correspondent également aux profils de la partie locale de la densité à un corps. Si ce modèle de particules indépendantes semble ne se justifier qu'a posteriori, on peut cependant émettre l'hypothèse qu'au

^{1.} Une application est injective si tout élément de son ensemble d'arrivée a au plus un antécédent dans l'ensemble de départ.

sein du noyau la force ressentie par les nucléons est différente de l'interaction nue entre deux nucléons isolés. Autrement dit les nucléons du noyau agissent comme un écran vis-à-vis de l'interaction, ou encore le milieu renormalise le cœur dur répulsif. Ce phénomène peut être mis en avant en étudiant la diffusion de neutrons au sein du noyau. Nous discuterons plus précisément des manières de prendre en compte cette renormalisation au travers des méthodes de Brueckner ou des techniques du groupe de renormalisation de similarité (SRG) en section 1.2.3. Cet écrantage de l'interaction vient réduire la magnitude de l'interaction à courte portée ce qui augmente le libre parcours moyen des nucléons au sein du noyau. Cette augmentation du libre parcours moyen peut se voir comme traduisant une plus grande indépendance de chaque nucléon au sein du noyau[Mot96].



Particules en interaction Particules indépendantes

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

1.1.3 L'approximation Hartree-Fock

Pour un système fermionique, la méthode Hartree-Fock (HF) fournit une représentation optimale (au sens variationnel) en termes de particules indépendantes. Elle consiste à remplacer la fonction d'onde totale du système par un determinant de Slater rendant compte de la nature fermionique des nucléons en assurant l'antisymétrisation correcte du système :

$$\Phi_{\text{Slater}} = \begin{vmatrix} \psi_1(r_1, \sigma_1, \tau_1) & \psi_2(r_1, \sigma_1, \tau_1) & \dots & \psi_N(r_1, \sigma_1, \tau_1) \\ \psi_1(r_2, \sigma_2, \tau_2) & \psi_2(r_2, \sigma_2, \tau_2) & \dots & \psi_N(r_2, \sigma_2, \tau_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(r_N, \sigma_N, \tau_N) & \psi_2(r_N, \sigma_N, \tau_N) & \dots & \psi_N(r_N, \sigma_N, \tau_N) \end{vmatrix}$$
(1.2)

où les ψ_i sont les fonctions d'ondes des particules indépendantes, distinguées par ses coordonnées spatiales r_i , sont spin σ_i et son isospin τ_i . En seconde quantification, cette fonction d'onde s'écrit comme un état produit agissant sur le vide de particules :

$$\Phi_{\text{Slater}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \prod_{i}^{N} a_{i}^{\dagger} \left| 0 \right\rangle \tag{1.3}$$

où a_i^{\dagger} dénote l'opérateur création de particule dans la base Hartree-Fock. La densité à un corps du système s'exprime comme :

$$\rho_{ji} = \langle \Phi_{\text{Slater}} | c_i^{\dagger} c_j | \Phi_{\text{Slater}} \rangle = \sum_{\sigma \tau} \int d^3 r \psi_i^* (r \sigma \tau) \psi_j (r \sigma \tau)$$
(1.4)

où les opérateurs $\{c_i^{\dagger}, c_i\}$ dénotent les opérateurs création et annihilation dans une base arbitraire de l'espace de Hilbert à une particule \mathcal{H}_1 . Dans le cas d'un système décrit par un déterminant de Slater sa matrice densité à N corps, qui encode toute l'information du système, de même que toutes les matrices densités réduites s'expriment à partir de la matrice densité à 1 corps (1.4). La connaissance de cette matrice suffit donc à encoder toute l'information du système. Comme cas particulier l'énergie dépendra donc uniquement de la matrice densité à 1-corps. Le formalisme adapté pour décrire le système est celui de la seconde quantification, permettant d'écrire les opérateurs en termes de chaînes d'opérateurs création et annihilation $\{c_k, c_k^{\dagger}\}$. L'Hamiltonien à N-corps (1.1) s'exprime en seconde quantification dans une base arbitraire sur \mathcal{H}_1 .

$$H = \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle c_i^{\dagger}c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij|v|\tilde{k}l\rangle c_i^{\dagger}c_j^{\dagger}c_lc_k + \dots$$
(1.5)

Le tilde traduisant la prise en compte de l'antisymètrisation inhérente à la nature fermionique du système. L'énergie associée E_{HF} devient une fonctionnelle de la matrice densité à 1-corps et est définie comme

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

Enfin l'état-fondamental dans l'approximation HF s'obtient en utilisant le principe variationnel de Rayleigh-Ritz sur les états de particules indépendantes[Rit09] [RS80], avec comme contrainte de garder une matrice densité idempotente.

$$\delta\left[\langle \Phi|H|\Phi\rangle - \operatorname{Tr}\left(\Lambda(\rho^2 - \rho)\right)\right] = 0 \tag{1.7}$$

Cette approche, bien que ne capturant pas toutes les corrélations nécessaires à la bonne description d'un système de particules en interaction, remporte de nombreux succès en physique moléculaire ou en chimie quantique. Malheureusement une application directe de l'approximation HF à la physique nucléaire échoue à décrire les propriétés du noyau ne serait-ce que qualitativement. En effet la forme très particulière de l'interaction nucléaire (en particulier son cœur dur) représentée en figure (1.2) cause une divergence ultraviolette. En effet la contribution directe au potentiel



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

HF s'exprime en représentation coordonnées :

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

Il apparaît clairement que la contribution provenant de la région située à une distance inférieure au cœur dur est divergente. En effet en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, la contribution de Hartree diverge dés lors que $\rho(\mathbf{r'}) \neq 0$ pour des valeurs de **r'** inférieures au cœur dur, ce qui est le cas pour la quasi-totalité des noyaux². Ce qui exclut dans ce cadre l'étude du noyau atomique en partant directement de l'Hamiltonien décrivant l'interaction nucléaire nue. Pour pallier ce problème majeur, les physiciens nucléaires ont introduit le concept d'Énergie Fonctionnelle de la Densité (EDF). Conceptuellement proche des méthodes fonctionnelles de la densité (Density Fonctional Theory – DFT), elle en diffère factuellement. Pour comprendre au mieux la philosophie motivant les techniques EDF, il est nécessaire de présenter quelques éléments de formalisme de la DFT.

1.1.4 Théorie de la fonctionnelle de la densité

Théorème de Kohn-Hohenberg

Une des méthodes les plus efficaces et élégantes pour résoudre le problème électronique à N-corps quantique porte le nom de théorie de la fonctionnelle de la densité. Cette approche est extrêmement utilisée dans diverses branches de la physique ou de la chimie pour décrire des systèmes électroniques à N-corps (solides, molécules, atomes etc...). Le concept fondamental à l'origine de cette théorie est postulé dès 1964 par Hohenberg et Kohn [HK64]. Les observables de l'état fondamental du système peuvent êtres représentées par des fonctionnelles de la densité de ce même état fondamental.

Au lieu de considérer $d \cdot N$ degrés de liberté à minima, (correspondant à la seule partie spatiale d'un espace à d dimensions) on n'en conserve plus que d au travers de la seule densité du système. Le premier théorème de Kohn-Hohenberg stipule l'existence d'une fonctionnelle $F[\rho]$ définie par

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

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

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

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

Schéma de Kohn-Sham

Un schéma de construction systématique fut proposé par Kohn et Sham [KS65]. La première étape de cette méthode suppose que la densité d'un système fermio-

^{2.} Hormis les quelques noyaux-bulles

nique en interaction peut être identique à celle d'un système fictif de particules indépendantes baignant dans un potentiel externe effectif v_{KS} . La fonction d'onde de ce système auxiliaire peut-être écrite sous la forme d'un determinant de Slater et est solution de l'équation de Kohn-Sham à un corps :

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

Sous cette hypothèse la fonctionnelle de l'énergie totale (1.9) se sépare à présent en deux parties, cinétique et interaction selon :

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

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

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

Enfin le terme $E_{\text{EC}}[\rho]$ encode le terme d'échange et les corrélations supplémentaires non-prises en compte dans (1.13). Négliger ce terme nous fait retomber sur l'approximation de Hartree. La difficulté principale dans l'établissement d'une fonctionnelle réside à présent dans la construction de la fonctionnelle échange-corrélations

$$E_{\rm EC}[\rho] = \int d^3 \mathbf{r} \, \mathcal{E}_{\rm EC} \tag{1.14}$$

Dans le cadre de cette étude, nous utiliserons une approximation qui consiste à considérer que le terme \mathcal{E}_{EC} ne dépend que de la densité locale. Les méthodes de type Kohn-Sham couplés à l'approximation de linéarisation précédent ont permis de nombreuses avancées en chimie quantique ou en physique atomique. Son application à la description de systèmes nucléaire présente toutefois des difficultés supplémentaires.

1.1.5 DFT en physique nucléaire : Brisures de symétries

Les méthodes EDF furent introduites avec pour objectif spécifique la description d'un système de nucléons auto-confinés par force forte. Conceptuellement il s'agit à l'instar de la DFT, de remplacer l'étude du problème à N-corps en interaction par celle de l'énergie fonctionnelle de la densité (EDF). Cependant le théorème d'Hohenberg-Kohn dans sa version initiale ne s'applique qu'à des systèmes fermioniques formant un état lié sous l'influence d'un potentiel externe. Par conséquent les bases initiales des méthodes EDF sont empiriques et ne sont pas totalement justifiables mathématiquement. Il est important de noter que des efforts dans le but de formaliser l'analogue de (1.9) ont permis d'en proposer un équivalent tardif dans le référentiel intrinsèque du noyau [Mes11], [MBS09]. Pour autant les méthodes EDF continuent de présenter une particularité majeure creusant la différence avec la DFT. Les systèmes nucléaires sont le siège de phénomènes coopératifs tels que la superfluidité ou la déformation. Par exemple, il faut être à même de prendre en compte les corrélations d'appariement à l'œuvre au sein du noyau. Ces corrélations sont à l'origine [Bro73] d'un grand nombre de phénomènes dont les différences des masses et rayons entre les noyaux pairs et impairs [DMN⁺01], ou encore des valeurs de moment angulaire s'éloignant du modèle du rotor rigide dans le cas superfluide. Pareillement il faut simultanément pouvoir décrire la nature anisotrope des noyaux atomiques. Cette anisotropie se traduit par l'apparition de structures remarquables dans leur spectre d'excitation signant la déformation du noyau [CJTW70]. Or ces phénomènes collectifs ne se laissent pas



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



FIGURE 1.4 – Spectre d'excitation du ²³⁸Pu, présentant une structure de bandes rotationnelles, c'est à dire dont les niveaux d'énergies s'agencent proportionnellement à un facteur J(J+1) J étant le moment angulaire de l'état considéré. Il s'agit d'un signe de la déformation du système. Les énergies (à gauche du spectre) sont données en keV

capturer par un déterminant de Slater. Toutefois il est possible d'incorporer ces corrélations tout en gardant les avantages d'une description en termes de particules indépendantes si l'on relâche la préservation des symétries du système. Ainsi le traitement des corrélations statiques, est intrinsèquement liée à la notion de brisure de symétrie de l'Hamiltonien initial. Dans le cas de l'appariement, il s'agit de briser une symétrie unitaire représentée dans le cadre de la théorie des groupes, par le groupe U(1)dont l'opérateur de Casimir correspond au nombre de particules élevé au carré, \hat{N}^2 . De même, la déformation est associée au groupe SO(3) dont le Casimir correspond au carré de son moment angulaire \hat{J}^2 . Cette brisure de symétrie, permet de rendre compte des corrélations associées à des modes collectifs comme l'appariement ou la déformation nucléaire. Elle s'effectue en construisant un vide de quasi-particules venant remplacer le vide de particule indépendante (1.3), ce nouveau vide de référence brise les symétries initiales du système. On parle dans ce cas d'énergie fonctionnelle de la densité associée à ce vide de référence SR-EDF (Single Reference EDF). Toutefois le théorème d'Hohenberg-Kohn et le schéma de Kohn-Sham, ne sont formulés que dans un cadre préservant les symétries initiales du problème[G93], on ne peut par conséquence établir de lien formel direct entre SR-EDF et DFT. Néanmoins il est possible et nécessaire de restaurer les symétries brisées par des méthodes de mélanges des configurations SR-EDF, ce mélange donne naissance a un formalisme dit de multi références (MR-EDF) qui permet de ré-établir un semblant de lien avec un formalisme *ensemble-DFT* [Fil16]. Le formalisme de ces brisures et restauration de symétries sera exposé en chapitre 2 et 3.

1.2 Systèmes nucléaires : Particularités et singularités

1.2.1 Interaction forte

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

QCD : Chromodynamique quantique

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

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = \bar{\psi}_i (i\gamma^\mu \mathcal{D}_\mu - m_i)\psi_i - \frac{1}{4}\mathcal{G}^a_{\mu\nu}\mathcal{G}^{\mu\nu}_a$$
(1.15)

Cette densité covariante est fonction

- Des champs quarkoniques ψ_i des N_s différentes saveurs, décrites dans le cadre du modèle standard par le groupe $SU(N_s)_{\text{Saveur}}$.
- γ^{μ} sont les matrices de Dirac.
- La dérivée covariante

$$\mathcal{D}_{\mu} = \partial_{\mu} - igA^a_{\mu}t_a \tag{1.16}$$

induite par les champs gluoniques A^a_{μ} se transformant selon la représentation adjointe de $SU(3)_{\text{Couleur}}$. t^a sont les générateurs de de ce même groupe (a allant de 1 à 8) et g est la constante de couplage de cette théorie de jauge.

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

$$\mathcal{G}^a_{\mu\nu} = \partial_\mu A^a_\nu - \partial_\nu A^a_\mu + g f_{\rm abc} A^b_\mu A^c_\nu \tag{1.17}$$

— Les N_s masses m_i des quarks des différentes saveurs.

En vertu de la brisure de l'invariance d'échelle, la constante de couplage g dépendent de la résolution à laquelle on observe le phénomène. Dans le cadre de la physique nucléaire, l'échelle d'observation spatiale caractéristique est de l'ordre de quelques fm et les énergies typiques rencontrées en structure nucléaire sont de l'ordre de quelques MeV. Aussi on peut ne prendre en compte que les quarks up et down (u et d) au vu de la séparation d'échelle entre les masses de ces deux quarks qui est de l'ordre de quelques MeV et de celles des autres quarks dont la masse varie de quelques centaines de MeV pour le quark strange à quelques GeV pour les quarks lourds. Toutefois à l'échelle nucléaire, le couplage entre quarks et gluons est trop intense pour permettre un traitement perturbatif de la théorie. Dans ce régime la structure de la QCD devient particulièrement complexe, se caractérisant par un vide non-trivial et par le confinement de couleurs des quarks au sein de hadrons. La non-linéarité de cette théorie rend, dans l'état actuel des connaissances, impossible tout traitement analytique. Pour

étudier des observables dans ce régime non perturbatif, une formulation discrétisée dans l'espace et le temps de la QCD[Wil74] [CR83] (Lattice QCD) permet de traiter la théorie. Ce qui permet d'obtenir des résultats majeurs à l'échelle des nucléons, permettant d'obtenir leurs masses mais également aux échelles de la physique nucléaire avec l'obtention de potentiels nucléons-nucléons [IAD⁺12]. Cependant les calculs de QCD sur réseau ont un coût numérique extrême et sont aujourd'hui très loin de permettre une description précise et satisfaisante de la phénoménologie nucléaire [BDOS11].

1.2.2 Théories effectives

Principe de construction

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

- La symétrie de couleur respectée exactement, mais masquée par le confinement au sein des hadrons.
- L'invariance de jauge électromagnétique.
- L'invariance de Lorentz en imposant la covariance du formalisme.
- La symétrie chirale.

Symétrie chirale

Revenons à présent sur la symétrie chirale qui joue un rôle primordial dans le cadre de QCD dans le cas ou l'on ne considère que deux saveurs (les quarks u et d). Dans un premier temps dans la limite chirale, où l'on considère les quarks comme des particules de masse nulle³, on peut réécrire la densité lagrangienne de QCD (1.15)

^{3.} La masse des quarks, issue de la brisure de la symétrie électrofaible traduite par leurs couplages aux champ de Higgs, génère un terme massif $m_q \bar{\phi}_q \phi_q$ brisant explicitement la symétrie chirale

[Wil02].

$$\mathcal{L} = \phi_q i \not\!\!\!D \phi_q + \mathcal{L}_{\text{gluons}} \tag{1.18}$$

où $\phi_q = \begin{pmatrix} \phi_u \\ \phi_d \end{pmatrix}$ est un spineur de Dirac associé aux deux quarks. Ici la notation de Feynman est adoptée : $D = \gamma^{\mu} D_{\mu}$ où D_{μ} est la dérivée covariante introduite précédemment. On peut décomposer le spineur en ses composantes d'hélicité droite (D) et gauche (G).

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

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

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

Theorie effective chirale χ -EFT

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

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

Ou

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

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



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

A titre d'exemple le lagrangien de Weinberg développé à l'ordre 2 du champ pionique[Wei68], rend compte des trois termes de (1.21), et respecte toutes les symétries mentionnées précédemment

$$\mathcal{L}_{\chi-\text{EFT}} = \bar{\psi}[i\partial \!\!\!/ - M]\psi + \frac{1}{2}\partial_{\mu}\pi\partial^{\mu}\pi + \frac{g_{\pi}}{2M}\bar{\psi}\gamma_{\mu}\gamma_{5}\tau\psi\partial^{\mu}\pi - \frac{1}{2}\bar{\psi}\gamma_{\mu}\tau\psi[\pi\times\partial^{\mu}\pi]$$
(1.22)

où ψ est le spineur représentant un nucléon, M la masse nucléonique, π le champ pionique et τ une matrice qui paramétrise les transformations d'isospin. On peut séparer l'interaction effective en trois zones de différentes portées. Plus le nombre de pions échangés augmente, plus leur masse invariante augmente et plus la portée de l'interaction résultante sera faible.

 La partie longue portée de l'interaction correspond à l'échange d'un pion (décorrélé à l'ordre le plus bas) qui est représentée en Figure 1.6.



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

C'est ce terme qui donne naissance au potentiel attractif d'échange à un pion (OPEP One Pion Exchange Potential), responsable des termes spins-spins et tenseur c'est le terme dominant pour des distance supérieures à $\simeq 2.5$ fm[BH60].

— La partie à moyenne portée qui peut être décrite en termes d'échanges de 2pions corrélés. Elle est représentée en Figure 1.7 (ne pouvant être absorbés ou transformés en diagramme de la classe précédente).



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

— La partie à courte portée, le cœur dur de l'interaction, est la plus complexe et elle correspond à l'ensemble des échanges de 3 pions corrélés ou plus et est représentée en Figure 1.8 :



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

A partir de cette interaction de remarquables résultats ont pu êtres obtenus et sont représentés en figure 1.9, à la fois dans le cadre d'étude de l'équation d'état de la matière nucléaire [HK17] et pour certains noyaux atomiques légers [NGV⁺07]. Toutefois la forte dépendance dans le schéma de *power-counting* nuit à l'universalité de ces approches.



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

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

Approximation OBE

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



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

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


FIGURE 1.11 – Potentiel central d'interaction nucléon-nucléon en termes d'échange de mésons

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



FIGURE 1.12 – Spectre des désintégrations $\pi - \pi$ dans le cadre d'une collision or-or à 200GeV/nucléon. En rouge une distribution de Breit-Wigner matérialisant la présence d'une résonance ; le méson ρ [DtSC12]

A contrario, la contribution provenant du secteur scalaire-isoscalaire n'est pas matérialisée par une résonance dans le vide, ce qui traduit la virtualité du méson σ , introduit pour rendre compte de l'interaction dans ce canal. Néanmoins, des études plus récentes de diffusion de pions dans le milieu ont permis de montrer l'existence d'une résonance qui correspond à ce dernier méson (Figure 1.13).



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

On peut écrire le lagrangien effectif dans l'approximation OBE sans perte de généralité.

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

Plus précisément

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

$$\mathcal{L}_{\mathbf{N}} = \psi(i\partial \!\!\!/ - M)\psi \tag{1.24}$$

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

- Les bosons vecteurs des différentes portées de l'interaction se distinguent par leurs masses, leur spin parité et leur isospin, notés (J^{π},T) . Dans un souci de naturalité et de simplicité on introduit un minimum de champs effectifs[Wal86] :
 - Le 4-potentiel électromagnétique A_μ, permettant de prendre en compte les échanges de photons responsables de l'interaction colombienne
 - Un méson vecteur-isovecteur $\vec{\rho}^{\mu}$ (1⁻, 1) de masse m_{ρ}
 - Le méson vecteur-isoscalaire ω^{μ} $(1^{-}, 0)$ de masse m_{ω}
 - Un méson scalaire-isoscalaire σ (0⁺, 0) de masse m_{σ}
 - Un méson pseudo scalaire-isovecteur, $\vec{\pi}$ (0⁻, 1) de masse m_{π}

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

$$\mathcal{F}^{\mu\nu} = \partial^{\mu}\mathcal{A}^{\nu} - \partial^{\nu}\mathcal{A}^{\mu}$$

$$\Omega^{\mu\nu} = \partial^{\mu}\omega^{\nu} - \partial^{\nu}\omega^{\mu}$$

$$\vec{P}^{\mu\nu} = \partial^{\mu}\vec{\rho}^{\nu} - \partial^{\nu}\vec{\rho}^{\mu}$$

(1.25)

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

$$\mathcal{L}_{m} = \frac{1}{2} \left[(\partial_{\mu} \sigma \partial^{\mu} \sigma - m_{\sigma}^{2} \sigma^{2}) + (\partial_{\mu} \vec{\pi} \partial^{\mu} \vec{\pi} - m_{\pi}^{2} \vec{\pi}^{2}) - (\Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} - m_{\omega}^{2} \omega_{\mu} \omega^{\mu}) - (\mathcal{F}^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu}) - (\vec{P}_{\mu\nu} \vec{P}^{\mu\nu} - m_{\rho}^{2} \vec{\rho}_{\mu} \vec{\rho}^{\mu}) \right]$$
(1.26)

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

$$\psi \Gamma_i O_{\tau_i} \psi \tag{1.27}$$

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

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -g_{\sigma}\bar{\psi}\sigma\psi - i\underbrace{g_{\pi}^{PS}\bar{\psi}\gamma_{5}\vec{\pi}\cdot\vec{\tau}\psi}_{\text{Pseudo Scalaire}} - g_{\omega}\bar{\psi}\gamma_{\mu}\omega^{\mu}\psi - g_{\rho}\bar{\psi}\gamma_{\mu}\vec{\rho}^{\mu}\vec{\rho}^{\mu}\cdot\vec{\tau}\psi - e\bar{\psi}\gamma_{\mu}\mathcal{A}^{\mu}\psi$$
(1.28)

si l'on considère un couplage pseudo-saclaire (PS), soit

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -g_{\sigma}\bar{\psi}\sigma\psi - \underbrace{g_{\pi}^{PV}\bar{\psi}\gamma_{5}\gamma_{\mu}\partial^{\mu}\vec{\pi}\cdot\vec{\tau}\psi}_{\text{Pseudo Vecteur}} - g_{\omega}\bar{\psi}\gamma_{\mu}\omega^{\mu}\psi - g_{\rho}\bar{\psi}\gamma_{\mu}\vec{\rho}^{\mu}\vec{\rho}^{\mu}\cdot\vec{\tau}\psi - e\bar{\psi}\gamma_{\mu}\mathcal{A}^{\mu}\psi \qquad (1.29)$$

si l'on considère un couplage pseudo vecteur (PV).

Par la suite on ajuste les constantes de couplages de (1.29) de manière à ce que les déphasages des amplitudes de diffusion nucléons-nucléons reproduisent correctement l'expérience. Toutefois la simplification inhérente à l'approximation OBE ne va pas sans contrepartie, on perd en effet toute information sur la hiérarchie des contributions provenant de χ -EFT, ce qui se traduit par une altération du lien établi avec QCD. Le potentiel de Bonn[Mac01] est un exemple de paramétrisation obtenue dans le cadre de l'approximation OBE.

1.2.3 Interaction forte dans le milieu

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

Méthodes Dirac-Brueckner-Hartree-Fock

Pour obtenir une représentation de l'état fondamental des systèmes nucléaires, il faut prendre en compte les effets du milieu sur l'interaction nue. Dans le cadre des méthodes Dirac-Brueckner, les nucléons sont vus comme des particules habillées par les interactions à deux corps entre le nucléon étudié et les particules l'entourant. La prise en compte de ces interactions est fondamentale pour rendre compte en particulier du cœur dur de l'interaction (partie répulsive à très courte portée). L'équation auto-cohérente de Bethe-Salpeter fournit un formalisme covariant pour le traitement général d'états liés à deux corps [SB51]. L'élément central de cette équation est la matrice T représentant l'ensemble des interactions irréductibles à deux corps dans le milieu, Γ . Le contenu de cette matrice est déterminé par une sommation cohérente de toutes les contributions de l'interaction à deux particules (Figure 1.14).



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

Plus précisément, on se place dans l'approximation ou l'on ne considère que les contributions dites "en échelle" des diagrammes contribuant à l'interaction à deux corps. On ne garde ainsi que les diagrammes correspondant à l'échange d'une particule (Figure 1.15).

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

$$T = V + i \int VQGGT \tag{1.30}$$

où V est le potentiel nucléon-nucléon nu issu de (1.29). L'opérateur de Pauli Q, permet de prendre en compte l'influence du milieu au travers de l'application du principe de Pauli, en projetant les états de diffusion intermédiaire hors de la mer de Fermi⁴. Enfin les états des nucléons virtuels (hors couche de masse) sont représentés par le propagateur à deux corps iGG.



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

G est la fonction de Green exacte du nucléon dans le milieu obéissant à l'équation auto-cohérente de Dyson (représentée graphiquement en Figure 1.16).

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G \tag{1.31}$$

 G_0 étant le propagateur du nucléon libre, l'influence du milieu est représenté par la self-energy Σ

^{4.} L'ensemble des états d'énergie négative représentant artificiellement le vide de la théorie



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



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

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

$$\Sigma = \int_{F} \left(Tr[GT] - GT \right) \tag{1.32}$$

Les trois équations ((1.30)-(1.32)) forment un problème triplement auto-cohérent pouvant être résolu itérativement. Physiquement la matrice T a pour effet d'introduire les corrélations du milieu dans une fonction d'onde initialement décorrélée. La prise en compte de ces corrélations de courte portées liées au cœur dur est fondamentale pour l'obtention d'états liés. Le cœur dur génère comme nous l'avons vu des éléments diagonaux du Hamiltonien fortement répulsif (divergents sans régularisation) empêchant la formation d'état liés. Plus précisément, si l'on ne prend pas en compte correctement ces corrélations, les éléments de matrices associés au cœur dur divergeraient, la fonction d'onde nucléon-nucléon (en rouge en Figure 1.17) ne s'annulant pas pour des distances relatives inter-nucléoniques inférieures à l'extension du cœur dur. L'inclusion de corrélations de courte portée au travers de la matrice T permet d'augmenter l'amplitude de la fonction d'onde nucléon-nucléon (en bleu sur la même figure), par rapport à la fonction décorrélée, aux distances inter-nucléoniques r pour lesquelles l'interaction est attractive. Cette technique permet surtout de drastiquement réduire l'amplitude de la fonction d'onde pour les distances inférieures au cœur dur ce qui permet de régulariser les divergences des éléments de matrices autorisant un traitement dans le cadre de l'approximation Hartree-Fock. L'approche DBHF (dans sa version relativiste) parvient notamment à reproduire correctement les propriétés de saturation de la matière nucléaire (Figure 1.18.) Toutefois l'auto-cohérence globale de ce problème est particulièrement lourde numériquement et ne peut être appliquée qu'avec difficultés pour l'étude des noyaux finis[SLM+17]. Une autre méthode, plus moderne et plus générale se fonde sur l'application des techniques du groupe de renormalisation pour prendre en compte les corrélations discutées précédemment.



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



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

Méthodes de renormalisation

Le principe des techniques issues de l'étude du groupe de renormalisation, revient à garantir que les degrés de liberté traités correspondent à l'échelle d'observation considérée. Le cœur dur et la force tenseur de l'interaction génèrent des modes de forte et faible impulsion. Modes que l'on peut mettre en évidence en prenant la transformée de Fourier/Bessel de l'interaction vers l'espace des impulsions. A priori au vu des résultats de diffusions nucléon-nucléons, seuls les modes de faible impulsion ($< 2 \text{ fm}^{-1}$) devraient contribuer aux observables nucléaires. Toutefois les fluctuations quantiques du système couplent fortement ces modes entres eux, ce qui se traduit par la présence de termes extra-diagonaux dans l'Hamiltonien. C'est ce couplage, illustré en Figure 1.19, qui est à la base de fortes corrélations et du caractère non perturbatif du problème. En effet il est de facto impossible de tronquer trivialement le Hamiltonien nucléaire au vu de l'intensité de ce couplage, et sans troncation il est impossible d'envisager une diagonalisation exacte de cet Hamiltonien. Le but des techniques de renormalisation dans ce cadre, est de découpler les composantes d'impulsion faible des modes d'impulsion élevée pour permettre une troncation et un traitement du nouvel Hamiltonien ainsi obtenu. Dans le cadre des méthodes dites SRG (Similarity Renormalization Group), pour réaliser ce découplage, on applique une transformation unitaire U(s) à l'Hamiltonien du système H (1.1) [Fur12][BFP07].

$$H_s = U(s)HU^{\dagger}(s) = T + V_s \tag{1.33}$$

s est le paramètre de la transformation de renormalisation. En différenciant (1.33) on obtient l'équation dite de flot, quantifiant l'évolution de l'Hamiltonien en fonction du paramètre s :

$$\frac{dH}{ds} = [\eta(s), H_s] \tag{1.34}$$

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

— $\eta(s) = [T, H_s]$ ce choix va tendre à rendre H_s diagonal dans l'espace des impulsions

— $\eta(s) = [T^2, H_s]$ permettant d'obtenir une structure diagonale par bloc.

En choisissant, à titre pédagogique, la première prescription pour $\eta(s)$, on peut décomposer l'équation de flot (1.34) en ondes partielles :

$$\frac{dV_s(k,k')}{ds} = -(k^2 - k'^2)V_s(k,k') + \frac{2}{\pi}\int_0^\infty dq q^2(k^2 + k'^2 - 2q^2)V_s(k,q)V_s(q,k')$$
(1.35)

Pour les éléments extra-diagonaux le premier terme de (1.35) domine et par conséquent

$$V_s(k,k') \simeq V_{s=0}(k,k')e^{-s(k^2-k'^2)^2}$$
(1.36)

Ces termes extra-diagonaux se retrouvent exponentiellement supprimés avec l'augmentation du paramètre de flot, ce qui permet de réaliser le découplage tel que représenté en Figure 1.20.



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

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

$$H_{s=0} = \sum_{ij} T_{ij} a_i^{\dagger} a_j + \frac{1}{4} v_{ijkl}^{(2N)} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_k a_l$$
(1.37)

Une variation du flot de renormalisation à l'ordre un (1.34) revient à rajouter un terme à notre Hamiltonien de départ

$$H_{s} \simeq H_{s=0} + \Delta s[[T, H_{s=0}], H_{s=0}]$$

= $H_{s=0} + \Delta s \left[\sum_{ij} T_{ij} a_{i}^{\dagger} a_{j}, \sum_{ij} T_{ij} a_{i}^{\dagger} a_{j} + \frac{1}{4} \tilde{v}_{ijkl}^{(2N)} a_{i}^{\dagger} a_{j}^{\dagger} a_{k} a_{l} \right]$ (1.38)

Ce terme contient des contributions à 3 ,4, etc... corps artificielles et ne pouvant être réabsorbées. Ces contributions ont pour conséquence d'augmenter de nouveau la complexité du problème et rendent nécessaire une nouvelle troncation arbitraire du Hamiltonien, générant d'autres spuriosités difficilement traitables (perte de l'unitarité du système)[BFS10].

1.2.4 Dépendance phénoménologique

Pour permettre des calculs d'observables sur l'ensemble de la carte des noyaux nous devons alléger le calcul en dégradant encore un peu le lien avec l'interaction initiale en construisant un lagrangien phénoménologique. Pour pouvoir rendre compte des corrélations induites par le milieu, sans pour autant résoudre les équations DBHF dans leur intégralité, nous allons introduire une dépendance explicite à la densité du système dans les constantes de couplage du Lagrangien. Toutefois cette dépendance n'est nécessairement choisie arbitrairement et peut être dérivée à partir d'une représentation simplifiée de la matrice T[FLW95]. Le principe est d'exhiber une théorie des champs mésoniques dont les vertex d'interaction mésons-nucléons dépendent du milieu en partant de la matrice relativiste de Brueckner construite précédemment (1.30). L'idée est de pousser un cran plus loin le degré d'effectivité de la théorie en sommant certaines contributions provenant des corrélations incluses dans la matrice T exprimée dans le vide, au sein de son analogue T exprimée dans le milieu. Cette sommation s'effectue par le biais d'une nouvelle equation de Bethe-Salpeter :

$$T = V + i \int VQGGT \tag{1.39}$$

$$\mathcal{T} = T - i \int TQGG\mathcal{T} \tag{1.40}$$

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

$$T(1,2) \equiv \xi(1)\Delta(1,2)\xi(2)$$
 (1.41)

$$\mathcal{T}(1,2) \equiv \Xi(1)\Delta(1,2)\Xi(2) \tag{1.42}$$

où :

- $\Delta(1,2)$ est le propagateur mésonique⁵
- $\xi = g_{\mathcal{M}} \times \Gamma_i$ représente le vertex d'interaction méson-nucléon dans le vide

avec $\mathcal{M} = \{\rho, \pi, \omega \sigma\}$ et les matrices de Dirac généralisée $\Gamma_i = \in \{1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_5 \gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}\}$ — Ξ est le vertex d'interaction méson-nucléon dans le milieu

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

$$\Xi = \xi - i \int \Xi Q G G T \tag{1.43}$$

L'équation (1.43) admet une représentation diagrammatique (Figure 1.21) traduisant la prise en compte de toutes les contributions "en échelle".



FIGURE 1.21 – Représentation diagrammatique des contributions à la fonction de vertex dans le milieu Ξ décrite par l'équation (1.43). Les vertex d'interaction dans le vide sont matérialisés par des points les propagateurs mésoniques sont en pointillés et les propagateurs nucléoniques en traits pleins

^{5.} Le propagateur Δ est le même pour T et T, ce qui traduit le fait que l'on considère que les mésons ne sont pas affectés par les effets du milieu

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

$$\Xi(k_F) = \frac{Tr[\Xi QG]}{Tr[\xi QG]} \tag{1.44}$$

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

Lagrangien phénoménologique

On peut à présent reprendre le lagrangien (1.29) en y rajoutant une dépendance explicite des constantes de couplage à la densité du système.

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -g_{\sigma}(\rho_{v})\bar{\psi}\sigma\psi - \frac{f_{\pi}(\rho_{v})}{m_{\pi}}\bar{\psi}\gamma_{5}\gamma_{\mu}\partial^{\mu}\vec{\pi}\cdot\vec{\tau}\psi -g_{\omega}(\rho_{v})\bar{\psi}\gamma_{\mu}\omega^{\mu}\psi - g_{\rho}(\rho_{v})\bar{\psi}\gamma_{\mu}\vec{\rho}^{\mu}\vec{\rho}^{\mu}\cdot\vec{\tau}\psi - e\bar{\psi}\gamma_{\mu}\mathcal{A}^{\mu}\psi$$
(1.45)

où l'on a conservé uniquement la contribution pseudo-vecteur du couplage pionique suivant en cela la prescription de [Ser92]. En effet, le couplage pseudo-scalaire engendre des énergies de très grandes amplitudes ne permettant pas de reproduire les spectres de particules individuelles, tandis que la contribution pseudo-vecteur ne présente pas cette pathologie. Nous faisons également le choix de faire dépendre les constantes de couplage de la densité baryonique ρ_v^{6}

$$\rho_v = \sqrt{j_\mu j^\mu} \tag{1.46}$$

où j_{μ} est le 4-courant baryonique

$$j_{\mu} = \bar{\psi} \gamma_{\mu} \psi \tag{1.47}$$

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

Formes des constantes de couplage

Les ansatz pour les formes des constantes de couplage sont choisis pour leur faculté à reproduire les résultats DBHF[TW99]. Pour les mésons σ et ω ils prennent la forme :

$$g_{\{\sigma,\omega\}}(\rho_v) = g_{\{\sigma,\omega\}}(\rho_{\text{sat}})f_{\{\sigma,\omega\}}(\epsilon)$$
(1.48)

^{6.} On aurait pu choisir de travailler avec une densité scalaire $\rho_s = \bar{\psi}\psi$ mais l'utilisation de ρ_v semble mieux rendre compte de la phénoménologie des noyaux finis et permet un lien plus naturel avec la théorie DBHF[FLW95]

où ρ_{sat} correspond à la densité de saturation de la matière nucléaire et

$$f_i(\epsilon) = a_i \frac{1 + b_i(\epsilon + d_i)^2}{1 + c_i(\epsilon + d_i)^2}, i = \{\sigma, \omega\}$$
(1.49)

où $\epsilon = \frac{\rho_v}{\rho_{\text{sat}}} f_i(\epsilon)$ doit trivialement vérifier $f_i(1) = 1$ De plus plusieurs contraintes peuvent être imposées à (1.49) pour réduire le nombres de paramètres de notre modèle.

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

Par conséquent (1.49) ne dépend plus que de 3 paramètres libres, par exemple b_{σ}, b_{ω} et d_{σ} . Cette paramétrisation permet de rendre compte correctement des corrélations issues des méthodes DBHF (Figure 1.22).



FIGURE 1.22 – Dépendance en densité des constantes de couplages normalisés des mésons σ (à gauche) et ω à droite, les symboles pleins correspondent à des résultats issus de Dirac-Brueckner, la paramétrisation (1.49) est tracée en trait plein, figure issue de [TW99]

Dans le cadre des calculs DBHF il apparait [TW99] que les couplages des mésons ρ et et π décroissent rapidement lorsque l'on se rapproche de la densité de saturation. Aussi pour plus de simplicité on choisit une forme exponentielle pour ces deux constantes :

$$g_{\rho}(\rho_v) = g_{\rho}(\rho_{\text{sat}})e^{(-a_{\rho}(\epsilon-1))}$$
(1.50)

$$f_{\pi}(\rho_v) = f_{\pi}(\rho_{\text{sat}})e^{(-a_{\pi}(\epsilon-1))}$$
(1.51)

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

$$m_{\sigma}, m_{\rho}, m_{\pi}, m_{\omega}$$

$$g_{\rho}(0), f_{\pi}(\rho)(0), a_{\rho}, a_{\pi}$$

$$g_{\omega}(\rho_{\text{sat}}), g_{\sigma}(\rho_{\text{sat}}), b_{\omega}, b_{\sigma}, d_{\sigma}$$
(1.52)

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

$$m_{\rho} = 768.0 \text{MeV}, m_{\omega} = 783.0 \text{MeV}, m_{\pi} = 138.0 MeV$$

 $g_{\rho}(0) = 2.629, f_{\pi}(0) = 1.0$ (1.53)

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

1.3 Conclusions

Dans ce chapitre, les bases du formalisme EDF sont exposées. Nous avons pu voir en quoi cette approche s'inspire de la DFT électronique. Toutefois les différences majeures entres ces deux approches (symétries brisées) empêche une dérivation rigoureuse d'une fonctionnelle adaptée à la physique nucléaire. Aussi pour appliquer ce formalisme à l'interaction forte nous avons discuté de la construction d'une théorie s'inspirant des symétries de QCD, tout en conservant les nucléons comme degrés de liberté élémentaires. Différentes méthodes de traitement de la complexité inhérente à la structure de la force forte ont été présentées dans un cadre relativiste. L'interaction est à présent interprétée comme un échange de mésons entre les nucléons du noyau, échange écranté par le milieu. Ainsi une EDF relativiste phénoménologique permettant un traitement universel des noyaux atomiques a été dérivée. Il est particulièrement remarquable de noter le faible nombre de paramètres libres de ce modèle (8 au total) par rapport à d'autres approches se voulant moins phénoménologiques (ξ -EFT notamment). Dans le prochain chapitre nous repartirons de cette fonctionnelle pour construire explicitement le formalisme permettant un traitement relativiste

1.4 Références

- [ACHS87] H. B. Ai, L. S. Celenza, A. Harindranath, and C. M. Shakin. Effective interaction for relativistic mean-field theories of nuclear structure. *Phys. Rev. C*, 35 :2299–2309, Jun 1987. 26
- [ACSW99] Z. Aouissat, G. Chanfray, P. Schuck, and J. Wambach. Reduced σ meson mass and in-medium s-wave π - π correlations. *Phys. Rev. C*, 61:012202, Nov 1999. ix, 19
- [BDOS11] S.R. Beane, W. Detmold, K. Orginos, and M.J. Savage. Nuclear physics from lattice qcd. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 66(1):1 – 40, 2011. 13
 - [BFP07] S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, and R. J. Perry. Similarity renormalization group for nucleon-nucleon interactions. *Phys. Rev. C*, 75 :061001, Jun 2007. 24
 - [BFS10] S.K. Bogner, R.J. Furnstahl, and A. Schwenk. From low-momentum interactions to nuclear structure. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 65(1):94 – 147, 2010. x, 25
 - [BH60] G. Breit and M.H. Hull. Note on one pion exchange potential. Nuclear Physics, 15:216 – 230, 1960. 16
 - [Bro73] R.A Broglia. The pairing model. *Annals of Physics*, 80(1):60 85, 1973. 10
- [CJTW70] E. Cheifetz, R. C. Jared, S. G. Thompson, and J. B. Wilhelmy. Experimental information concerning deformation of neutron rich nuclei in the $a \sim 100$ region. *Phys. Rev. Lett.*, 25 :38–43, Jul 1970. 10
 - [CR83] David J. E. Callaway and Aneesur Rahman. Lattice gauge theory in the microcanonical ensemble. *Phys. Rev. D*, 28 :1506–1514, Sep 1983. 13
- [DMN⁺01] J. Dobaczewski, P. Magierski, W. Nazarewicz, W. Satuła, and Z. Szymański. Odd-even staggering of binding energies as a consequence of pairing and mean-field effects. *Phys. Rev. C*, 63 :024308, Jan 2001. 10

- [DtSC12] R Debbe and the Star Collaboration. Rho meson diffraction off au nuclei. Journal of Physics : Conference Series, 389(1) :012042, 2012. ix, 18
- [EHM09] E. Epelbaum, H.-W. Hammer, and Ulf-G. Meißner. Modern theory of nuclear forces. *Rev. Mod. Phys.*, 81 :1773–1825, Dec 2009. 14
- [ENG⁺02] E. Epelbaum, A. Nogga, W. Glöckle, H. Kamada, Ulf-G. Meißner, and H. Witała. Three-nucleon forces from chiral effective field theory. *Phys. Rev. C*, 66 :064001, Dec 2002. 27
 - [Fil16] Michael Filatov. Ensemble DFT Approach to Excited States of Strongly Correlated Molecular Systems, pages 97–124. Springer International Publishing, Cham, 2016. 12
 - [FLW95] C. Fuchs, H. Lenske, and H. H. Wolter. Density dependent hadron field theory. *Phys. Rev. C*, 52 :3043–3060, Dec 1995. 26, 27
 - [Fuc04] Christian Fuchs. 4 The Relativistic Dirac-Brueckner Approach to Nuclear Matter, pages 119–146. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004. x, 23
 - [Fur12] R.J. Furnstahl. The renormalization group in nuclear physics. Nuclear Physics B - Proceedings Supplements, 228 :139 – 175, 2012. "Physics at all scales : The Renormalization Group" Proceedings of the 49th Internationale Universitätswochen für Theoretische Physik. 24
 - [G93] Andreas Görling. Symmetry in density-functional theory. *Phys. Rev. A*, 47 :2783–2799, Apr 1993. 11
 - [HK64] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136 :B864–B871, Nov 1964. 9
 - [HK17] J. W. Holt and N. Kaiser. Equation of state of nuclear and neutron matter at third-order in perturbation theory from chiral effective field theory. *Phys. Rev. C*, 95 :034326, Mar 2017. 16
- [IAD⁺12] Noriyoshi Ishii, Sinya Aoki, Takumi Doi, Tetsuo Hatsuda, Yoichi Ikeda, Takashi Inoue, Keiko Murano, Hidekatsu Nemura, and Kenji Sasaki. Hadron-hadron interactions from imaginary-time nambu-bethe-salpeter wave function on the lattice. *Physics Letters B*, 712(4):437 – 441, 2012. 13
 - [KS65] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140 :A1133–A1138, Nov 1965. 9
 - [Mac01] R. Machleidt. High-precision, charge-dependent bonn nucleon-nucleon potential. *Phys. Rev. C*, 63 :024001, Jan 2001. 20
- [MBS09] Jérémie Messud, Michael Bender, and Eric Suraud. Density functional theory and kohn-sham scheme for self-bound systems. *Phys. Rev. C*, 80 :054314, Nov 2009. 10
- [Mes11] Jérémie Messud. Generalization of internal density-functional theory and kohn-sham scheme to multicomponent self-bound systems, and link with traditional density-functional theory. *Phys. Rev. A*, 84:052113, Nov 2011. 10

- [Mot96] B. Mottelson. Nuclear structure, les houches, 1996. 7
- [MP00] H Müther and A Polls. Two-body correlations in nuclear systems. *Pro*gress in Particle and Nuclear Physics, 45(1):243 – 334, 2000. x, 22
- [MS16] R Machleidt and F Sammarruca. Chiral eft based nuclear forces : achievements and challenges. *Physica Scripta*, 91(8) :083007, 2016. ix, 15
- [NGV⁺07] P. Navrátil, V. G. Gueorguiev, J. P. Vary, W. E. Ormand, and A. Nogga. Structure of $a = 10^{\circ}13$ nuclei with two- plus three-nucleon interactions from chiral effective field theory. *Phys. Rev. Lett.*, 99 :042501, Jul 2007. 16
 - [Rit09] Ritz. crll, volume 1909, chapter Über eine neue Methode zur Lösung gewisser Variationsprobleme der mathematischen Physik., page 1. 2018 1909. 135. 8
 - [RS80] P. Ring and P. Schuck. The nuclear many-body problem. Springer-Verlag, New York, 1980. 8
 - [SB51] E. E. Salpeter and H. A. Bethe. A relativistic equation for bound-state problems. *Phys. Rev.*, 84 :1232–1242, Dec 1951. 21
 - [Ser92] B D Serot. Quantum hadrodynamics. Reports on Progress in Physics, 55(11) :1855, 1992. 27
- [SLM⁺17] Shihang Shen, Haozhao Liang, Jie Meng, Peter Ring, and Shuangquan Zhang. Fully self-consistent relativistic brueckner-hartree-fock theory for finite nuclei. *Phys. Rev. C*, 96 :014316, Jul 2017. 22
 - [SW90] L. Sehn and H.H. Wolter. Effective interactions and the equation of state in heavy ion collisions. *Nuclear Physics A*, 519(1):289 – 302, 1990. 27
 - [TW99] S. Typel and H.H. Wolter. Relativistic mean field calculations with density-dependent meson-nucleon coupling. *Nuclear Physics A*, 656(3):331 – 364, 1999. x, 27, 28
 - [Wal86] J. D. Walecka. The Relativistic Nuclear Many-Body Problem. Springer US, Boston, MA, 1986. 19
 - [Wei68] Steven Weinberg. Nonlinear realizations of chiral symmetry. *Phys. Rev.*, 166 :1568–1577, Feb 1968. 15
 - [Wei95] S. Weinberg. The Quantum Theory of Fields. Number vol. 2 in The Quantum Theory of Fields 3 Volume Hardback Set. Cambridge University Press, 1995. 13
 - [Wil74] Kenneth G. Wilson. Confinement of quarks. *Phys. Rev. D*, 10 :2445–2459, Oct 1974. 13
 - [Wil02] Frank Wilczek. QCD In Extreme Conditions, pages 567–636. Springer New York, New York, NY, 2002. 14

Chapitre 2

Traitement relativiste du noyau atomique

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

Erwin Schrödinger

Sommaire

| 2.1 | Description relativiste du système | | |
|------------|---|--|--|
| | 2.1.1 | Équations du mouvement | 35 |
| | | Équations mésoniques | 35 |
| | | Équations nucléoniques | 36 |
| | 2.1.2 | Hamiltonien du système | 36 |
| | 2.1.3 | Secteur nucléonique | 36 |
| | 2.1.4 | Secteur mésonique | 36 |
| | | Densités Hamiltoniennes | 36 |
| | | Dépendance temporelle | 37 |
| | 2.1.5 | Interaction nucléon-nucléon | 37 |
| | 2.1.6 | Hamiltonien du système | 37 |
| | 2.1.7 | Approximation <i>no-sea</i> | 39 |
| | 2.1.8 | Hamiltonien quantifié | 40 |
| 2.2 | Théorie Hartree-Fock | | 40 |
| | | | |
| 2.3 | Prise | en compte des corrélations particules-trous dites de <i>bulk</i> | 41 |
| 2.3 | Prise 2.3.1 | en compte des corrélations particules-trous dites de <i>bulk</i> Méthode perturbative | 41 41 |
| 2.3 | Prise 2.3.1 | en compte des corrélations particules-trous dites de <i>bulk</i> Méthode perturbative | 41 41 41 |
| 2.3 | Prise (2.3.1 | en compte des corrélations particules-trous dites de <i>bulk</i> Méthode perturbative | 41 41 41 42 |
| 2.3 | Prise (2.3.1 | en compte des corrélations particules-trous dites de bulk Méthode perturbative Dérivation algébrique Dérivation diagrammatique Génération automatique | 41 41 42 43 |
| 2.3 | Prise 2.3.1 | en compte des corrélations particules-trous dites de bulk Méthode perturbative Dérivation algébrique Dérivation diagrammatique Génération automatique Programme ADG | 41 41 42 43 46 |
| 2.3 | Prise 2.3.1 2.3.2 | en compte des corrélations particules-trous dites de bulk Méthode perturbative Dérivation algébrique Dérivation diagrammatique Génération automatique Programme ADG Dépendance en densité | 41 41 41 42 43 46 47 |
| 2.3 | Prise 2.3.1 2.3.2 | en compte des corrélations particules-trous dites de bulk Méthode perturbative Dérivation algébrique Dérivation diagrammatique Génération automatique Programme ADG Dépendance en densité Contribution de l'interaction | 41 41 41 42 43 46 47 47 |
| 2.3 | Prise (2.3.1) 2.3.2 | en compte des corrélations particules-trous dites de bulk Méthode perturbative Dérivation algébrique Dérivation diagrammatique Génération automatique Programme ADG Dépendance en densité Contribution de l'interaction Équations Hartree relativistes | 41 41 41 42 43 46 47 47 49 |
| 2.3 | Prise (2.3.1 2.3.2 2.3.3 | en compte des corrélations particules-trous dites de bulk Méthode perturbative Dérivation algébrique Dérivation diagrammatique Génération automatique Programme ADG Dépendance en densité Contribution de l'interaction Équations Hartree relativistes Conclusions | 41 41 41 42 43 46 47 47 49 51 |
| 2.3 2.4 | Prise (2.3.1 2.3.2 2.3.3 Corré | en compte des corrélations particules-trous dites de bulk Méthode perturbative Dérivation algébrique Dérivation diagrammatique Dérivation automatique Génération automatique Programme ADG Dépendance en densité Contribution de l'interaction Équations Hartree relativistes Conclusions | 41 41 41 42 43 46 47 47 49 51 52 |
| 2.3 2.4 | Prise (2.3.1 2.3.2 2.3.2 2.3.3 Corré 2.4.1 | en compte des corrélations particules-trous dites de bulk Méthode perturbative Dérivation algébrique Dérivation diagrammatique Dérivation diagrammatique Génération automatique Programme ADG Dépendance en densité Contribution de l'interaction Équations Hartree relativistes Conclusions Introduction | 41 41 41 42 43 46 47 47 49 51 52 52 |
| 2.3 | Prise (2.3.1 2.3.2 2.3.3 Corré 2.4.1 2.4.2 | en compte des corrélations particules-trous dites de bulk Méthode perturbative Dérivation algébrique Dérivation diagrammatique Dérivation diagrammatique Génération automatique Programme ADG Dépendance en densité Contribution de l'interaction Équations Hartree relativistes Conclusions Introduction Représentation | 41 41 41 42 43 46 47 47 49 51 52 52 53 |

| 2.4. | Formalisme de Bogolioubov | | | | |
|-------|---------------------------|--|--|--|--|
| | Approche perturbative | | | | |
| 2.4. | i État BCS projeté | | | | |
| 2.4. | Corrélations de Quartets | | | | |
| | Implémentation pratique | | | | |
| 5 Cor | Conclusions | | | | |
| 6 Réf | Références | | | | |

2.1 Description relativiste du système

Une fois une représentation de l'interaction nucléon-nucléon obtenue, il faut mettre en œuvre les méthodes de traitement du problème à N-corps. En suivant les idées issues du formalisme de la DFT, il faut tout d'abord construire l'Hamiltonien décrivant le système.

2.1.1 Équations du mouvement

Avec comme point de départ le Lagrangien du système nucléaire, on définit l'action S associée à ce lagrangien comme :

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

La dynamique du système peut-être dérivée en minimisant l'action $\delta S = 0$, conduisant aux équations d'Euler-Lagrange.

Équations mésoniques

Pour les degrés de libertés mésoniques les équations d'Euler-Lagrange ont pour forme :

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

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

$$\partial_{\mu}F^{\mu\nu} = e\bar{\psi}\gamma^{\nu}\frac{1-\tau_{3}}{2}\psi \qquad (2.3)$$

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

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

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

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

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

$$\Box A^{\mu} = e\bar{\psi}\gamma^{\nu}\frac{1-\tau_3}{2}\psi \tag{2.8}$$

$$(\Box + m_{\sigma}^2)\sigma = -g_{\sigma}\bar{\psi}\psi \tag{2.9}$$

$$(\Box + m_{\omega}^2)\omega^{\mu} = g_{\omega}\bar{\psi}\gamma^{\nu}\psi \qquad (2.10)$$

$$(\Box + m_{\rho}^2)\vec{\rho}^{\mu} = g_{\rho}\bar{\psi}\gamma^{\nu}\vec{\tau}\psi \qquad (2.11)$$

$$(\Box + m_{\pi}^2)\vec{\pi} = \frac{f_{\pi}}{m_{\pi}}\partial_{\mu}[\bar{\psi}\gamma^5\gamma^{\mu}\vec{\tau}\psi]$$
(2.12)

35

Équations nucléoniques

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

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho_v} \frac{\partial \rho_v}{\partial \bar{\psi}} = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \bar{\psi})}$$
(2.13)

et permettent d'obtenir l'équation de Dirac dont les spineurs nucléoniques ψ sont solutions :

$$[i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - M + \Sigma]\psi(x) = 0 \tag{2.14}$$

où Σ est la self-énergie du système, quantité (classique à ce stade) encadrant la contribution énergétique des interactions du nucléon avec le milieu. Cette quantité se scinde en une contribution scalaire et une vectorielle.

$$\Sigma = \gamma^{\mu} \Sigma^{V}_{\mu} + \Sigma^{S} \tag{2.15}$$

Où

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

Pour construire une EDF il faut à présent établir l'expression du Hamiltonien.

2.1.2 Hamiltonien du système

Formellement le lagrangien dépend des champs nucléoniques ψ , mésoniques ϕ_i et du 4-potentiel électromagnétique A^{μ}

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\psi, \phi_i, A_\mu) \tag{2.16}$$

Le Hamiltonien correspondant s'obtient en appliquant une transformation de Legendre au Lagrangien (2.16).

$$\mathcal{H} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \psi)} \partial^0 \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \phi_i)} \partial^0 \phi_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 A^\mu)} \partial^0 A^\mu - \mathcal{L}$$
(2.17)

Le Hamiltonien se décompose en trois termes

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_N + \mathcal{H}_{\rm m} + \mathcal{H}_{\rm int} \tag{2.18}$$

2.1.3 Secteur nucléonique

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

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

$$\mathcal{H}_N = \bar{\psi}[-i\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\nabla} + M]\psi \tag{2.19}$$

2.1.4 Secteur mésonique

Densités Hamiltoniennes

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

$$\mathcal{H}_A = \frac{1}{2} \left[-F^{0i} \partial_0 A_i + F^{i\mu} \partial_i A_\mu \right]$$
(2.20)

$$\mathcal{H}_{\sigma} = \frac{1}{2} \left[\partial_0 \sigma \partial_0 \sigma + \boldsymbol{\nabla} \sigma \cdot \boldsymbol{\nabla} \sigma + m_{\sigma}^2 \sigma^2 \right]$$
(2.21)

$$\mathcal{H}_{\omega} = \frac{1}{2} \left[\Omega^{i\mu} \partial_i \omega_{\mu} - \Omega^{0i} \partial_0 \omega_i - m_{\omega}^2 \omega_{\mu} \omega^{\mu} \right]$$
(2.22)

$$\mathcal{H}_{\rho} = \frac{1}{2} \left[\vec{R}^{i\mu} \partial_i \vec{\rho}_{\mu} - \vec{R}^{0i} \partial_0 \vec{\rho}_i - m_{\rho}^2 \vec{\rho}_{\mu} \cdot \vec{\rho}^{\mu} \right]$$
(2.23)

$$\mathcal{H}_{\pi} = \frac{1}{2} \left[\partial_0 \vec{\pi} \cdot \partial_0 \vec{\pi} + \boldsymbol{\nabla} \vec{\pi} \cdot \boldsymbol{\nabla} \vec{\pi} + m_{\pi}^2 \vec{\pi} \cdot \vec{\pi} \right]$$
(2.24)

Dépendance temporelle

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

$$H_{A} = -\frac{1}{2}e \int d^{3}x \bar{\psi} \gamma_{\mu} A^{\mu} \frac{1-\tau_{3}}{2} \psi$$
 (2.25)

$$H_{\sigma} = -\frac{1}{2} \int d^3x g_{\sigma} \bar{\psi} \sigma \psi \qquad (2.26)$$

$$H_{\omega} = -\frac{1}{2} \int d^3x g_{\omega} \bar{\psi} \gamma_{\mu} \omega^{\mu} \psi \qquad (2.27)$$

$$H_{\rho} = -\frac{1}{2} \int d^3x g_{\rho} \bar{\psi} \gamma_{\mu} \bar{\rho}^{\mu} \cdot \vec{\tau} \psi \qquad (2.28)$$

$$H_{\pi} = -\frac{1}{2} \int d^3x \frac{f_{\pi}}{m_{\pi}} \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_{\mu} \cdot \nabla \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} \psi \qquad (2.29)$$

2.1.5 Interaction nucléon-nucléon

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

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \bar{\psi} [g_{\sigma}\sigma + g_{\omega}\gamma_{\mu}\omega^{\mu} + g_{\rho}\gamma_{\mu}\vec{\rho}^{\mu}\cdot\vec{\tau} + \frac{f_{\pi}}{m_{\pi}}\gamma_{5}\gamma_{\mu}\cdot\nabla\vec{\pi}\cdot\vec{\tau} + e\gamma_{\mu}A^{\mu}\frac{1-\tau_{3}}{2}]\psi \quad (2.30)$$

2.1.6 Hamiltonien du système

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

$$H = \int d^3x \bar{\psi} [-i\gamma_{\mu} \cdot \nabla + M] \psi + \frac{1}{2} \int d^3x \bar{\psi} [g_{\sigma}\sigma + g_{\omega}\gamma_{\mu}\omega^{\mu} + g_{\rho}\gamma_{\mu}\vec{\rho}^{\mu} \cdot \vec{\tau} + \frac{f_{\pi}}{m_{\pi}}\gamma_5\gamma_{\mu} \cdot \nabla\vec{\pi} \cdot \vec{\tau} + e\gamma_{\mu}A^{\mu}\frac{1-\tau_3}{2}]\psi$$
(2.31)

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

$$\phi_i(x) = \int d^4 y D_{\phi_i}(x, y) s_{\phi_i}(y)$$
(2.32)

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

Où D_{ϕ_i} est le propagateur mésonique, s_{ϕ_i} est le terme source de l'équation de Klein-Gordon satisfaite par ϕ_i . Ainsi (2.31) peut s'exprimer sous la forme :

$$H = \int d^3x \bar{\psi} [-i\gamma \cdot \nabla + M] \psi + \sum_m \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \psi(\bar{x}) \psi(\bar{y}) \Gamma_m(x,y) D_m(x,y) \psi(x) \psi(y)$$
(2.33)

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

$$\Gamma_{\sigma}(a,b) = -g_{\sigma}(a)g_{\sigma}(b) \tag{2.34}$$

$$\Gamma_{\omega}(a,b) = g_{\omega}(a)\gamma_{\mu}(a)g_{\omega}(b)\gamma^{\mu}(b)$$
(2.35)

$$\Gamma_{\rho}(a,b) = [g_{\rho}(a)\gamma_{\mu}(a)\vec{\tau}(a)] \cdot [g_{\rho}(b)\gamma^{\mu}(b)\vec{\tau}(b)$$
(2.36)

$$\Gamma_{\pi}(a,b) = -\left[\frac{f_{\pi}(a)}{m_{\pi}}\gamma_{5}(a)\gamma(a)\cdot\nabla(a)\tau(\vec{a})\right]\cdot\left[\frac{f_{\pi}(b)}{m_{\pi}}\gamma_{5}(b)\gamma(b)\cdot\nabla(b)\tau(\vec{b})\right] \quad (2.37)$$

$$\Gamma_A(a,b) = \frac{e^2}{4} [\gamma_\mu(a)(1-\tau_3(a))] [\gamma^\mu(b)(1-\tau_3(b))]$$
(2.38)

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

$$\{\psi_{\alpha}(x,t),\psi_{\beta}^{\dagger}(y,t)\} = \delta_{\alpha,\beta}\delta^{(3)}(x-y)$$
(2.39)

$$\{\psi_{\alpha}(x,t),\psi_{\beta}(y,t)\} = \{\psi_{\alpha}^{\dagger}(x,t),\psi_{\beta}^{\dagger}(y,t)\} = 0$$
(2.40)

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

$$[\phi_{\mu}(x,t),\Pi_{\nu}(y,t)] = i\delta_{\mu,\nu}(x-y)\delta^{(3)}(x-y)$$
(2.41)

$$[\phi_{\mu}(x,t),\phi_{\nu}(y,t)] = [\Pi_{\mu}(x,t),\Pi_{\nu}(y,t)] = 0$$
(2.42)

Où les $\phi_{\{\mu,\nu\}}$ sont les champs mésoniques et les $\Pi_{\{\mu,\nu\}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \phi^{\{\mu,\nu\}})}$ leurs conjugués canoniques. Pour résoudre le problème et obtenir les équations Hartre-Fock en partant de (2.33) on pourrait en toute rigueur chercher à résoudre une équation de Dyson pour le propagateur baryonique[HS83]. De prime abord et sans pertes de généralité, on peut chercher des solutions spinorielles approchées $\psi_0(x)$ à l'équation (2.14) où la self-énergie Σ doit être déterminé de manière auto-cohérente.

$$(-i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} + M + \Sigma)\psi_0(x) = 0$$
(2.43)

En remplaçant les solutions exactes $\psi(x)$ par les solutions approchées dans (2.33) on obtient un hamiltonien effectif H_0 . Dans un état Hartree-Fock (un déterminant de Slater) la valeur moyenne de cet Hamiltonien donne une énergie E_0 . En minimisant E_0 par rapport à la self-énergie on obtient des équations pour Σ qui seront identiques à celles obtenues par méthode de Dyson, les deux approches étant équivalentes. On peut alors développer les champs nucléoniques sur une base définie par les solutions stationnaires $\psi_0(x)$ de (2.43) dont les coefficients restent à déterminer :

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

$$\psi_0^\dagger(x) = \sum_{\alpha} \{ f_\alpha^\dagger(x) e^{iE_\alpha t} b_\alpha^\dagger + g_\alpha^\dagger(x) e^{-iE'_\alpha t} d_\alpha \}$$
(2.44)

Où $f_{\alpha}(x)$ et $g_{\alpha}(x)$ forment un ensemble complet de spineurs de Dirac en représentation coordonnée, $\{b_{\alpha}, b_{\alpha}^{\dagger}\}$ sont les opérateurs de créations et annihilations de nucléons dans un état α tandis que $\{d_{\alpha}, d_{\alpha}^{\dagger}\}$ sont associés aux antinucléons. Toutefois l'équation (2.43) dans sa version quantique ne peut se résoudre sans nouvelle approximation de part la structure complexe de la self-énergie.

2.1.7 Approximation no-sea

Dans le cadre de cette approximation les anti-nucléons (états d'énergie négative $\epsilon < -mc^2$) formant la mer de Dirac sont explicitement omis. Effectivement, la prise en compte des états appartenant à la mer de Dirac, traduisant les effets de la polarisation du vide, engendrent des contributions divergentes représentées en Figure 2.1. En effet ces graphes présentent la particularité de contenir un nombre impair d'arêtes externes ainsi qu'une boucle interne ; cette boucle se traduit par une intégrale nonbornée sur lest états de la mer de Dirac, cette intégrale n'étant régularisée que dans le cas d'un nombre pair d'arêtes externes.



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

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



FIGURE 2.2 – Comparaison des techniques de renormalisation NSET et de l'approximation no-sea, sur l'énergie par nucléon dans la matière nucléaire uniforme. Figure issue de [Kar10]

En figure 2.2 on peut ainsi comparer l'approximation no-sea et la théorie effective complète NSET. Pour de faibles valeurs de l'impulsion de Fermi (typiquement $k_f < 1.2$ fm), les approximations coïncident avec la théorie complète. Pour de plus grandes valeurs de k_f il faudra dans le cadre de l'approximation no-sea, absorber les effets restant de la structure du vide dans la dépendance en densités de constantes de couplage que l'on discutera ultérieurement. En conclusion l'approximation nosea permet de reformuler le problème en ne conservant que des nucléons peuplant des états d'énergies supérieurs à mc^2 . Ainsi les opérateurs spinoriels s'expriment en fonction des seuls opérateurs de création et annihilation nucléoniques

$$\psi_0(x) = \sum_{\alpha} \{ f_{\alpha}(x) e^{-iE_{\alpha}t} b_{\alpha} \}$$

$$\psi_0^{\dagger}(x) = \sum_{\alpha} \{ f_{\alpha}^{\dagger}(x) e^{iE_{\alpha}t} b_{\alpha}^{\dagger} \}$$

(2.45)

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

2.1.8 Hamiltonien quantifié

$$H_0 = T + \sum_m V_m \tag{2.46}$$

Où :

$$T = \sum_{i,j} b_i^{\dagger} b_j \int d^3 x \bar{f}_i(x) [_i \gamma \cdot \Delta + M] f_j$$
(2.47)

est l'énergie cinétique tandis que

$$V_m = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} b_i^{\dagger} b_j^{\dagger} b_k b_l \int d^3 x_1 d^3 x_2 \bar{f}_i(x_1) \bar{f}_j(x_2) \Gamma_m(x_1, x_2) D_m(x_1, x_2) f_k(x_2) f_l(x_1)$$
(2.48)

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

2.2 Théorie Hartree-Fock

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

$$H_0 \left| \Phi_0 \right\rangle = E_0 \left| \Phi_0 \right\rangle \tag{2.49}$$

Où H_0 est l'Hamiltonien (2.46), E_0 et $|\Phi_0\rangle$ sont l'énergie et la fonction d'onde du noyau à déterminer. Comme vu au premier chapitre, on se place dans l'approximation de champ-moyen mais cette fois avec un Hamiltonien effectif. On postule ainsi que l'état fondamental du système à A-nucléons s'écrivant sous la forme d'un déterminant de Slater. Ce déterminant est construit sur une base à un corps formée par les opérateurs créations et annihilation nucléoniques $\{b_i, b_i^{\dagger}\}$:

$$|\Phi_0\rangle = \prod_i b_i^{\dagger} |0\rangle \tag{2.50}$$

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

$$E_0 = \langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle = \sum_{i}^{A} \langle i | T | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{m} \sum_{i,j}^{A} \left(\langle ij | V_m | ij \rangle - \langle ij | V_m | ji \rangle \right) \quad (2.51)$$

On veut en premier lieu décrire l'état fondamental des noyaux atomiques, on se place donc dans la limite où les champs sont indépendants du temps. De plus on restreindra notre étude aux noyaux possédant un nombre de neutrons et de protons pairs. Les systèmes pairs-pairs ont pour particularité d'être invariants sous les transformations de renversement du sens du temps et par conséquent la composante spatiale des sources des équations Klein-Gordon ((2.8)-(2.12)) ne contribueront pas au terme de Hartree. Les équations de Hartree-Fock s'obtiennent alors en minimisant (2.51) par rapport aux fonctions d'ondes de la base.

$$\delta[\langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle - E \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle] \tag{2.52}$$

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

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

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

- Approche perturbative.
- Rajout d'une dépendance en densité (esquissé en chapitre 1).

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

2.3.1 Méthode perturbative

Dérivation algébrique

Le principe de base des méthodes perturbatives à N-corps [[MP34]-[Tob57]] que l'on nomme MBPT (*Many Body Perturbation Theory*) repose sur la théorie de Rayleigh-Schrödinger [Lin74]. La première étape réside dans la partition du problème complet décrit par l'Hamiltonien exact H_{exact} (2.33) à un-corps en un Hamiltonien effectif non-perturbé H_0 et une perturbation W.

$$H_{\text{exact}} = H_0 + W \tag{2.53}$$

Un point important de la problématique est le choix de l'Hamiltonien non-perturbé. Dans notre cadre on choisira l'Hamiltonien Hartree-Fock $H_0 = H_{\text{HF}}$, ne dépendant que de la matrice-densité à un corps dont les éléments de matrice s'écrivent

$$H_{ij}^{(HF)}[\rho] = t_{ij} + \sum_{kl} \tilde{v}_{iklj}\rho_{lk}$$
(2.54)

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

$$H_{\rm HF} \left| \Psi \right\rangle_{\rm HF} = E_{\rm HF} \left| \Psi \right\rangle_{\rm HF} \tag{2.55}$$

Où les valeurs propres $E_{\rm HF}$ s'obtiennent à partir des énergies de particules indépendantes obtenues en résolvant les équations Hartree-Fock décrites précédemment. La correction à l'énergie au premier ordre de la série perturbative est déjà incluse dans l'énergie Hartree-Fock. On peut calculer la première correction à l'énergie, qui correspond donc au deuxième ordre en perturbation. Formellement on peut l'écrire

$$E_W^{(2)} = \sum_{n>0}^{\infty} \frac{|\langle 0|W|n\rangle|^2}{E_W^{(0)} - E_n^{(0)}}$$
(2.56)

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

$$\left|\psi_{abc}^{rst}\right\rangle = a_r^{\dagger} a_s^{\dagger} a_t^{\dagger} a_c a_b a_a \left|\Phi\right\rangle_{\rm HF} \tag{2.57}$$

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

$$\sum_{n>0}^{\infty} |\langle 0|W|n\rangle|^{2} = \langle \Phi_{\rm HF}|H_{\rm exact}|\Psi_{a}^{r}\rangle - \langle \Phi_{\rm HF}|H_{\rm HF}|\Psi_{a}^{r}\rangle + \langle \Phi_{\rm HF}|H_{\rm exact}|\Psi_{ab}^{rs}\rangle - \langle \Phi_{\rm HF}|H_{\rm HF}|\Psi_{ab}^{rs}\rangle$$
(2.58)

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

$$H_W |\Psi_{ab}^{rs}\rangle = \left(E^{(0)} - (\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)\right) |\Psi_{ab}^{rs}\rangle$$
(2.59)

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

$$E_W^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{a,b,r,s} \frac{|\langle ab|W|rs\rangle|^2}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)}$$
(2.60)

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

Dérivation diagrammatique

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

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

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

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

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



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

Les deux vertex de ce diagramme correspondent aux éléments de matrices

$$\langle ab|W|rs\rangle\langle rs|W|ab\rangle$$
 (2.61)

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

$$(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s) \tag{2.62}$$

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

$$E_W^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{a,b,r,s} \frac{|\langle ab|W|rs\rangle|^2}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)}$$
(2.63)

Qui correspond exactement à (2.60). L'avantage d'une méthode diagrammatique réside dans la systématicité inhérente aux règles de construction. On peut mettre à profit cette spécificité pour automatiser la génération des diagrammes et des expressions algébriques correspondantes, directement utilisables pour l'évaluation numérique des corrections.

Génération automatique

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

Définition. Graphe :

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

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

— ω est un poids associé aux arêtes

Propriétés. Propriétés générales des graphes :

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

Définition. Chaînes, chemins et cycles :

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

Définition. Matrices d'incidence :

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

Définition. Matrices d'adjacence :

Une matrice d'adjacence associée à un graphe $\mathcal{G} = (V, E, \omega)$ possédant n sommets $v_1, ..., v_n$ est définie par

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

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



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

La matrice d'adjacence associée s'exprime

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(2.64)

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

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

$$a_{ij} + a_{ji} = 2 (2.65)$$

- 2. On impose que tous les coefficients diagonaux a_{ii} soient nuls
- 3. On vérifie que

$$\sum_{i}^{n} a_{ij} = \sum_{j}^{n} a_{ij} = 2$$
(2.66)

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

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



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

Suite à cette étape de génération on peut extraire des diagrammes générés, l'expression algébrique leur étant associée. La représentation la plus adaptée pour cette extraction est de se placer dans la perspective des matrices d'incidences. Sous cette forme on peut identifier chaque arc par une colonne et chaque sommet par une ligne. On peut ainsi procéder à l'identification des arcs correspondants à des excitations de types trous ou de type particules. Le facteur de normalisation empêchant tout double comptage est obtenu en comptant les colonnes identiques N. En généralisant la procédure de transcription présentée en section précédente on peut obtenir l'expression algébrique de la perturbation à un ordre quelconque. Pour le troisième ordre l'expression algébrique correspondante obtenue par cette méthode est donnée en (2.67)ou l'on rappelle que l indique le nombre de boucles fermées des graphes correspondants. Cette expression correspond bien aux expressions dérivées algébriquement



FIGURE 2.6 – Énergie de liaison par nucléon à l'ordre trois en perturbations (cercles rouges) et dans le cadre d'une approche *Coupled-Cluster* (triangles bleus) pour plusieurs noyaux, la valeur expérimentale est indiquée en noir, figure adaptée de [TLBR16].

[**SB09**].

$$E_W^{(3)} = \frac{1}{8} (-1)^{4+l} \sum_{abcdrs} \frac{\langle ab|W|rs \rangle \langle rs|W|cd \rangle \langle cd|W|ab \rangle}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)(\epsilon_c + \epsilon_d - \epsilon_r - \epsilon_s)} + (-1)^{3+l} \sum_{abcrst} \frac{\langle ab|W|rs \rangle \langle cs|W|tb \rangle \langle rt|W|ac \rangle}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)(\epsilon_a + \epsilon_c - \epsilon_t - \epsilon_r)} + \frac{1}{8} (-1)^{2+l} \sum_{abrstu} \frac{\langle ab|W|rs \rangle \langle rs|W|tu \rangle \langle tu|W|ab \rangle}{(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_r - \epsilon_s)(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_t - \epsilon_u)}$$
(2.67)

Programme ADG

Les algorithmes décrits précédemment ont été proposés et implémentés pendant cette thèse en collaboration avec P. Arthuis, A. Tichai et T. Duguet nous permettant de disposer pour la première fois d'un programme informatique très général adapté à la physique nucléaire : ADG (*Automated Diagram Generator*) qui as été soumis au journal *Computer Physics Communications*[ADT⁺]. En utilisant la structure creuse des matrices d'adjacences on peut considérablement diminuer la complexité numérique des algorithmes précédents ; aussi on peut donner quelques chiffres quantifiant les performances de notre implémentation

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

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

On trouvera en Annexe B une sortie de notre programme présentant les diagrammes et expressions de l'énergie à l'ordre 4 en perturbation. Dans le cadre de ces méthodes, on peut obtenir, moyennant un certain coût numérique, une très bonne reproduction de l'état fondamental obtenu dans le cadre d'une approche Coupled-Cluster, comme on peut le voir en Figure 2.6. L'approche Coupled-Cluster, bien plus lourde numériquement, est considérée comme "exacte" pour le traitement de ces corrélations et on peut ainsi constater l'intérêt du traitement de type MBPT. Toutefois de par la complexité numérique inhérente à cette technique il est pour l'instant impossible de traiter tous les noyaux par cette approche. En conséquence, pour notre étude nous nous focaliserons sur une autre technique de prise en compte des corrélations particules-trous permettant de décrire de manière universelle l'ensemble des noyaux de la carte.

2.3.2 Dépendance en densité

Le fait de rajouter une dépendance en densité rend la théorie mathématiquement spécieuse². En effet comme nous allons le voir nous ne serons plus en toute rigueur en présence d'une théorie Hamiltonienne. L'objet fondamental de notre théorie sera l'énergie prise en tant que fonctionnelle de la densité. On ne parlera par la suite que de théorie pseudo-hamiltonienne ou encore pseudo-Hartree-Fock. D'autres pathologies apparaîtront lorsque l'on restaurera des symétries brisées au niveau du champ-moyen. Il faut cependant noter qu'à l'heure actuelle les approches EDF phénoménologiques sont les seules à permettre une description précise et satisfaisante de la grande majorité des noyaux atomiques, on adoptera par conséquent cette approche. On reprend donc le Hamiltonien du système (2.46) mais cette fois on introduira une dépendance en densité dans ses constantes de couplage. On considère cette fois H_0 comme étant une fonctionnelle de la seule densité totale du système ρ^3 (au travers des couplages du terme d'interaction)

$$H_0 = H_0[\rho]$$

$$\rho_{ij} = \langle \Phi_0 | b_i^{\dagger} b_i | \Phi_0 \rangle$$
(2.68)

En effet l'approximation de champ moyen garantit la réduction de toute l'information de l'état fondamental du système à sa matrice densité à un-corps. On peut s'assurer que $|\Phi_0\rangle$ est bien un déterminant de Slater si et seulement si la matrice densité associée est idempotente ($\rho^2 = \rho$). L'énergie fonctionnelle de la densité est construite comme la valeur moyenne de l'Hamiltonien dans l'état $|\Psi_{\rm HF}\rangle$.

$$\mathcal{E}_{RHF}[\rho] = \langle \Psi_{\rm HF} | H_0[\rho] | \Psi_{\rm HF} \rangle \tag{2.69}$$

En appliquant le théorème de Wick à (2.51) on obtient

$$\mathcal{E}_{RHF}[\rho] = \sum_{ij} T_{ij}\rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl}[\rho] \{\rho_{li}\rho_{kj} - \rho_{kl}\rho_{ij}\}$$
(2.70)

Où

$$T_{ij} = \int d^3x \bar{f}_i [-i\gamma \cdot \nabla + M] f_j$$

$$V_{ijkl} = \int \int d^3x d^3y \bar{f}_i(x) \bar{f}_j(y) \Gamma_m(x,y) f_k(y) f_l(x)$$
(2.71)

Dans la base des $\{b_i, b_i^{\dagger}\}$ l'opérateur densité est diagonal par conséquent la partie cinétique T_{ij} de (2.71) l'est aussi.

Contribution de l'interaction

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

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

^{2.} L'anglicisme spurieux est fréquemment utilisé en lieu et place de l'adjectif spécieux

^{3.} En fait calculée à partir des densité scalaires, vecteurs et des courants dans un cadre relativiste



FIGURE 2.7 – Contribution directe (terme de Hartree)

Pour chaque méson la contribution de Hartree a pour expression

$$V_m^{\text{Hartree}} = \pm \frac{1}{2} \sum_{ij} \int \int d^3x d^3y [\bar{f}_i(x)\Gamma_m(x)f_i(x)] D_m(x,y) [\bar{f}_j(y)\Gamma_m(y)f_j(y)]$$
(2.72)

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

$$\Gamma_{A} = e\gamma^{\mu} \frac{1 - \tau_{3}}{2}$$

$$\Gamma_{\sigma} = g_{\sigma}(\rho)$$

$$\Gamma_{\omega} = g_{\omega}(\rho)\gamma^{\mu}$$

$$\Gamma_{\rho} = g_{\rho}(\rho)\gamma^{\mu}\vec{\tau}$$

$$\Gamma_{\pi} = \frac{f_{\pi}(\rho)}{m_{\pi}}\gamma_{5}\gamma \cdot \nabla\vec{\tau}$$
(2.73)

En utilisant (2.32) on peut exprimer (2.72) en fonction des champs mésoniques ϕ_m en intégrant sur l'une des coordonnées.

$$V_m^{\text{Hartree}} = \pm \frac{1}{2} \sum_i j \int d^3x \bar{f}_i \Gamma_m(x) \int d^3y \bar{f}_j(y) D_m(x,y) \Gamma_m(y) f_j(y) f_i(x)$$
(2.74)

$$V_m^{\text{Hartree}} = \frac{1}{2} \sum_i \int d^3 x [\bar{f}_i(x) \Gamma_m \langle \phi_m \rangle f_i(x)]$$
(2.75)

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

$$V_m^{\text{Hartree}} = \pm \frac{1}{2} \int d^3x \left[(\partial_\mu \phi_m)^2 + m_m^2] + \sum_{ij} \int d^3x [\bar{f}_i(x)\Gamma_m(x)\phi_m(x)f_i(x)] \right]$$
(2.76)

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



FIGURE 2.8 – Contribution d'échange (terme de Fock)

$$V_m^{\text{Fock}} = \pm \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{I}_{ij} \int d^3x d^3y [\bar{f}_i(x)\Gamma_m(x)f_j(x)] D_m(x,y) [\bar{f}_j(y)\Gamma_m(y)f_i(y)]$$
(2.77)

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

$$\mathcal{I}_{ij} = \begin{cases} \delta_{\tau_i,\tau_j} & \text{Couplage isoscalaire} \\ 2 - \delta_{\tau_i,\tau_j} & \text{Couplage isovecteur} \end{cases}$$
(2.78)

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

$$\mathcal{E}^{RHF}[\rho] = Tr[(-i\gamma \cdot \nabla + M\Gamma_m \phi_m)\rho] + \frac{1}{2}Tr[\mathcal{V}[\rho]\rho^{\dagger} \otimes \rho] \pm \frac{1}{2} \int d^3x [(\partial_{\mu}\phi_m)^2 + m - m^2]$$
(2.79)

La trace indique que l'on somme sur les indices de Dirac tandis que \mathcal{V} est l'opérateur traduisant l'interaction V_{ijkl} de (2.71). La prise en compte du terme d'échange a pour effet de renforcer légèrement l'énergie de liaison du noyau et par conséquent de réduire le rayon moyen du noyau. L'effet de ce terme joue toutefois un rôle majeur dans l'influence du spin-orbite sur le système[EMKV16].

Équations Hartree relativistes

Muni des outils et équations introduits précédemment on peut formuler les équations Hartree-Fock dans leur version relativiste. Toutefois pour permettre la résolution des équations en un temps raisonnable, on peut approximativement absorber la contribution des termes d'échanges dans la dépendance en densité des constantes de couplage. Cette dernière approximation n'a pas de conséquences fondamentale dans notre cas mais peut engendrer des erreurs lors de l'étude de la matière nucléaire en prédisant une évolution erronée des masses effectives protoniques et neutroniques[EKPnAV11]. A titre de comparaison on peut tracer pour les isotopes du Magnésium les énergies de séparation à deux neutrons avec et sans prise en compte explicite du terme de Fock en Figure 2.9 ce qui nous indique la validité d'une approche négligeant le terme d'échange pour notre étude. Dans ce cadre on ne conservera donc que les équations incluant la contribution de Hartree. Cette approximation donne naissance à la théorie dite de champ moyen relativiste (*Relativistic Mean Field*). De plus, expérimentalement les potentiels nucléaires préservent la parité. Pour reproduire cette observation, les mésons pseudo-scalaires (ici le pion) générant des potentiels de Hartree qui violent la parité, ne contribuent pas aux équations de champ moyen.

Par analogie avec (2.52) la matrice densité est déterminée par minimisation de l'énergie fonctionnelle de la densité en imposant la contrainte d'idempotence sur ρ .

$$\delta \left[\mathcal{E}^{RMF} - \sum_{kl} \Lambda_{kl} (\rho^2 - \rho)_{kl} \right] = 0$$
(2.80)



FIGURE 2.9 – Comparaison de l'énergie de séparation à deux neutrons pour des isotopes du Magnésium. Avec terme d'échange (PKO2) et sans (DD-ME2), en noir les valeurs expérimentales. (Issu de [EKPnAV11])

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

$$[h[\rho], \rho] = 0$$

$$(-\Delta + m_m^2)\phi_m = \pm Tr(\Gamma_m \rho)$$
(2.81)

Où $h[\rho]$ est le pseudo-hamiltonien⁴ de Dirac défini par la dérivée fonctionnelle de l'énergie fonctionnelle de la densité.

$$h[\rho] = \frac{\delta \mathcal{E}^{RMF}}{\delta \rho} \tag{2.82}$$

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

— D'une equation de Dirac

$$\left(-i\alpha \cdot \nabla + \beta M^*(r) + \left[V(r) + \Sigma^R(r)\right]\right) f_i(r, q_i) = \epsilon_i f_i(r, q_i) \quad (2.83)$$

Où

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

 $\alpha()$

$$M^{*}(r) = M + S(r)$$
(2.84)

• S(r) et V(r) sont respectivement les contributions de Hartree à la selfenergy scalaire et de la composante temporelle vectorielle

$$S(r) = g_{\sigma}(\rho_{v})\sigma(r)$$

$$V(r) = g_{\omega}(\rho_{v})\omega^{0}(r) + g_{\rho}(\rho_{v})\rho_{3}^{0}(r)\tau_{3} + eA^{0}(r)$$
(2.85)

• Σ^R correspond au terme de réarrangement de la self-énergie provenant de la dépendance en densité et s'exprimant

$$\Sigma^{R}_{\mu} = \frac{j_{\mu}}{\rho} \left[\frac{\partial g_{\sigma}}{\partial \rho} \bar{\psi} \sigma \psi + \frac{\partial g_{\omega}}{\partial \rho} \bar{\psi} \gamma_{\nu} \omega^{\nu} \psi + \frac{\partial g_{\rho}}{\partial \rho} \bar{\psi} \gamma_{\nu} \bar{\rho}^{\nu} \cdot \vec{\tau} \psi + \frac{1}{m_{\pi}} \frac{\partial f_{\pi}}{\partial \rho} \bar{\psi} \gamma_{5} \gamma_{\nu} \partial^{\nu} \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} \psi \right]$$

$$(2.86)$$

^{4.} On parlera ici de pseudo-hamiltonien à cause de sa dépendance en densité

• α et β correspondent aux matrices $\gamma^0 \gamma$ et γ^0 en représentation de Dirac.



FIGURE 2.10 – Contributions directes à la self-énergie (S et V)

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

$$(-\Delta + m_{\sigma}^{2})\sigma(r) = -g_{\sigma}(\rho_{v})\rho_{s}(r)$$

$$(-\Delta + m_{\omega}^{2})\omega^{0}(r) = g_{\omega}(\rho_{v})\rho_{v}(r)$$

$$(-\Delta + m_{\rho}^{2})\rho_{3}^{0}(r) = g_{\rho}(\rho_{v})\rho_{tv}(r)$$

$$-\Delta A^{0}(r) = e\rho_{c}(r)$$

$$(2.87)$$

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

$$\rho_s(r) = \sum_i \bar{f}_i(r) f_i(r) \tag{2.88}$$

$$\rho_v(r) = j^0 = \sum_i f_i^{\dagger}(r) f_i(r)$$
(2.89)

$$\rho_{tv}(r) = j_3^0 = \sum_i f_i^{\dagger}(r)\tau_3 f_i(r) = \rho_v^{\text{protons}} - \rho_v^{\text{neutrons}}$$
(2.90)

$$\rho_c(r) = j_C = \sum_i f_i^{\dagger}(r) \frac{1 - \tau_3}{2} f_i(r) = \rho_v^{\text{protons}}$$
(2.91)

Aussi la détermination d'observables du noyau dans son état fondamental est conditionnée à la résolution du système d'équations décrit précédemment. Il faut résoudre un système d'équations différentielles et intégro-différentielles couplées. De plus pour résoudre l'équation de Dirac (2.83) il faut préalablement connaître les champs mésoniques ϕ_m générant les potentiels de Hartree. De même pour résoudre les équations de Poisson et de Klein-Gordon (2.87) il faut déterminer leurs termes sources s'obtenant eux-même grâce aux spineurs nucléoniques solution de (2.83). Ce modèle est donc intrinsèquement auto-cohérent. On peut établir un schéma numérique permettant la résolution de ce système en figure 2.11.

2.3.3 Conclusions

Pour pouvoir présenter une description satisfaisante du noyau atomique, il a fallu prendre en compte les corrélations particules-trous dites de bulk. Dans le cadre de ce travail, deux approches sont proposées, d'une part l'approche purement Hamiltonienne, permettant d'extraire des observables à partir d'une théorie Hamiltonienne vraie, issue d'une paramétrisation relativiste de l'interaction nucléon-nucléon. Puis on développe les observables d'intérêt en perturbation pour incorporer les corrélations du bulk ordre par ordre. Une méthode formelle d'automatisation du traitement



FIGURE 2.11 – Schéma de résolution dans le cadre d'approche d'un champ moyen relativiste auto-cohérent

des perturbations a été développée et présentée. D'autre part on peut, au prix d'une augmentation du niveau de phénoménologie du modèle, construire une théorie fonctionnelle de la densité en faisant dépendre explicitement le Lagrangien nucléaire de la densité du système. Cette dépendance permet de capturer pour un très faible coût numérique une grande partie des corrélations du bulk, fournissant ainsi une description satisfaisante au regard des mesures expérimentales.

2.4 Corrélations de type particules-particules

2.4.1 Introduction

Comme brièvement mentionné au premier chapitre (Section 1.1.5), plusieurs phénomènes expérimentaux ne peuvent être décrits dans le cadre des approches précédemment introduites. On peut entre autre noter :

- 1. Les différences dans les énergies de liaison et d'excitation entre les noyaux pairs et impairs (Figure 1.3 du précédent chapitre.)
- 2. L'apparition d'un décalage dans les spectre d'excitations des noyaux miroirs (Figure 2.12).
- 3. Le *Backbending*, phénomène qui modifie le comportement rotationnel des noyaux superfluides. On peut l'interpréter comme étant analogue à l'effet Meissner dans les super-conducteurs.

Dans l'espoir de comprendre ces phénomènes, Bohr, Mottelson et Pines [BMP58] ont, par analogie avec les systèmes électroniques, interprété ces observations comme des manifestations de la superfluidité nucléaire. Le principe réside dans la formation,



FIGURE 2.12 – Spectre théorique des noyaux miroirs ¹⁸N et ¹⁸Na, le décalage des états 0^- est liée à la formation de paires, issu de [FS07].

autour du niveau de Fermi, de paires nucléoniques, de nature quasi-bosoniques, pouvant donc condenser et donner naissance à des effets superfluides macroscopiques. Dans le cas électronique, l'interaction attractive permettant la formation de paires est issue de l'échanges de phonons entre électrons corrélés. Dans le cas du noyau atomique c'est la partie attractive dans le canal ${}^{1}S^{0}$ de l'interaction nucléon-nucléon (négligée dans le cadre des modèles de champ-moyen) qui en est responsable, générant différents types d'appariement entres nucléons de même et de différentes espèces⁵. Autrement dit l'interaction résiduelle, permet la formation de paires, dites de Cooper, constituées de nucléons peuplant des états de spins opposés, proche du niveau de Fermi. Ces paires se comportent en moyenne comme autant de quasi-bosons indépendants au sein du noyau et induisent des effets superfluides observables. Or la prise en compte des excitations du système s'effectue en partant de l'état fondamental de Hartree et en promouvant un ou plusieurs nucléons, autour du niveau de Fermi, depuis un état occupé vers un état vide, état dont l'énergie sera plus grande. Il est clair que l'énergie d'une telle configuration sera d'autant plus grande que l'écart entre les deux états concernés est important. Ainsi pour les noyaux magiques où ce gap est grand, le couplage de l'état fondamental aux états excités par l'interaction résiduelle est négligeable. La description de Hartree de leur état fondamental sera donc satisfaisante. Néanmoins pour les noyaux où l'espacement des états de particules individuelles est faible, par exemple pour les noyaux à couche ouverte, l'état fondamental est quasi-dégénéré avec des configurations correspondantes aux premiers états excités. Dans ce cas l'interaction résiduelle couple fortement ses états et l'approximation de champ-moyen n'est plus suffisante pour la description des propriétés de ces noyaux.

2.4.2 Représentation

Revenons sur la nature des paires de Cooper nucléoniques. Au sens littéral il s'agit de pseudo-bosons. En tant que particules fermioniques les nucléons satisfont des relations d'anti-commutation. Les paires nucléoniques, vont quant à elles satisfaire des relations de commutations bosoniques en valeur moyenne. Le théorème spin-statistique garantit que les fonctions d'ondes nucléoniques se doivent d'être anti-symétrisées par rapport à l'échange de particules. Pour un système de n_f fermions

^{5.} neutrons-neutrons et protons-protons mais également neutrons-protons
indépendants, la fonction d'onde totale du système en représentation coordonnées peut s'exprimer sous forme déterminentale (dans les faits un déterminant de Slater). Un déterminant étant une forme n-linéaire alternée, le caractère alterné, garantit l'anti-symétrisation totale de la fonction d'onde. Effectivement toute permutation de ligne, correspondant physiquement à l'échange spatial de deux particules, entraîne un changement de signe. L'expression explicite de ce déterminant en fonction des fonctions d'ondes individuelles peut s'obtenir par la formule de Leibnitz

$$\operatorname{Det}(\Psi) = \sum_{\sigma \in \mathcal{G}_{n_f}} \epsilon(\sigma) \prod_{i=1}^{n_f} \psi_{\sigma(i),i}$$
(2.92)

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

$$\operatorname{Perm}(\Psi) = \sum_{\sigma \in \mathcal{G}_{n_p}} \prod_{i=1}^{n_p} \psi_{\sigma(i),i}$$
(2.93)

On peut noter que le calcul d'un permanent présente une complexité bien plus grande que celui d'un déterminant. A l'origine de cette complexité supplémentaire, se trouve l'impossibilité d'utiliser des méthodes d'élimination de type Gauss-Jordan. En effet à l'inverse du déterminant, le permanent n'est pas un morphisme de groupe c'est à dire qu'il n'est pas multiplicatif ($Perm(A \cdot B) \neq Perm(A) \cdot Perm(B)$). Toutefois on peut exhiber une représentation déterminentale d'un permanent[PA13]. On peut montrer [Gre11] que :

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

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

$$A_3 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix}$$
(2.94)

Le graphe associé peut être représenté en Figure 2.13.

On définit l'*Arithmetic Branching Program* (ABP) comme la somme du poids des chemins du graphe ; le poids d'un chemin étant défini comme le produit des poids des arcs formant ce chemin. Dans le cas du graphe 2.13, l'APB vaut donc

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

$$(2.95)$$

Ainsi l'APB du graphe associé à la matrice A_3 correspond de fait au permanent de cette même matrice. A présent on opère une transformation laissant invariante la

CHAPITRE 2. TRAITEMENT RELATIVISTE DU NOYAU ATOMIQUE



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

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



FIGURE 2.14 – Graphe G_t après transformation, les sommets extrémaux sont fusionnés, le poids des boucles supplémentaires vaut 1 dans ce cas

On peut à présent considérer la matrice d'adjacence pondérée \mathcal{A} de \mathcal{G}_t , dont les éléments \mathcal{A}_{ij} prennent la valeur des poids des arcs connectant les sommets *i* et *j* et 0 si les sommets ne sont pas connectés. On obtient ainsi une matrice de dimension 7 (correspondant au nombre de sommets du graphe)

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & a_{11} & a_{21} & a_{31} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & a_{33} & a_{23} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & a_{13} & a_{33} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & a_{13} & 0 & a_{23} \\ a_{22} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ a_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ a_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(2.96)

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

$$Det(\mathcal{A}) = APB(A_3) = Perm(A_3)$$
(2.97)

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

2.4.3 Modèles d'appariement

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

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

- BCS en Section 2.4.3.
- Bogolioubov en Section 2.4.4.
- PBCS en Section 2.4.5.

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

Modèle BCS

Historiquement l'approche BCS⁶ permet de rendre compte d'un état quantique, constitué de paires de Cooper. Dans ce cas l'état fondamental d'un système infini peut s'exprimer

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k c_{\bar{k}}^{\dagger} c_k^{\dagger}) |0\rangle$$
(2.98)

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

$$\langle \Psi_{\rm BCS} | \Psi_{\rm BCS} \rangle = \prod_{k>0} (u_k^2 + v_k^2) = 1$$
 (2.99)

Ce qui revient à imposer

$$\forall k \qquad u_k^2 + v_k^2 = 1 \tag{2.100}$$

Cette description permet de traduire la formation de paires de Cooper dans les états du noyau les plus proches de la surface de Fermi. Toutefois (2.98) correspond à une superposition cohérente d'états quantiques appariés.

$$|\Psi_{\rm BCS}\rangle = |0\rangle + \sum_{k>0} \frac{v_k}{u_k} c_k^{\dagger} c_{\bar{k}}^{\dagger} |0\rangle + \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \frac{v_k v_{k'}}{u_k u_{k'}} c_{\bar{k}}^{\dagger} c_{k'}^{\dagger} c_{\bar{k}'}^{\dagger} c_{\bar{k}}^{\dagger} + \dots$$
(2.101)

Ce qui revient à dire qu'il ne s'agit pas d'une fonction d'onde avec un nombre de paires bien défini, mais d'une superposition de différents états. La théorie BCS ne conserve donc pas le nombre de particules du système. Plus fondamentalement, le fait que la valeur moyenne de l'opérateur création de paires $\langle c_k^{\dagger} c_k^{\dagger} \rangle$ prenne une valeur non nulle dans son état fondamental traduit la présence d'un ordre-diagonal à longue distance. L'existence de cet ordre s'explique par la brisure d'une symétrie de jauge U(1). Au sens de la théorie de Ginzburg-Landau, on réalise une brisure de symétrie spontanée du système, énergétiquement favorisée pour les noyaux à couches ouvertes. L'opérateur de Casimir associé à cette symétrie correspond à l'opérateur

^{6.} Des initiales de ses concepteurs Bardeen, Cooper et Schrieffer

nombre de particules. Après cette brisure spontanée, le système ne possède plus de nombre de particules correctement défini. On peut quantifier cette brisure de symétrie en calculant la variance du nombre de particules dans l'état BCS.

$$\langle \Psi_{\rm BCS} | \hat{N}^2 | \Psi_{\rm BCS} \rangle - N^2 = 4 \sum_{k>0} u_k^2 v_k^2$$
 (2.102)

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

$$N = \langle \Psi_{\text{BCS}} | \hat{N} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2$$
(2.103)

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

$$\hat{H}' = \hat{H} - \mu N \tag{2.104}$$

Ce multiplicateur de Lagrange correspond au potentiel chimique du système, au sens où il quantifie la variation de l'énergie du système lorsque l'on change le nombre de particules. Toutefois l'utilisation de l'ansatz BCS engendre des pathologies pour certains noyaux. En effet, à interaction d'appariement fixée, pour des noyaux proches des *drip-lines* où la surface de Fermi est très proche des états du continuum les énergies de séparation des neutrons sont de l'ordre de grandeur des gaps d'appariement. Les paires de Cooper issues de (2.98) peuvent ainsi diffuser sur les états du continuum ce qui augmente artificiellement l'intensité des corrélations d'appariements. Ces paires peuvent ainsi former un gaz de neutrons non physique augmentant artificiellement le rayon neutronique du noyau. En conséquence l'approximation BCS ne fait sens que pour des noyaux suffisamment éloignés des *drip-lines* ce qui sera le cas des noyaux étudiés dans le cadre de cette étude. Une approche plus universelle et élégante, permet de traiter sur un pied d'égalité corrélations du bulk et corrélations d'appariement. C'est le formalisme de Bogolioubov.

2.4.4 Formalisme de Bogolioubov

A contrario de l'ansatz BCS, l'approche de Bogolioubov [RS80][SV66][Jan79] modifie la structure de l'état de référence Hartree $|\Phi_0\rangle$ pour passer d'un déterminant de Slater, à une forme plus générale. Les degrés de liberté du système ne sont plus des fermions indépendants habillés par les effets du milieu. Il s'agit en fait des quasiparticules décrites par les opérateurs à un corps $\{\beta_i, \beta_i^{\dagger}\}$ définis directement par les opérateurs formant l'état de Hartree pur $\{b_i, b_i^{\dagger}\}$; on qualifiera la base formée par ces opérateurs, de base canonique ou de Hartree. On passe d'un jeu d'opérateur à l'autre par transformation linéaire et unitaire la plus générale qui peut s'écrire.

$$\beta_i = \sum_j U_{ij}^* b_j + V_{ji}^* b_j^{\dagger}$$
(2.105)

On peut écrire cette transformation sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^{\dagger} & V^{\dagger} \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^{\dagger} \end{pmatrix}$$
(2.106)

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

$$\{\beta_i, \beta_j\} = \{\beta_i^{\dagger}, \beta_j^{\dagger}\} = 0, \{\beta_i, \beta_j^{\dagger}\} = \delta_{ij}$$
(2.107)

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

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{i>0} \beta_i |0\rangle \tag{2.108}$$

En conséquence l'état du vide associé à ces opérateurs s'exprime

$$\forall i, \quad \beta_i \left| \Phi_0 \right\rangle = 0 \tag{2.109}$$

Le nouvel état de référence (2.108) ne conserve pas le nombre de particules, ce qui traduit la brisure de symétrie de jauge associée.

$$\hat{N} \left| \Phi_0 \right\rangle \neq N \left| \Phi_0 \right\rangle \tag{2.110}$$

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



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

Formellement la transformation peut matriciellement s'exprimer

$$\begin{pmatrix} U^{\dagger} & V^{\dagger} \\ V^{T} & U^{T} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} D^{\dagger} & 0 \\ 0 & D^{T} \end{pmatrix}}_{\mathcal{B}} \begin{pmatrix} \bar{U}^{\dagger} & \bar{V}^{\dagger} \\ \bar{V}^{T} & \bar{U}^{T} \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} C^{\dagger} & 0 \\ 0 & C^{T} \end{pmatrix}}_{\mathcal{B}}$$
(2.111)

Cette transformation permet d'exprimer l'état de référence (2.108) dans la base canonique sous la forme

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{i>0} \left(u_i + v_i a_i^{\dagger} a_{\overline{i}}^{\dagger} \right) |0\rangle$$
(2.112)

Avec

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

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

D'une part la densité à 1-corps, identique à celle de la théorie de Hartree exposée précédemment

$$\rho_{ij} = \frac{\langle \Phi_0 | b_j^{\dagger} b_i | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} = \rho_{ji}^*$$
(2.113)

et d'autre part le tenseur d'appariement (ou densité anomale)

$$\kappa_{ij} = \frac{\langle \Phi_0 | b_j b_i | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} = -\kappa_{ji} \tag{2.114}$$

Ce tenseur est l'objet fondamental permettant de quantifier la brisure de la symétrie de jauge. Dans le langage des transitions de phase, on peut voir $|\kappa|$ comme le paramètre d'ordre quantifiant le passage d'une phase non-superfluide ($|\kappa|=0$) à une phase superfluide ($|\kappa| \neq 0$). Ces deux grandeurs peuvent s'exprimer comme fonction des paramètres de la transformation de Bogolioubov (2.106)

•
$$\rho_{ij} = \sum_k V_{ik}^* V_{kj}^T$$

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

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

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix}$$
(2.115)

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

$$\mathcal{E}^{\text{RHB}} \equiv \mathcal{E}^{\text{RHB}}[\mathcal{R}, \phi_m] \tag{2.116}$$

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

$$\delta \left[\mathcal{E}^{\text{RHB}}[\mathcal{R}] - \mu N - Tr\{\Lambda(\mathcal{R}^2 - \mathcal{R})\} \right] = 0$$
(2.117)

Ce qui permet d'aboutir aux nouvelles équations de champ moyen pour la densité et les champs mésoniques :

$$[\mathcal{H}, \mathcal{R}] = 0 \tag{2.118}$$

$$\left(-\Delta + m_{\phi_m}^2\right)\phi_m(r) = s_{\phi_m}(r) \tag{2.119}$$

Où l'Hamiltonien de Hartree-Bogoliubov s'écrit

$$\mathcal{H} = \frac{\delta \mathcal{E}^{\mathsf{RHB}}[\mathcal{R}]}{\delta \mathcal{R}}$$
(2.120)

L'équation RHB (*Relativistic Hartree Bogoliubov*) (2.118) peut s'exprimer en termes matriciels

$$\mathcal{H}\begin{pmatrix} U\\V \end{pmatrix}_{i} = \begin{pmatrix} h-\lambda & \Delta\\-\Delta^{*} & -h^{*}+\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U\\V \end{pmatrix}_{i} = E_{i} \begin{pmatrix} U\\V \end{pmatrix}_{i}$$
(2.121)

Où h est le champ de Dirac auto-cohérent représentant au pseudo-hamiltonien de Hartree (2.82)

$$h = \frac{\delta \mathcal{E}^{\mathsf{RHB}}[\mathcal{R}]}{\delta \rho} \tag{2.122}$$

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

$$\Delta = \frac{\delta \mathcal{E}^{\mathsf{RHB}}[\mathcal{R}]}{\delta \kappa} \tag{2.123}$$

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

$$\Delta = \begin{pmatrix} \Delta_{++} & \Delta_{+-} \\ \Delta_{-+} & \Delta_{--} \end{pmatrix}$$
(2.124)

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

$$\Delta_{ab}(r,r') = \frac{1}{2} \sum_{cd} \mathcal{V}_{abcd}^{\text{pair}}(r,r') \kappa_{dc}(r,r')$$
(2.125)

Où les indices $\{a, b, c, d\}$ référent aux indices spinoriels. L'étude de la structure relativiste de l'appariement [SR02] permet d'évaluer les différentes contributions de Lorentz aux champs d'appariement (2.124). Il apparaît que les termes Δ_{+-} et Δ_{-+} sont plus petits (d'environ un ordre de grandeur) que Δ_{++} . D'autre part le terme Δ_{--} ne se couple que très faiblement avec les états proches de la surface de Fermi. En conséquence de quoi Δ_{--} n'a que très peu d'influence sur l'appariement du système. Aussi on considérera par la suite que le champ de Bogolioubov comme un objet purement non-relativiste. Dans les faits on utilisera une force d'appariement de Gogny non-relativiste [GLELR96], de portée finie afin de ne pas générer de divergence ultra-violette, pouvant s'exprimer sous la forme

$$\mathcal{V}^{\text{Pair}}(r_1, r_2) = \sum_{i=1,2} e^{\left(\frac{r_1 - r_2}{\mu_i}\right)^2} [W_i + B_i P^{\sigma} - H_i P^{\tau} - M_i P^{\sigma} P^{\tau}] \quad (2.126)$$

Le Hamiltonien d'appariement associé peut s'écrire

$$H_{\text{Pair}} = \sum_{i,i'} \mathcal{V}_{i,i'}^{\text{Pair}} a_i^{\dagger} a_{\bar{i}'}^{\dagger} a_{i'} a_{\bar{i}}$$
(2.127)

On construit ainsi un modèle relativiste hybride. Pour l'interaction dans le canal particule-trou le traitement est totalement relativiste, pour le canal particule-particule on utilise l'interaction non-relativiste (2.126) ajustée sur les données. On peut valider ce modèle en comparant les énergies de séparation à deux neutrons pour des isotopes de l'étain dans le cadre d'une approche totalement relativiste, d'une approche hybride comparée aux données expérimentales (Figure 2.16).



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

L'approche *RHB* permet l'obtention de très bons résultats pour la prise en compte de l'appariement de manière universelle[GCP09][HBG⁺02]. Néanmoins il faut garder à l'esprit que cette méthode, à l'instar de la méthode BCS, ne permet qu'une approximation de l'état fondamental du système. En effet cet état n'est plus état propre de l'opérateur nombre, malgré la correction apportée par la contrainte sur le nombre moyen de particules. Pour une description plus complète de l'effet de ces corrélations il est impératif de restaurer la symétrie brisée, c'est l'objet de la section suivante.

Approche perturbative

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

2.4.5 État BCS projeté

En restreignant notre étude aux noyaux éloignés des *drip-lines*, on peut sans perte de généralité se concentrer sur la forme de l'ansatz BCS (2.98). En effet on pourra toujours s'y ramener dans le cadre du formalisme HFB par une transformation dans la base canonique (2.112). L'état de référence de notre théorie, n'est comme nous l'avons vu, pas un état propre de l'opérateur nombre de particules. Il s'agit d'un mélange de plusieurs états possédant chacun un nombre de nucléons bien définis. La contrainte variationnelle n'a pour effet que de favoriser la contribution de l'état possédant le bon nombre de particules. De fait une théorie présentant une brisure de symétrie ne saurait rendre complètement compte des corrélations. Spécifiquement pour une faible interaction d'appariement les modèles HFB où BCS prédiront des corrélations inexistantes. Il faut être à même de raffiner notre théorie en restaurant la symétrie brisée. Ici on étudiera l'approche dite PBCS (*Projected BCS*). Considérons plus précisé plus haut le nombre de nucléons N est associé à l'invariance de

rotation sous la jauge U(1). L'équation différentielle caractérisant ce groupe peut s'écrire

$$-i\frac{\delta\left|\Phi\right\rangle}{\delta\theta} = \hat{N}\left|\Phi\right\rangle \tag{2.128}$$

Où θ désigne l'angle de jauge. Les solutions de (2.128) correspondent à des états dégénérés en énergie et brisant le nombre de particules [Hup11] (ce qui est par exemple le cas d'un vide de BCS ou de Bogolioubov)

$$|\Phi(\theta + \delta\theta)\rangle = \mathcal{R}(\delta\theta) |\Phi(\theta)\rangle \tag{2.129}$$

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

$$|\Phi^{N}\rangle = \hat{P}_{N} |\Phi(\theta)\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\theta e^{i\theta(\hat{N}-N)} |\Phi(\theta)\rangle$$
(2.130)

Dans ce cas le facteur $e^{i\theta N}$ est un poids permettant d'annuler les contributions ne possédant pas le bon nombre de particules. Ainsi, on peut définir à partir d'une théorie brisant une symétrie une technique permettant la restauration systématique de cette symétrie. Explicitement pour un état BCS dans un espace de Fock à N-corps, on peut écrire l'état projeté

$$|\Phi^N\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \left(e^{i\theta(\hat{N}-N)} \prod_{i>0} \left(u_i + v_i a_i^{\dagger} a_{\bar{i}}^{\dagger} \right) |0\rangle \right)$$
(2.131)

Par la suite on posera pour plus de concision $x_i = \frac{v_i}{u_i}$. On peut ré-exprimer (2.131) sous la forme

$$|\Phi^{N}\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\theta e^{-i\theta N} \sum_{k} \frac{1}{k!} e^{2i\theta k} \left(\sum_{i} x_{i} a_{i}^{\dagger} a_{\overline{i}}^{\dagger}\right)^{k} |0\rangle$$
(2.132)

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

$$|\Phi^{N}\rangle = \frac{1}{N!} \left(\sum_{i} x_{i} a_{i}^{\dagger} a_{\overline{i}}^{\dagger}\right)^{N} |0\rangle = \frac{\left(\Gamma^{\dagger}\right)^{N}}{N!} |0\rangle \qquad (2.133)$$

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

$$\Gamma^{\dagger} = \sum_{i} x_{i} a_{i}^{\dagger} a_{\overline{i}}^{\dagger} \tag{2.134}$$

Ici (2.133) forme un état collectif de paires condensées, cette forme a l'avantage de permettre une interprétation plus simple de cet état. L'état projeté s'exprime comme une somme de produits de créateurs a_i^{\dagger} pondérés par les coefficients x_i . On peut passer d'un état à N - 1 où N + 1 en ajoutant ou retirant un jeu d'opérateur $a_i^{\dagger}a_i^{\dagger}$. En tant que superposition d'état cohérents, les opérateurs créations de paires $P_i^{\dagger} = a_i^{\dagger}a_i^{\dagger}$ vérifient

$$\left(P_i^{\dagger}\right)^2 = 0 \tag{2.135}$$

En utilisant (2.135) on peut exhiber les propriétés de récurrence de l'état projeté ([Row01], [SB08])

$$|\Phi^N\rangle = |\Phi^N(i)\rangle + x_i \sqrt{N} P_i^{\dagger} |\Phi^{N-1}(i)\rangle$$
(2.136)

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

$$\langle \Phi^{N} | \Phi^{N} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i} x_{i}^{2} \langle \Phi^{N-1} | \Phi^{N-1} \rangle - \frac{1}{N} \sum_{i} x_{i}^{3} \langle \Phi^{N-1} | P_{i}^{\dagger} | \Phi^{N-2} \rangle \quad (2.137)$$

Et d'autre part

$$\langle \Phi^{N} | P_{i}^{\dagger} P_{j} | \Phi^{N} \rangle = x_{i}^{2} x_{j}^{2} \langle \Phi^{N-2} | P_{j}^{\dagger} P_{i} | \Phi^{N-2} \rangle + x_{j} \langle \Phi^{N} | P_{i}^{\dagger} | \Phi^{N-1} \rangle - x_{j}^{2} x_{i} \langle \Phi^{N-1} | P_{j}^{\dagger} | \Phi^{N-2} \rangle + \delta_{ij} x_{i}^{4} \langle \Phi^{N-2} | 1 - N_{i} | \Phi^{N-2} \rangle$$

$$(2.138)$$

Les seules inconnues à déterminer pour connaître totalement l'état projeté sont les x_i . Grâce aux relations de récurrences (2.138) et (2.137) on peut calculer l'énergie du système apparié

$$E_{\text{Pair}} = \frac{\langle \Phi^N | H_{\text{Pair}} | \Phi^N \rangle}{\langle \Phi^N | \Phi^N \rangle}$$
(2.139)

Il reste alors à minimiser cette énergie pour déterminer de manière variationnelle les coefficients de mélange de l'état PBCS. L'utilisation des méthodes de récurrence présente un gros avantage numérique et permet dans ce cadre de réaliser la restauration de symétrie au plus haut niveau de précision possible⁷. Cette méthode permet de prendre en compte les corrélations d'appariement, tout en conservant exactement le bon nombre de particules. Toutefois afin de pouvoir prendre en compte une gamme plus large de corrélations, on peut présenter un autre ansatz dont la construction est une généralisation de la méthode PBCS présentée précédemment. Cette généralisation est utile pour décrire notamment la coexistence des appariement protons et neutrons mais surtout des corrélations à 4-corps de type quartet.

2.4.6 Corrélations de Quartets

Depuis longtemps [FV63] l'existence de corrélations à 4-corps dans l'état fondamental des noyaux N=Z est supposée. Un premier argument provient du fait que dans les méthodes de types BCS ou Bogolioubov, on n'obtient usuellement pas de coexistence entre appariement proton-proton ou neutron-neutron en même temps que l'appariement proton-neutron. Il est toutefois important de noter que cette non coexistence n'est pas une pathologie inhérente au formalisme[GW68] mais relève plutôt de l'implémentation actuelle des équations de Bogolioubov. La force nucléaire étant indépendante de la charge des particules l'intensité de l'appariement proton-neutron devrait être du même ordre de grandeur de la même intensité que les autres types de corrélations. Toutefois on peut négliger ces corrélations pour des noyaux lourds qui présentent un important excès de neutrons. En effet les neutrons et les protons les plus proches de la surface de Fermi occupent dans ce cas des couches principales différentes. En conséquence, les éléments de matrices de l'interaction proton-neutron dans ce système seraient de très faible amplitude. Toutefois pour les noyaux légers et particulièrement pour les noyaux dont le nombre de protons est identique au nombre de neutrons ces approximations ne font plus sens. De plus l'interprétation de bandes rotationnelles dans les spectres expérimentaux de certains noyaux (¹²C,²⁰Ne où ²⁴Mg) tend à indiquer la présence d'agrégats de particules alpha dans l'état fondamental. L'étude du phénomène de *clustering* fera l'objet du Chapitre 3. La préformation au sein du noyau de clusters à 4 corps, incite fortement à l'étude de l'impact corrélations de quartets sur la structure nucléaire. Il existe plusieurs façons d'incorporer des corrélations de ce type. Toutefois pour imposer la conservation du nombre de quartet, le plus simple est d'étendre le formalisme introduit à la section précédente. On part

^{7.} On réalise de fait l'équivalent d'une VAP(Variation After Projection)

toujours d'une interaction d'appariement à deux-corps et l'on considère toutes les configurations de paires comme indiqué en Figure 2.17.



FIGURE 2.17 – Les différents agencements possibles pour les paires nucléoniques. T indique l'isospin total, et S le spin total.

Toutefois pour simplifier le problème on ne conserve que l'agencement vectoriel dans le canal d'isospin. Dans le cadre de cette approximation, on suppose le quartet de notre modèle est composé de paires de Cooper dont l'isospin total sera nul. Cette restriction se justifie a-posteriori par la faiblesse de la contribution des termes isoscalaires [SS16]. On généralise (2.127) pour le cas d'une interaction vectorielle dans le canal d'isospin où l'isospin est explicitée.

$$H_{\text{Pair}} = -\sum_{i,j,\tau} V_{ij} P_{i,\tau}^{\dagger} P_{j,\tau}$$
(2.140)

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

• Proton-Proton : $P_{i,-1} = \pi_i^{\dagger} \pi_{\overline{i}}^{\dagger}$

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

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

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

A présent il faut construire un ansatz de l'état fondamental de (2.140). Tout d'abord on introduit un opérateur de quartet indépendant Q_{ij}^{\dagger} obtenu en couplant deux paires de Cooper d'isospin total T = 0.

$$Q_{ij}^{\dagger} = \left[P_i^{\dagger} P_j^{\dagger}\right]^{T=0} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\underbrace{\underbrace{P_{i,1}^{\dagger} P_{j,-1}^{\dagger}}_{\text{Proton-Proton}} + \underbrace{P_{i,-1}^{\dagger} P_{j,1}^{\dagger}}_{\text{Proton-Neutron}} - \underbrace{P_{i,0}^{\dagger} P_{j,0}^{\dagger}}_{\text{Proton-Neutron}}\right) \quad (2.141)$$

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

$$Q^{\dagger} = \sum_{i,j} x_{ij} Q_{ij}^{\dagger} \tag{2.142}$$

Où l'on somme sur tous les états construisant le cluster. On peut ainsi construire un état condensé⁸ de quartets rendant compte des corrélations à 4-corps.

$$|\Phi_{\text{Quartet}}\rangle = \left(Q^{\dagger}\right)^{n_Q}|0\rangle \tag{2.143}$$

Où N_q indique le nombre de quartets considéré pour la construction de l'état $|\Phi_{\text{Quartet}}\rangle$. Cet état possède par construction un nombre bien défini de nucléons $N = Z = 2N_Q$ et un isospin total T = 0. Dans ce schéma de construction un quartet est un objet corrélé dans l'isoespace et dans l'espace des moments angulaires. De prime abord il ne correspond pas à une structure bien-localisée spatialement comme l'est une particule α . L'étude de la localisation spatiale des paires de Cooper et des quartets est l'objet du chapitre 4. Néanmoins dans l'état, le problème est trop complexe pour être résolu numériquement. On peut simplifier (2.142) en supposant la séparabilité des amplitudes de mélange $x_{ij} = x_i x_j$. Dans le cadre de cette approximation l'opérateur de quartet peut s'écrire en termes d'opérateurs de paires de Cooper $\Gamma_{\tau}^{\dagger} = \sum_i x_i P_{i\tau}^{\dagger}$ identique à l'opérateur (2.134) de la théorie PBCS, où l'indice d'isospin est explicite.

$$A^{\dagger} = 2\Gamma_1^{\dagger}\Gamma_{-1}^{\dagger} - \left(\Gamma_0^{\dagger}\right)^2 \tag{2.144}$$

L'état fondamental (2.143) peut donc s'exprimer comme :

$$|\Phi_{\text{Quartet}}\rangle = \left(2\Gamma_1^{\dagger}\Gamma_{-1}^{\dagger} - \Gamma_0^{\dagger 2}\right)^{N_q}|0\rangle \qquad (2.145)$$

On peut à l'aide du binôme de Newton développer l'état (4.50)

$$|\Phi_{\text{Quartet}}\rangle = \sum_{k} \binom{N_q}{k} (-1)^{N_q - k} 2^k \left(\Gamma_1^{\dagger} \Gamma_{-1}^{\dagger}\right)^k \Gamma_0^{\dagger 2(N_q - k)}$$
(2.146)

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

$$\left|\Phi_{\rm PBCS}\right\rangle^{NN/PP} = \left(\Gamma_1^{\dagger}\Gamma_{-1}^{\dagger}\right)^{N_q}\left|0\right\rangle \tag{2.147}$$

et d'autre part les paires neutron-proton

$$|\Phi_{\rm PBCS}\rangle^{NP} = \Gamma_0^{2N_q} |0\rangle \tag{2.148}$$

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

^{8.} Il s'agit ici d'un état collectif de quartets et non d'un pur condensat bosonique.

Implémentation pratique

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

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

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

2.5 Conclusions

Dans ce chapitre nous avons introduit les éléments de formalisme nécessaires au traitement du champ moyen. En particulier le traitement des corrélations de bulk a été présenté sous deux aspects : d'une part en utilisant un développement perturbatif en partant des solution Hartree-Fock d'un problème Hamiltonien (MBPT) décrivant une interaction nucléaire réaliste renormalisée. D'autre part en introduisant les méthodes EDF, sommant les corrélations au travers d'une dépendance phénoménologique en densité des constantes de couplage du Lagrangien. Par la suite on en déduit un pseudo-hamiltonien permettant d'obtenir des équations de type Hartree relativiste (RMF). Nous avons ensuite introduit des méthodes de traitement des corrélations de type particules-particules, tout d'abord en discutant des représentations physiques de système fermioniques sous une forme bosonique équivalente, en exhibant des liens formels entre déterminants et permanents. Puis l'ansatz BCS a été présenté comme premier type de traitement de l'appariement nucléaire. Pour traiter plus finement le problème en considérant tous les états du noyau sur un pied d'égalité, les transformations de Bogolioubov ont été exposées. Ces méthodes reposent sur le principe de brisure de la symétrie de jauge U(1); brisure matérialisée par la non-conservation du nombre de particules. Malgré l'efficacité de ces méthodes, des spéciosités inhérentes à cette brisure imposent de restaurer cette symétrie. Aussi nous avons présenté une méthode de projection d'états de type BCS (PBCS) permettant de remédier à ce problème en utilisant des relations de récurrences. Enfin une approche des corrélations à 4-corps a été proposée en considérant la présence de quartets dans le système. En



guise de conclusion à ce chapitre l'ensemble des méthodes décrites sont présentées en Figure 2.18

FIGURE 2.18 – Figure récapitulative des théories et modèles présentés dans ce chapitre. Les hexagones grisés indiquent un formalisme. Les indications le long des flèches les techniques employées.

2.6 Références

- [ADT⁺] P. Arthuis, T. Duguet, A. Tichai, R.-D. Lasseri, and J.-P. Ebran. Automated generation and evaluation of many-body diagrams. the program adg (v1.0.0) bogoliubov many-body perturbation theory. submitted. 46
- [BMP58] A. Bohr, B. R. Mottelson, and D. Pines. Possible analogy between the excitation spectra of nuclei and those of the superconducting metallic state. *Phys. Rev.*, 110 :936–938, May 1958. 52
- [BMVGM87] A. Bouyssy, J.-F. Mathiot, N. Van-Giai, and S. Marcos. Relativistic description of nuclear systems in the hartree-fock approximation. *Phys. Rev. C*, 36:380–401, Jul 1987. 37

- [EKPnAV11] J.-P. Ebran, E. Khan, D. Peña Arteaga, and D. Vretenar. Relativistic hartree-fock-bogoliubov model for deformed nuclei. *Phys. Rev. C*, 83:064323, Jun 2011. x, 49, 50
 - [EMKV16] J.-P. Ebran, A. Mutschler, E. Khan, and D. Vretenar. Spin-orbit interaction in relativistic nuclear structure models. *Phys. Rev. C*, 94 :024304, Aug 2016. 49
 - [FS07] H. T. Fortune and R. Sherr. Two-proton decay energy and width of ¹⁹Mg(g.s.). *Phys. Rev. C*, 76 :014313, Jul 2007. xi, 53
 - [FV63] B.H. Flowers and M. Vujičić. Charge-independent pairing correlations. Nuclear Physics, 49:586 – 604, 1963. 64
 - [GCP09] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson. Skyrme-hartree-fockbogoliubov nuclear mass formulas : Crossing the 0.6 mev accuracy threshold with microscopically deduced pairing. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :152503, Apr 2009. 62
- [GLELR96] T. Gonzalez-Llarena, J.L. Egido, G.A. Lalazissis, and P. Ring. Relativistic hartree-bogoliubov calculations with finite range pairing forces. *Physics Letters B*, 379(1):13 – 19, 1996. 61
 - [Gre11] Bruno Grenet. An Upper Bound for the Permanent versus Determinant Problem. Manuscript, 2011. 54
 - [GW68] J. N. Ginocchio and J. Weneser. Isospin invariance and the pairingforce problem. *Phys. Rev.*, 170 :859–879, Jun 1968. 64
 - [HBG⁺02] S. Hilaire, J.-F. Berger, M. Girod, W. Satuła, and P. Schuck. Mass number dependence of nuclear pairing. *Physics Letters B*, 531(1):61 - 66, 2002. 62
 - [HS83] C.J. Horowitz and Brian D. Serot. Properties of nuclear and neutron matter in a relativistic hartree-fock theory. *Nuclear Physics A*, 399(2):529 – 562, 1983. 38
 - [Hup11] G. Hupin. *Density functional approaches for pairing in finite size systems*. Theses, Université de Caen, September 2011. 63
 - [Jan79] D. Janssen. A generalized hartree-fock-bogoliubov approach for the description of band structures in nuclei : (ii). the generalized hartreefock-bogoliubov theory in the intrinsic frame of reference. *Nuclear Physics A*, 331(2) :329 – 352, 1979. 58
 - [Kar10] Felix Karbstein. Integrating out the dirac sea in the walecka model. *Phys. Rev. C*, 81 :045206, Apr 2010. x, 39
 - [Lin74] I Lindgren. The rayleigh-schrodinger perturbation and the linkeddiagram theorem for a multi-configurational model space. *Journal* of Physics B : Atomic and Molecular Physics, 7(18) :2441, 1974. 41
 - [MP34] Chr. Møller and M. S. Plesset. Note on an approximation treatment for many-electron systems. *Phys. Rev.*, 46:618–622, Oct 1934. 41
 - [PA13] Polya and G. Aufgabe. Arch. Math. Phys., 20:424, 1913. 54

- [PG95] D. PERRET-GALLIX. Towards a complete feynman diagrams automatic computation system. *International Journal of Modern Physics* C, 06(04) :531–540, 1995. 43
- [Row01] D.J. Rowe. Restoration of particle number as a good quantum number in bcs theory. *Nuclear Physics A*, 691(3):691 – 709, 2001. 63
- [RPPnAB16] C. Robin, N. Pillet, D. Peña Arteaga, and J.-F. Berger. Description of nuclear systems with a self-consistent configuration-mixing approach : Theory, algorithm, and application to the ¹²C test nucleus. *Phys. Rev. C*, 93 :024302, Feb 2016. 67
 - [RS80] P. Ring and P. Schuck. *The nuclear many-body problem*. Springer-Verlag, New York, 1980. 58
 - [SB08] N. Sandulescu and G. F. Bertsch. Accuracy of bcs-based approximations for pairing in small fermi systems. *Phys. Rev. C*, 78 :064318, Dec 2008. 63
 - [SB09] I Shavitt and R Bartlett. *Many Body Methods in Chemistry and Physics*. Cambridge Press, 2009. 42, 46
 - [SR02] M. Serra and P. Ring. Relativistic hartree-bogoliubov theory for finite nuclei. *Phys. Rev. C*, 65 :064324, Jun 2002. xi, 61, 62
 - [SS16] M. Sambataro and N. Sandulescu. Isoscalar-isovector proton-neutron pairing and quartet condensation in n = z nuclei. *Phys. Rev. C*, 93 :054320, May 2016. 65
 - [STE03] P. STEVENSON. Automatic generation of vacuum amplitude manybody perturbation series. *International Journal of Modern Physics C*, 14(08) :1135–1141, 2003. 43
 - [SV66] E. Salusti and G. Varcaccio. On a generalized bogoliubov transformation in nuclear physics. *Il Nuovo Cimento B (1965-1970)*, 42(2):378– 381, Apr 1966. 58
 - [TLBR16] Alexander Tichai, Joachim Langhammer, Sven Binder, and Robert Roth. Hartree–fock many-body perturbation theory for nuclear ground-states. *Physics Letters B*, 756 :283 – 288, 2016. x, 46
 - [Tob57] W. Tobocman. Many-body perturbation theory. *Phys. Rev.*, 107 :203–208, Jul 1957. 41

Chapitre 3

Symétries brisées, phénomènes émergents et agrégation nucléaire

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

Isaac Newton

Sommaire

| 3.1 | Symét | ymétries spatiales | | |
|-----|----------------------|-------------------------------------|-----|--|
| | 3.1.1 | Introduction et définitions | 73 | |
| | 3.1.2 | Symétries et spéciosités | 77 | |
| | 3.1.3 | Motivations expérimentales | 79 | |
| | 3.1.4 | Développement multipolaire | 80 | |
| 3.2 | Réalis | ation pratique | 82 | |
| | 3.2.1 | Systèmes à symétrie axiale | 82 | |
| | | Réalisation formelle | 82 | |
| | | Schéma de résolution | 84 | |
| | | Optimisations numériques | 85 | |
| | | Résultats pour l'Uranium 234 | 86 | |
| | 3.2.2 | Systèmes octupolaires | 88 | |
| | | Motivation | 88 | |
| | | Extension formelle | 88 | |
| | | Résultats pour le Radium 224 | 89 | |
| | 3.2.3 | Systèmes triaxialement déformés | 90 | |
| | | Réalisation formelle | 90 | |
| | | Résultats pour le Platine 190 | 92 | |
| | | Conclusions | 95 | |
| 3.3 | Cham | p-moyen sous contraintes multiples | 95 | |
| | 3.3.1 | Problématique | 95 | |
| | 3.3.2 | Algorithmes bio-mimétiques | 96 | |
| | | Bio-mimétisme | 97 | |
| | 3.3.3 | Résultats | 98 | |
| 3.4 | Agrégation nucléaire | | 99 | |
| | 3.4.1 | Introduction | 99 | |
| | 3.4.2 | Champ-moyen relativiste et clusters | 101 | |

| | 3.4.3 | Mesure de localisation |
|-----|-------------|---|
| | 3.4.4 | Origines de l'agrégation nucléaire |
| | | Dispersion spatiale |
| | | Influence de la déformation sur la dispersion 110 |
| 3.5 | Trans | ition de phases quantiques 112 |
| | 3.5.1 | D'une symétrie continue à une symétrie discrète 112 |
| | 3.5.2 | Oxygène 16 : Résultats du champ-moyen 113 |
| 3.6 | Conclusions | |
| 3.7 | Références | |

3.1 Symétries spatiales

3.1.1 Introduction et définitions

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

$$[\hat{H}, \hat{O}] = 0 \tag{3.1}$$

L'Hamiltonien exact contenant l'interaction nucléaire nue, possède certaines symétries, issues de la structure des interactions fondamentales. Plus précisément dans le cadre d'une approche relativiste, l'interaction reste invariante sous les transformations du groupe de Poincaré, groupe de Lie non-compact à 10 dimensions. Ce groupe correspond au produit semi-direct des translations et du groupe de Lorentz

$$\mathcal{R}^{(1,3)} \rtimes O(1,3)$$
 (3.2)

Les transformations de ce groupe, qui laissent invariante l'interaction sont donc les translations, rotations, réflexion spatiale (parité), renversement du temps, rotation dans l'espace d'isospin ainsi que l'échange des deux nucléons et enfin les *boost* de Lorentz. Ces symétries laissent des traces observables expérimentalement, en particulier au niveau des spectres d'excitation des noyaux. Toutefois les symétries fondamentales de l'Hamiltonien exact ne sont pas nécessairement symétries du Hamiltonien de champ-moyen. Pour préciser notre propos considérons une transformation représentée par un opérateur unitaire U vérifiant

$$UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = 1 \tag{3.3}$$

Comme vu précédemment, U est une symétrie du Hamiltonien vrai H si et seulement si

$$[H, U] = 0 (3.4)$$

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

$$U^{-1}\tilde{h}(\bar{\rho})U = \tilde{h}(\rho) \tag{3.5}$$

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

$$\bar{\rho} = U\rho U^{-1} = \rho \tag{3.6}$$

Comme vu au chapitre précédent, la matrice densité est définie dans le cadre d'une théorie Hartree-Fock, comme un projecteur des états sur la mer de Fermi. On peut comprendre la condition (3.5) comme une traduction du fait que ρ commute avec U si la transformation U laisse la mer de Fermi invariante. La transformation en question transformerait un état $|\lambda\rangle$ appartenant à la mer de Fermi en une superposition linéaire d'états appartenant tous à la mer de Fermi.

$$U \left| \lambda \right\rangle = \sum_{i \in \text{Mer de Fermi}} \left\langle i | \lambda | i \right\rangle \left| i \right\rangle \tag{3.7}$$

Ces symétries se manifestent expérimentalement par la présence de motifs caractéristiques, entre autres dans la structure de certains spectres observables. Toutefois comme brièvement esquissé au Chapitre 2, la différence entre le Hamiltonien vrai et l'Hamiltonien approché constitue l'interaction résiduelle. Cette interaction induit plusieurs types de corrélations, celles d'appariement décrites au chapitre précédent mais également des modes d'excitations collectifs. Ces modes d'excitations peuvent s'interpréter comme des oscillations du champ-moyen. La prise en compte des ces oscillations impose d'aller au-delà d'une pure théorie Hartree-Fock décrivant un champmoyen gelé. D'un point de vue phénoménologique, la prise en compte de ces corrélations collectives est à l'origine de l'apparition de phénomènes émergents traduisant cette collectivité, principalement ici la déformation nucléaire comme schématisé en Figure 3.1. Différents modes collectifs peuvent être à l'origine de ces déformations, en particulier les modes vibrationnels et rotationnels.)



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

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

$$|\lambda\rangle = \sum_{nljm\tau} C^{\lambda}_{nljm\tau} |nljm\tau\rangle$$
(3.8)

C'est à cet état que l'on applique différents jeux de contraintes afin d'imposer des symétries. Certaines de ces contraintes seront relâchées pour permettre au système de les briser. On peut principalement noter les contraintes suivantes.

- Dans le cadre de systèmes auto-liés de taille finie, la mer de Fermi ne peut être laissée invariante par translation spatiale. En effet on peut aisément comprendre que si la densité était invariante par translation, la densité de matière devrait être uniformément distribuée dans tout l'espace. Cette brisure de symétrie forcée, engendre plusieurs spéciosités nécessitant l'introduction de corrections à l'énergie, dites corrections du centre de masse.
- 2. On veut également garantir le fait de pouvoir toujours distinguer les orbitales protons des orbitales neutrons, sans les mélanger. Cela revient à imposer l'invariance des états sous les rotations autour d'un axe (noté z dans ce cas) dans l'espace d'isospin. Pour ce faire il suffit de limiter le développement (3.8)

$$|\lambda, \tau_{\lambda}\rangle = \sum_{nljm} C_{nljm\tau}^{\lambda_{\tau_{\lambda}}} |nljm\tau_{\tau_{\lambda}}\rangle$$
(3.9)

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

$$\mathcal{T} |\lambda\rangle = \sum_{nljm\tau} (-1)^{j+l-m} (\mathcal{C}^{\lambda}_{nljm\tau})^* |nljm\tau\rangle$$
(3.10)

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

- 4. Notre étude porte sur l'étude des propriétés statiques du noyau, aussi dans le cadre d'une théorie de champ-moyen indépendante du temps, les états sont laissés invariants par les translations temporelles, ce qui traduit la conservation de l'énergie du système.
- 5. On peut contraindre le système à l'invariance sous les transformations de parité, il suffit de limiter l'expansion de chacune des orbitales à des états de moment angulaire *l* pair (ou impairs). De fait (3.8) possédera une parité bien définie, restant invariant lors de l'application de l'opérateur parité.
- 6. Enfin on peut contraindre le système à respecter différentes-symétries vis-à-vis du groupe des rotations dans l'espace tridimensionnel, SO(3). Il s'agit d'un groupe de Lie non-abélien, compact de dimension 3 qui est isomorphe localement au groupe SU(2). Les générateurs infinitésimaux associés sont les opérateurs de moments cinétiques J_x, J_y, J_z permettant de représenter les symétries rotationnelles tandis que l'opérateur de Casimir du groupe est $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$. On peut à partir des opérateurs de moments cinétiques distinguer trois cas
 - Les systèmes à symétries sphériques, dont le Hamiltonien commute avec les trois composantes du moment cinétique total \vec{J}

$$[H, \vec{J}] = 0 \tag{3.11}$$

Cette symétrie peut être imposée en limitant le développement de (3.8)

$$|\lambda j_{\lambda} m_{\lambda}\rangle = \sum_{n l \tau} C_{n l \tau}^{\lambda} |n l j_{\lambda} m_{\lambda} \tau\rangle$$
(3.12)

On peut comprendre les conditions nécessaires à la conservation de cette symétrie en introduisant les opérateurs d'échelles $J_{\pm} = J_x \pm i J_y$ agissant sur (3.12)

$$J_{\pm} |\lambda j_{\lambda} m_{\lambda} \rangle = \sqrt{j_{\lambda} \mp m_{\lambda}} \sqrt{j_{\lambda} \pm m_{\lambda} + 1} |\lambda j_{\lambda} m_{\lambda \pm 1} \rangle$$
(3.13)

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

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

$$[H, J_z] = 0 (3.14)$$

On peut contraindre cette symétrie en limitant le développement de (3.8) aux états de m_{λ} fixé

$$|\lambda m_{\lambda}\rangle = \sum_{nlj\tau} C^{\lambda}_{nlj\tau} |nljm_{\lambda}\tau\rangle$$
(3.15)

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

— Les systèmes triaxiaux, où l'on ne conserve qu'une symétrie simplex ¹ du développement (3.8), ce qui revient à ne conserver qu'un seul plan de symétrie du noyau, permettant ainsi de décrire des formes très générales.

Néanmoins, si l'on est toujours à même de construire un Hamiltonien triaxial, axial ou sphérique, les solutions obtenues ne représenteront pas forcément l'état d'équilibre du noyau. En effet un tel état peut être stationnaire, mais ne correspond pas nécessairement au minimum en énergie. Chacune des symétries dont on autorise la brisure, peut donc abaisser l'énergie du système, mais il ne suffit pas d'exhiber une telle solution : il faut également prouver qu'elle représente un minimum en énergie pour décrire l'état fondamental du système, comme on peut le voir en Figure 3.2.

^{1.} États propres de l'opérateur renversement du temps qui sera définie précisément en section 3.2.3



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

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

3.1.2 Symétries et spéciosités

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

$$\rho_t = e^{i\theta S} \rho^{(0)} e^{-i\theta S} \tag{3.16}$$

En utilisant la formule de Baker-Campbell-Hausdorff[Cam97] cette transformation peut s'exprimer comme un développement polynomial en θ :

$$\rho_t = \rho^{(0)} + i\theta[S, \rho_0] - \frac{\theta^2}{2} [S, [S, \rho_0]] + o(\theta^2)$$

= $\rho^{(0)} + \rho^{(1)} + \rho^{(2)} + \dots$ (3.17)

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

de la mer de Fermi notés h, h'. Dans ce cadre la matrice $\rho^{(0)}$ s'exprime

$$\rho_{hh'}^{(0)} = \delta_{hh'} \quad \rho_{pp'}^{(0)} = \rho_{ph}^{(0)} = 0 \tag{3.18}$$

Les variation de la densité aux ordres 1 et 2 peuvent s'exprimer en utilisant les relations (3.17)

$$\rho_{ph}^{(1)} = iS_{ph} \qquad \rho_{hp}^{(1)} = -iS_{ph} \qquad \rho_{hh'}^{(1)} = \rho_{pp'}^{(1)} = 0$$

$$\rho_{ph}^{(2)} = \frac{1}{2} \left[\sum_{p'} S_{pp'} S_{p'h} - \sum_{h'} S_{ph'} S_{h'h} \right]$$

$$\rho_{hp}^{(2)} = \frac{1}{2} \left[\sum_{p'} S_{hp'} S_{p'p} - \sum_{h'} S_{hh'} S_{h'p} \right]$$

$$\rho_{pp'}^{(2)} = \sum_{h} \rho_{ph}^{(1)} \rho_{hp'}^{(1)}$$

$$\rho_{hh'}^{(2)} = -\sum_{p} \rho_{hp}^{(1)} \rho_{ph'}^{(1)}$$
(3.19)

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

$$\mathcal{E}_{ij}(\rho_t) = \mathcal{E}_{ij}(\rho^{(0)} + \rho^{(1)})$$
(3.20)

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

$$h_{pp'}^{(0)} = \epsilon_p \delta_{pp'} \qquad h_{hh'}^{(0)} = \epsilon_h \delta_{hh'} \qquad h_{ph}^{(0)} = h_{hp}^{(0)} = 0$$
(3.21)

De même la partie résiduelle de l'interaction s'exprime

$$\mathcal{V}_{ij,kl} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho_{ji} \rho_{lk}} \tag{3.22}$$

On peut ainsi réexprimer (3.20) en fonction de (3.21) et (3.22) :

$$\mathcal{E}_{ij}(\rho_t) = h_{ij}(\rho^{(0)}) + \sum_{kl} \mathcal{V}_{ij,kl} \,\rho_{lk}^{(1)}$$
(3.23)

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

$$[h(\rho^{(0)}), \rho^{(0)}] = 0 \tag{3.24}$$

Pour une symétrie S du Hamiltonien on peut écrire

$$h(\rho) = e^{i\theta S} h(\rho^{(0)}) e^{-i\theta S}$$
(3.25)

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

$$[h(\rho_t), \rho_t] = e^{i\theta S} [h(\rho^{(0)}), \rho^{(0)}] e^{-i\theta S} = 0$$
(3.26)

Cette dernière equation devient

$$[h(\rho^{(0)}), \rho^{(1)}]_{ij} + \sum_{kl} \mathcal{V}_{ij,kl} \rho^{(1)}_{kl} = 0$$
(3.27)

En introduisant le vecteur

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} \rho_{ph}^{(1)} \\ \rho_{hp}^{(1)} \end{pmatrix} \tag{3.28}$$

Et la Hessienne de la densité M

$$M = \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \rho \partial \rho} = \begin{pmatrix} A_{ph,p'h'} & B_{ph,p'h'} \\ B^*_{ph,p'h'} & A^*_{ph,p'h'} \end{pmatrix}$$
(3.29)

Dont les éléments A et B s'expriment

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

$$B_{ph,p'h'} = \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \rho_{hp} \rho_{h'p'}} = \mathcal{V}_{ph,p'h'}$$
(3.30)

On peut réécrire l'équation (3.27) matriciellement :

$$M\mathcal{K} = 0 \tag{3.31}$$

Cette équation implique que pour chaque symétrie brisée par l'Hamiltonien Hartree-Fock, la Hessienne de la densité M possède une valeur propre nulle. Ce théorème a deux types de conséquences importantes. Dans le cadre de la matière infinie cette valeur propre correspond à un mode de Goldstone. Dans notre cas, pour un système de taille finie, cette valeur propre correspond à un état spécieux. En particulier quand la densité ρ_t diffère de la densité $\rho^{(0)}$ une symétrie continue du Hamiltonien génère l'apparition d'une infinité de dégénérescences des solutions aux équations de champmoyen. Il s'agit de dégénérescences de Goldstone qui font écho à la dégénérescence des excitations particules-trous. Ces dégénérescences représentés en Figure 3.3 sont signe d'un comportement collectif, comme par exemple une déformation spatiale du noyau. C'est précisément ce comportement collectif que nous nous proposons



FIGURE 3.3 – Représentation des dégénérescences (points noirs) associées à une symétrie continue du Hamiltonien. Dans ce cas il s'agit de la symétrie associée à un groupe U(1)

d'étudier dans les sections à venir.

3.1.3 Motivations expérimentales

Au delà des motivations formelles d'une description de la déformation ou plus généralement des brisures de symétries, des observations expérimentales attestent de la "déformation" des noyaux. L'exemple le plus frappant est la présence de bandes rotationnelles[BBH⁺87] dans les spectres de certains noyaux. Ces structures particulières traduisent le comportement des noyaux lorsqu'il est soumis aux rotations, un noyau déformé ne se comportant pas de la même manière qu'un noyau sphérique. De même la mesure des transitions électromagnétiques des états excités permet une mesure du comportement collectif et des déformations du système [SLW17] [PBM⁺18]. Ainsi on peut en Figure 3.4, montrer l'impact de la déformation sur des observables expérimentalement mesurées. Il est donc fondamental pour un modèle théorique de



FIGURE 3.4 – Spectre expérimental du ²⁰Ne présentant une structure en bandes rotationnelles caractéristique de la déformation nucléaire.

pouvoir formellement prendre en compte les déformations spatiales des noyaux.

3.1.4 Développement multipolaire

Dans un système de taille finie les symétries ne sont pas brisées à proprement parler, la brisure de symétrie est une étape intermédiaire permettant la prise en compte de corrélations collectives. Aussi il faut préciser qu'à chaque fois que l'on parlera de déformations on se placera implicitement dans le référentiel intrinsèque du noyau, les noyaux étant sphériques dans le référentiel du laboratoire. Dans cette section, nous introduirons les outils et quantités nécessaires pour quantifier les déformations nucléaires. Le principe de ces quantités est d'évaluer l'écart entre un système sphérique et le système déformé : le rayon notamment, n'est plus une simple constante mais devient une fonction des coordonnées. Cette fonction peut être développée en série polynomiale; les termes de cette série étant classés par ordre croissant, présentant ainsi des termes linéaires, quadratiques et ainsi de suite. C'est le principe d'un développement multipolaire. Toutefois deux contraintes doivent être imposées pour rendre compte des particularités du noyau. D'abord le noyau atomique étant considéré comme incompressible, le volume total doit être conservé. De plus toutes transformations traduisant une translation du centre du masse de la distribution sans changement de la répartition de matière est spécieuse et ne correspond pas à une réalité observable. On peut introduire des opérateurs déformation $Q_{\lambda\mu}$, traduisant la non-isotropie du noyau et les développer sur une base d'harmoniques sphériques. On peut schématiquement représenter les effets de certains de ces opérateurs, utiles dans le cadre de cette étude, sur les densités de matières en Figure 3.5.



FIGURE 3.5 – Exemples d'action d'opérateurs multipolaires sur la distribution de matière au sein du noyau, les codes axiaux permettent d'obtenir des déformations quadripolaires, les codes brisant la parité permettent d'obtenir en plus des déformations octupolaires et enfin les codes triaxiaux permettent d'incorporer en plus les déformations hexadecapolaires et quadrupolaires triaxiales.

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

$$\mathcal{E}(\rho) = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \tag{3.32}$$

Le jeu de contraintes associées aux déformations s'expriment

$$\langle \Phi_0 | Q_{\lambda\mu} | \Phi_0 \rangle = q_{\lambda\mu} \tag{3.33}$$

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

$$\mathcal{E}'(\rho) = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle - \sum_{\lambda\mu} \Lambda_{\lambda\mu} \left(\langle \Phi_0 | Q_{\lambda\mu} | \Phi_0 \rangle - q_{\lambda\mu} \right)$$
(3.34)

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

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

$$Q_{20} \propto \sum_{i}^{A} \left(2z_i^2 - x_i^2 - y_i^2 \right)$$
(3.35)

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

$$Q_{30} \propto \sum_{i}^{A} \left(z_i^3 - \frac{3}{2} z_i \left(x_i^2 + y_i^2 \right) \right)$$
(3.36)

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

$$Q_{32} \propto \sum_{i}^{A} \left(z_i (x_i^2 - y_i^2) \right)$$
(3.37)

On introduit également pour chaque moment, une quantité adimensionnelle associée permettant la comparaison systématique entre noyaux que l'on note respectivement β_{20} , β_{30} et β_{32} ². Pour alléger les notations pour les moments axiaux { $\lambda \neq 0, \mu = 0$ } on omettra l'indice $\mu = 0$ (*ie* $\beta_{20} = \beta_2$). Muni de ces outils permettant de quantifier la déformation nucléaire, il nous faut à présent détailler la résolution en pratique des équations de champ-moyen relativistes dans un cadre autorisant des brisures de symétries spatiales

3.2 Réalisation pratique

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

3.2.1 Systèmes à symétrie axiale

Réalisation formelle

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

$$f_{i}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} F_{i}^{+}(r, z, \tau_{i})e^{i(\Omega_{i} - \frac{1}{2})\theta} \\ F_{i}^{-}(r, z, \tau_{i})e^{i(\Omega_{i} + \frac{1}{2})\theta} \\ iG_{i}^{-}(r, z, \tau_{i})e^{i(\Omega_{i} - \frac{1}{2})\theta} \\ iG_{i}^{-}(r, z, \tau_{i})e^{i(\Omega_{i} + \frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix}$$
(3.38)

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

2. Plus précisément
$$\beta_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} Q_{20}, \beta_{30} = \sqrt{7\pi} Q_{30}$$
 et $\beta_{32} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} Q_{32}$

qui peut induire une stabilité artificielle du système, empêchant en particulier le traitement d'états très faiblement liés et donc de noyaux très fortement déformés ou très proche des *driplines*. Toutefois des techniques d'extension de cette méthode existent notamment en appliquant des transformations particulières aux fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique [SDNR05],[PSL+17], ce problème reste toutefois ouvert. Ainsi dans le cadre de système à déformation axiale les spineurs de Dirac sont développés sur les états propres d'un potentiel harmonique bidimensionnel déformé

$$V_{OH}(r,z) = \frac{1}{2}M\omega_r^2 r^2 + \frac{1}{2}M\omega_z z^2$$
(3.39)

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

$$|\alpha\rangle = |n_z, n_r, \Lambda, m_s\rangle \tag{3.40}$$

Ou n_r et n_z indiquent les nombres de nœuds des fonctions d'onde de l'oscillateur dans les directions r et z, tandis que Λ et m_s rendent compte des projections des moments angulaires et de spin sur l'axe de symétrie (O_z) . Les nombres quantiques caractérisant les spineurs de Dirac (3.38) s'obtiennent directement à partir des nombres quantiques de l'oscillateur harmonique selon

$$\Omega = \Lambda + m_s \tag{3.41}$$

$$\Pi = (-1)^{n_z + \Lambda} \tag{3.42}$$

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

$$\epsilon_{\alpha} = (2n_r + |\Lambda| + 1)\hbar\omega_r + (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega_z$$
(3.43)

En notant Φ_{α} les fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique (3.39) pouvant s'expliciter

$$\Phi_{\alpha}(\mathbf{r}, s, \tau) = \psi_{n_r}^{\Lambda}(r)\psi_{n_z}(z)\frac{e^{i\Lambda\theta}}{\sqrt{2\pi}}\chi_{\Sigma}(s)\chi_T(\tau)$$
(3.44)

 $\chi_{\Sigma}(s)$ et $\chi_{T}(\tau)$ étant respectivement les spineurs dans l'espace spinoriel et dans l'espace d'isospin. Dans cette equation les fonctions $\psi_{n_{T}}^{\Lambda}(r)$ et $\psi_{n_{Z}}(z)$ correspondent respectivement aux fonctions d'ondes radiales et axiales de l'oscillateur harmonique

$$\psi_{n_r}^{\Lambda}(r) = \beta_r \tilde{\psi}_{n_r}^{\Lambda}(r) = N_{nr}^{\Lambda} \beta_r \sqrt{2\eta^{|\Lambda|}} e^{-\frac{\eta}{2}} L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta)$$
(3.45)

$$\psi_{n_z}(z) = \sqrt{\beta_z} \tilde{\psi}_{n_z}(\xi) = N_{n_z} \sqrt{\beta_z} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_{n_z}(\xi)$$
(3.46)

Ou les paramètres de l'oscillateur s'expriment :

$$\beta_z = \frac{1}{b_z} = \left(\frac{m\omega_z}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}, \beta_r = \frac{1}{b_r} = \left(\frac{m\omega_r}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(3.47)

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

$$\xi = z\beta_z, \eta = r^2\beta_r^2 \tag{3.48}$$

 $H_{n_z}(\xi)$ et $L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta)$ désignent les polynômes de l'Hermite et de Laguerre. Enfin les constantes de normalisations des fonctions d'ondes (3.45) et (3.46) s'expriment

$$N_{n_z} = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}2^{n_z}n_z!}\right)^{\frac{1}{2}} \text{ et } N_{nr}^{\Lambda} = \left(\frac{n_r!}{(n_r + |\Lambda|)!}\right)^{\frac{1}{2}}.$$
 (3.49)

Sur cette base on peut alors développer indépendamment petite et grande composante des spineurs de Dirac (3.38)

$$F_{i}(\mathbf{r},\tau_{i}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} F_{i}^{+}(r,z,\tau_{i})e^{i(\Omega_{i}-\frac{1}{2})\theta} \\ F_{i}^{-}(r,z,\tau_{i})e^{i(\Omega_{i}+\frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix} = \sum_{\alpha}^{\alpha_{\max}} f_{\alpha}^{(i)}(\tau_{i})\Phi_{\alpha}(r,z,\theta)$$
(3.50)

$$G_i(\mathbf{r},\tau_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} G_i^+(r,z,\tau_i)e^{i(\Omega_i - \frac{1}{2})\theta} \\ G_i^-(r,z,\tau_i)e^{i(\Omega_i + \frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix} = \sum_{\bar{\alpha}}^{\bar{\alpha}_{max}} g_{\bar{\alpha}}^{(i)}(\tau_i)\Phi_{\bar{\alpha}}(r,z,\theta)$$
(3.51)

Le choix des bornes des sommes intervenant dans les expressions (3.50) et (3.51) est particulièrement important. Dans les faits on les fixe aux valeurs respectives N_{max} et $\tilde{N}_{\text{max}} = N_{\text{max}} + 1$ pour éviter l'apparition d'états spécieux couplant les états extrémaux[GRT90]. En utilisant l'orthogonalité des fonctions d'ondes (3.44) on peut ré-exprimer les équations de Dirac du système, sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} A_{\alpha,\alpha'} & B_{\alpha,\bar{\alpha}'} \\ B_{\bar{\alpha},\alpha'} & -C_{\bar{\alpha},\bar{\alpha}'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{\alpha'}^{(i)}(\tau_i) \\ g_{\bar{\alpha}'}^{(i)}(\tau_i) \end{pmatrix} = \epsilon_i \begin{pmatrix} f_{\alpha}^{(i)}(\tau_i) \\ g_{\bar{\alpha}}^{(i)}(\tau_i) \end{pmatrix}$$
(3.52)

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

$$A_{\alpha,\alpha'} = 2\delta_{\Lambda\Lambda'}\delta_{m_sm'_s} \int_0^\infty d\xi \psi_{n_z}(\xi)\psi_{n'_z}(\xi) \int_0^\infty d\eta \psi_{n_r}^{\Lambda}(\eta)\psi_{n'_r}^{\Lambda}(\eta) \left[M^*(z,r) + V(z,r)\right]$$
(3.53)
$$C_{\alpha,\alpha'} = 2\delta_{\Lambda\Lambda'}\delta_{m_sm'_s} \int_0^\infty d\xi \psi_{n_z}(\xi)\psi_{n'_z}(\xi) \int_0^\infty d\eta \psi_{n_r}^{\Lambda}(\eta)\psi_{n'_r}^{\Lambda}(\eta) \left[M^*(z,r) - V(z,r)\right]$$
(3.54)

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

$$B_{\alpha,\bar{\alpha}} = \delta_{\Lambda\bar{\Lambda}} \delta_{m_s \bar{m}'_s} \delta_{n_r \bar{n}_r} (-1)^{1/2 - m_s} \beta_z \left(\delta_{n_z \bar{n}_z - 1} \sqrt{\frac{\bar{n}_z}{2}} - \delta_{n_z \bar{n}_z + 1} \sqrt{\frac{n_z}{2}} \right) + \delta_{\Lambda\bar{\Lambda} + 1} \delta_{m_s \bar{m}'_s - 1} \delta_{n_z \bar{n}_z} N^{\Lambda}_{n_r} N^{\bar{\Lambda}}_{\bar{n}_r} \beta_r \int_0^\infty d\eta e^{-\eta} \eta^{\Lambda - 1/2} L^{\Lambda}_{n_r}(\eta) \left(\tilde{L}^{\bar{\Lambda}}_{\bar{n}_r}(\eta) - \Lambda L^{\bar{\Lambda}}_{\bar{n}_r} \right) + \delta_{\Lambda\bar{\Lambda} - 1} \delta_{m_s \bar{m}'_s + 1} \delta_{n_z \bar{n}_z} N^{\Lambda}_{n_r} N^{\bar{\Lambda}}_{\bar{n}_r} \beta_r \int_0^\infty d\eta e^{-\eta} \eta^{\Lambda - 1/2} L^{\Lambda}_{n_r}(\eta) \left(\tilde{L}^{\bar{\Lambda}}_{\bar{n}_r}(\eta) - \bar{\Lambda} L^{\bar{\Lambda}}_{\bar{n}_r} \right) (3.55)$$

Schéma de résolution

Une fois obtenus les éléments de matrice (3.52), déterminer les spineurs solutions de l'équation de Dirac revient à résoudre un problème de diagonalisation de matrices symétriques. Plusieurs optimisations peuvent être apportées afin d'exploiter au mieux la structure diagonale par bloc de spin-parité de cette matrice, structure due à la symétrie axiale conservée. En diagonalisant indépendamment chacun des blocs, on peut ainsi paralléliser directement en utilisant des *pragmas* OpenMp pour cette étape du calcul tout en ne conservant que les éléments non-nuls de la matrice. Dans un second temps on vectorise les opérations matricielles pour augmenter encore la rapidité de cette étape, ces deux optimisations permettent de gagner un facteur $\simeq 4$ par rapport aux codes préexistants. On note également l'avantage de cette vectorisation pour un futur portage vers des architectures de type *GPU* (*Graphics Processing Unit*). Une fois les solutions spinorielles obtenues on peut calculer les expressions des densités scalaires ρ^S et vectorielles ρ^V dans la base de l'oscillateur harmonique selon

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

$$\rho_{\alpha\alpha'}^{V} = 2\sum_{i>0} v_i^2 \left(f_{\alpha}^{(i)} f_{\alpha'}^{(i)} + g_{\alpha}^{(i)} g_{\alpha'}^{(i)} \right)$$
(3.57)

A noter que le facteur 2 provient de la dégénérescence de Kramers[Mei60]. De même on déterminera la densité Coulombienne ρ^C et la densité d'isospin ρ^{τ} . Une fois ces densités obtenues dans la base d'oscillateur harmonique, on les développe dans l'espace des coordonnées

$$\rho(z,r) \propto \sum_{\alpha\alpha'} \rho_{\alpha\alpha'} \delta_{\Lambda\Lambda'} H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) L^{\Lambda}_{n_r}(\eta) L^{\Lambda'}_{n'_r}(\eta)$$
(3.58)

Ces densités dans l'espace coordonnées sont les sources des equations mésoniques de Klein-Gordon s_ϕ

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + m_{\phi}^2\right)\phi^{(m)}(r,z) = s_{\phi^{(m)}}(r,z)$$
(3.59)

De nouveau pour résoudre cette équation, on développe les champs mésoniques dans la base (dite bosonique cette fois) des états d'un oscillateur harmonique, il est d'ailleurs pratique d'utiliser les mêmes paramètres β_0 et $\hbar\omega_0$ que ceux de la base utilisée pour développer les équations de Dirac. On obtient un système matriciel inhomogène d'équations de Klein-Gordon à inverser

$$\sum_{n'_{z}n'_{r}}^{N_{b}} \mathcal{H}_{n_{z}n_{r}n'_{z}n'_{r}}^{(KG)} \phi_{n_{r}n_{z}}^{(m)} = s_{n_{z}n_{r}}^{(\phi_{m})}$$
(3.60)

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

$$\mathcal{H}_{n_{z}n_{r}n'_{z}n'_{r}}^{(KG)} = \delta_{n_{r}n'_{r}}\delta_{n_{z}}n'_{z}\left(\beta_{z}^{2}(n_{z}+\frac{1}{2}+\beta_{r}^{2}(2n_{r}+1)+m_{\phi^{(m)}}^{2}\right) \\ -\frac{\beta_{z}^{2}}{2}\delta_{n_{r}n'_{r}}\left(\sqrt{(n_{z}+1)n'_{z}}\delta_{n_{z}n'_{z}-2}+\sqrt{n_{z}(n'_{z}+1)}\delta_{n_{z}n'_{z}+2}\right) \quad (3.61) \\ +\beta_{r}^{2}\delta_{n_{z}n'_{z}}\left(n'_{r}\delta_{n_{r}n'_{r}-1}+n_{r}\delta_{n_{r}n'_{r}+1}\right)$$

Il suffit alors de résoudre par inversion le système d'équations (3.60) pour déterminer totalement les champs mésoniques massifs du système. Le terme Coulombien se traite quand à lui analytiquement. De mêmes les éléments de matrice d'appariement sont développés dans une base d'oscillateur en faisant usage de la séparabilité de l'interaction choisie[TMR09], les éléments de matrices d'appariement sont précisés au chapitre suivant.

Optimisations numériques

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

de base, permettant d'optimiser la recherche d'un minimum global correspondant à l'état fondamental. Les intégrales dont le calcul est nécessaire aux éléments de matrices sont évaluées par méthode de quadrature de Gauss-Laguerre pour les intégrales bidimensionnelles selon η tandis que les intégrales axiales selon ξ sont évaluées par quadrature de Gauss-Hermite. Pour obtenir une précision satisfaisante tout en présentant un temps de calcul raisonnable les intégrales s'effectuent sur un réseau de taille $N_{\text{Herm}} \times N_{\text{Lag}}$ où $N_{\text{Herm}} = N_{\text{Lag}} = 48$ pour l'ensemble des intégrales rentrant en jeu dans la résolution des équations de champ-moyen. Enfin le nombre de couches d'oscillateurs pour les développements des champs fermioniques est choisi afin de minimiser le temps de calcul tout en préservant une précision optimale quant aux observables à un-corps. Typiquement pour les noyaux légers et de masse intermédiaires (A<40) on choisira un nombre de couches $N_f = 8$ tandis que pour les noyaux les plus lourds on choisira usuellement $N_f = 10 - 12$ enfin pour les noyaux les plus lourds on pourra monter jusqu'à $N_f = 14$. Pour l'ensemble des résultats présentés dans le cadre de ce travail, le nombre de couches a été choisi noyau par noyau en étudiant les variations des observables avec le nombre de couches jusqu'à l'obtention de solutions stables, on pourra trouver un exemple en Annexe H de l'impact de la variation des paramètres de base sur l'évolution de l'énergie du système. L'ensemble des résultats obtenus par la suite (sauf mention contraire) l'ont été dans le cadre de la paramétrisation de portée-finie relativiste DD-ME2[LNcvacVR05].

Résultats pour l'Uranium 234

Pour illustrer les variables et observables issues des codes relativistes développés et optimisés dans le cadre de cette étude on se focalise sur l'exemple d'un noyau lourd dont la description axiale de l'état fondamental est satisfaisante l'234U. Ainsi l'état d'énergie minimale, au niveau RHB possède une déformation prolate, dont le moment quadripolaire adimensionné vaut $\beta_2 = 0.23$. L'énergie de liaison totale calculée de cet état vaut $E_{\rm RHB} = -1775.6$ MeV, valeur à comparer à la valeur expérimentale[WAK⁺17] $E_{Exp} = -1778.4$ MeV, soit un écart relatif inférieur à 0.3%. Cet excellent accord entre notre modèle et les valeurs expérimentales rendent compte de la puissance et de la simplicité des approches de type champ-moyen relativiste, bien qu'en toute rigueur il faille encore restaurer la symétrie rotationnelle brisée. La densité de matière dans le référentiel intrinsèque du noyau peut être représentée dans le plan (Oxy) en Figure 3.6. En sus des résultats concernant l'état fondamental il est intéressant de comprendre comment réagit le noyau lorsque l'on lui impose une déformation. Dans les faits on utilise la méthode du Lagrangien augmenté[SSBN10] pour implémenter la contrainte (3.33). Pour obtenir et optimiser le chemin variationnel permettant d'obtenir l'état contraint on adapte la valeur du multiplicateur de Lagrange Λ_{20} , chose aisée dans le cas d'une unique contrainte, mais qui posera plusieurs problèmes algorithmiques et numériques dans un cas plus général comme nous le verrons plus tard. Dans le cas de l'Uranium 234 à déformation axiale, on fait varier le paramètre β_2 et on obtient la réponse du système à la déformation en Figure 3.7



FIGURE 3.6 – Coupe de la densité de l'état fondamental de l'Uranium 234 dans le référentiel intrinsèque obtenue dans le cadre d'une approche relativiste



FIGURE 3.7 – Énergie totale de l'²³⁴U vis-à-vis du moment quadripolaire β_2

Sur cette figure 3.7, apparaît clairement que la déformation *prolate* ($\beta_2 > 0$) est plus favorisée énergétiquement que la déformation *oblate* ($\beta_2 < 0$), et en particulier on retrouve bien pour l'état fondamental une déformation $\beta_2^{(GS)} = 0.23$. D'un point

de vue numérique une convergence pour une précision $\epsilon = 10^{-8}$ avec 15 couches d'oscillateurs³ est obtenue sur un QuadCore INTEL I7-6820HQ cadencé à 2.7GHz en 1.4 minutes pour l'état fondamental. Dans le cas de ce noyau il semble évident qu'une description en tant que système à déformation axiale suffit à encoder la physique du système, ce n'est toutefois pas toujours le cas.

3.2.2 Systèmes octupolaires

Motivation

Si le degré de déformation axiale semble être le plus évident à prendre en compte, certains noyaux ne sauraient être décrits dans ce seul cadre. Un exemple frappant de cette insuffisance peut-être trouvé en étudiant le comportement du Radium 224 comme proposé dans [BN96]-[AAR16]. Considérons donc en Fig 3.8 la réponse en énergie de cet isotope vis-à-vis d'une déformation purement axiale



FIGURE 3.8 – Énergie totale de l'²²⁴Ra vis-à-vis du moment quadripolaire β_2

Dans le cadre de cette approximation, l'état fondamental serait légèrement déformé *prolate* avec une déformation $\beta_2^{(GS)} = 0.15$. L'énergie associée à cet état est $E_{\text{RHB}}^{(\text{Axial})} = -1714.1$ MeV, ce qui est assez éloigné de l'énergie expérimentale $E_{\text{exp}} = -1720.3$ MeV [WAK⁺17]. Plusieurs indications expérimentales tendent à prouver l'influence d'une contribution octupolaire à l'état fondamental du ²²⁴Ra [But16],[GRJ⁺15].

Extension formelle

La prise en compte de déformations octupolaires passe par la levée de la symétrie de réflexion imposée dans le cadre des systèmes axiaux. Dans les faits on lève la condition $f_i(r, z) = f(r, -z)$ implicite utilisée dans les codes axiaux concernant

^{3.} C'est à dire dans une base comportant 1494 niveaux

les fonctions d'ondes spinorielles. Numériquement les bornes de toutes les intégrales axiales intervenant dans les équations (3.53) et (3.54) deviennent :

$$2\int_0^\infty f_i(r,\xi)d\xi \to \int_{-\infty}^\infty f_i(r,\xi)d\xi$$
(3.62)

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

Résultats pour le Radium 224

En levant la condition sur la parité, on permet l'obtention de solutions plus générales, pouvant être d'énergie plus basse car capturant des corrélations collectives supplémentaires. C'est le cas pour le Radium dont l'état fondamental présente de fait une déformation axiale $\beta_2^{(GS)} = 0.2$ mais également une déformation octupolaire $\beta_3^{(GS)} = 0.13$. L'énergie de liaison dans le cadre où l'on autorise cette nouvelle brisure de symétrie est $E_{\rm RHB}^{(\rm Axial+Octupole)} = -1721.8$ MeV, permettant effectivement d'obtenir une énergie plus basse et plus proche de la valeur expérimentale que celle prédite dans un cas où l'on se limite à des solutions axiales. La densité associée dans le référentiel intrinsèque du noyau est représentée en Figure 3.9.



FIGURE 3.9 – Représentation spatiale de la densité du Radium 224 dans le référentiel intrinsèque du noyau, la contribution octupolaire est responsable de la forme en "poire" de ce noyau.

Pour s'assurer de la bonne obtention d'un minimum correspondant il faut également étudier la réponse du système aux déformations axiales et octupolaire simultanément, on parle de *PES* (*Potential Energy Surface*). Pour obtenir une PES il faut suivre la procédure décrite par l'équation (3.33) mais cette fois avec deux contraintes. Il faut par conséquent deux multiplicateurs de Lagrange à optimiser, pour d'une part obtenir un résultat convergé, mais plus pragmatiquement pour optimiser le temps de convergence nécessaire à l'obtention de la configuration souhaitée. Dans le cas du ²²⁴Ra la PES dans l'espace des moments quadripolaires et octupolaires est obtenue en Figure (3.10).


FIGURE 3.10 – PES du Radium 224 dans l'espace des moments quadripolaires β_2 et octupolaires β_3 . Le point rouge indique le minima obtenu en imposant une symétrie axiale, le point blanc indique le vrai minimum en énergie, présentant une déformation axiale et octupolaire.

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

3.2.3 Systèmes triaxialement déformés

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

Réalisation formelle

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

$$V_{OH}^{3D} = \frac{1}{2}m\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right)$$
(3.63)

On notera les longueurs d'oscillateurs $b_{\{x,y,z\}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\{x,y,z\}}}}$. La conservation du volume du noyau, traduite par la relation, $b_x b_y b_z = b_0^3$, a pour effet de contraindre les

trois fréquences de l'oscillateur (3.63). En introduisant les paramètres caractérisant la déformation de la base β_0 et γ_0 on peut proposer la paramétrisation

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

$$\hbar\omega_y = \hbar\omega_0 e^{-\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\beta_0 \cos(\gamma_0 + \frac{2\pi}{3})}$$
(3.65)

$$\hbar\omega_z = \hbar\omega_0 e^{-\sqrt{\frac{5}{4\pi}\beta_0 \cos\gamma_0}} \tag{3.66}$$

Ainsi la base est cette fois totalement déterminée par trois constantes, une de plus que dans le cas axial : $\hbar\omega_0$, β_0 et γ_0 . Les états de cette base s'expriment comme le produit de trois fonctions d'ondes d'oscillateur harmonique unidimensionnel et des facteurs de spins et d'isospin

$$\Phi_{\alpha}(\mathbf{r}, s, \tau) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)\chi_{\Sigma}(s)\chi_T(\tau)$$
(3.67)

Avec

$$\psi_{n_{\mu}}(\mu) = \sqrt{\beta_{\mu}}\psi_{n_{\mu}}(\xi_{\mu}) = \sqrt{\beta_{\mu}}N_{n_{\mu}}H_{n_{\mu}}(\xi_{\mu})e^{-\frac{\xi_{\mu}^{2}}{2}} \quad \text{avec} \quad \mu \in \{x, y, z\}.$$
(3.68)

Où on a introduit le jeu de coordonnées auxiliaires $\xi_{\mu} = z\beta_{\mu}$ tandis que le facteur de normalisation vaut $N_{n_{\mu}} = \sqrt{\sqrt{\pi}2^{n_{\mu}}n!}$ et $H_{n_{\mu}}(\xi_{\mu})$ est un polynôme de l'Hermite. Néanmoins pour limiter le coût numérique d'un tel calcul on impose une unique symétrie, dite symétrie x-*simplex*[LS84] définie par l'opérateur discret

$$S_x = P e^{-i\pi J_x} \tag{3.69}$$

Ou *P* est l'opérateur parité et J_x le moment angulaire selon l'axe (Ox). On limite le développement des états $|\alpha\rangle = |n_x, n_y, n_z, m_s\rangle$ aux états propres de l'opérateur (3.69), états propres s'exprimant

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

Et

$$|n_x, n_x, n_x\rangle^{-} = \frac{i^{n_y}}{\sqrt{2}} (-1)^{n_x + n_y + 1} \left[|\uparrow\rangle + (-1)^{n_x} |\downarrow\rangle\right] |n_x, n_y, n_z\rangle$$
(3.71)

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

$$|n_x, n_x, n_x\rangle^- = \mathcal{T} |n_x, n_x, n_x\rangle^+ \quad \text{et}$$

$$\mathcal{T} |n_x, n_x, n_x\rangle^- = -|n_x, n_x, n_x\rangle^+$$
 (3.72)

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

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0\\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} \tag{3.73}$$

Avec σ_2 une des matrices de Pauli. A présent les spineurs de Dirac peuvent être développés sur la base d'oscillateur :

$$f_i(\mathbf{r},\pm) = \sum_{\alpha}^{\alpha_{\max}} f_i^{\alpha} \Phi_{\alpha}(\mathbf{r},\pm), \qquad g_i(\mathbf{r},\pm) = \sum_{\tilde{\alpha}}^{\alpha_{\max}} g_i^{\tilde{\alpha}} \Phi_{\tilde{\alpha}}(\mathbf{r},\pm)$$
(3.74)

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

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

Et

$$C_{\alpha,\alpha'} = (-1)^{\frac{n_y + n'_y}{2}} \prod_{u = \{x, y, z\}} \delta_{n_\mu + n'_\mu} \langle n_x n_y n_z | M^*(x, y, z) - V(x, y, z) | n'_x n'_y n'_z \rangle$$
(3.76)

Enfin

$$B_{\alpha,\alpha'} = \frac{\beta_x}{\sqrt{2}} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} (-1)^{n_x + n_y} \left[\sqrt{n_x} \delta_{n_x n'_x + 1} - \sqrt{n'_x} \delta_{n_x n'_x - 1} \right] + \frac{\beta_y}{\sqrt{2}} \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_z n'_z} (-1)^{n_y} \left[\sqrt{n_y} \delta_{n_y n'_y + 1} - \sqrt{n'_y} \delta_{n_y n'_y - 1} \right] + \frac{\beta_z}{\sqrt{2}} \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} (-1)^{n_x + n_y} \left[\sqrt{n_z} \delta_{n_z n'_z + 1} - \sqrt{n'_z} \delta_{n_z n'_z - 1} \right]$$
(3.77)

Les autres contributions s'expriment de manière analogue dans la base tridimensionnelle, et sont présentés en Annexe G. Dans le cas ou l'on impose la conservation de la parité on peut scinder le Hamiltonien en 4 blocs de simplex-parité, toutefois contrairement à [NPVR14] nous avons étendu notre implémentation pour permettre la brisure de parité, dans ce cas le Hamiltonien n'exhibe plus qu'un seul bloc (les deux blocs simplex étant reliés par la transformation de renversement du sens du temps) ce qui augmente considérablement le temps de calcul. En moyenne et sur une même architecture, on passe de quelques minutes de calcul à plusieurs heures pour les configurations triaxiales voir plusieurs dizaines d'heures pour les configuration triaxiales brisant la parité.

Résultats pour le Platine 190

Un cas particulièrement marquant quant à l'importance de degrés de liberté triaxiaux, peut être le ¹⁹⁰Pt [CPD⁺76]. Cet isotope du platine n'est pas correctement décrit dans le cadre d'une description axiale, on peut étudier en Figure 3.11 l'évolution axiale de l'énergie de liaison de cette isotope.

CHAPITRE 3. SYMÉTRIES BRISÉES, PHÉNOMÈNES ÉMERGENTS ET AGRÉGATION NUCLÉAIRE



FIGURE 3.11 – Évolution de l'énergie de liaison totale du ¹⁹⁰Pt en fonction du moment quadripolaire β_2

Le minimum de ce profil en énergie situé en $\beta_2 = 0.25$ correspond à une énergie $E_{\text{RHB}}^{(\text{Axial})} = -1501.3$ MeV tandis que l'énergie de liaison expérimentale $E_{\text{Exp}} = -1509.8$ MeV. Encore une fois il est possible qu'en restreignant les symétries du système on ne puisse pas capturer les corrélations responsables de l'énergie de liaison supplémentaire. De prime abord, on autorise les nucléons à peupler des états présentant une déformation octupolaire. On peut voir en Figure 3.12 la *PES* associée : les états octupolaires ne sont pas favorisés énergétiquement, il faut donc lever la contrainte quand au peuplement d'états triaxiaux.



FIGURE 3.12 – PES du Platine 190 dans l'espace des moments quadripolaire β_2 et octupolaires β_3 . Le point rouge indique le minimum global de cette carte.

En appliquant l'extension triaxiale précédente on se doit d'explorer à présent le

plan (β_2, γ) ou γ est l'angle (en degré) caractérisant la triaxialité du système, un système est dit de triaxialité maximale lorsque $\gamma = 30^{\circ}$. Dans le cas du Platine, on peut obtenir dans ce plan l'évolution de l'énergie en Figure 3.13. Ainsi l'état fondamen-



FIGURE 3.13 – Énergies de liaison dans le plan (β_2, γ) les contours indiquent les lignes isoénergétiques, le minimum global de cette surface est indiqué par le point rouge, figure issue de [NcvacRV⁺10], utilisant la même paramétrisation relativiste que dans cette étude.

tal du ¹⁹⁰Pt correspond à la configuration ($\beta_2 = 0.16, \gamma = 35^\circ$) dont l'énergie vaut $E_{\rm RHB}^{\rm (Triaxial)} = -1513.2$ MeV, valeur plus proche de la valeur expérimentale [WAK⁺17] $E_{\rm Exp} = -1508.9$ MeV. Il est intéressant de représenter la densité de cet isotope pour se rendre compte de l'effet de cette brisure de symétrie sur la distribution de matière en Figure 3.14



FIGURE 3.14 – Densité du ¹⁹⁰Pt dans le référentiel intrinsèque du noyau en vue de coupe selon les Ozx (en haut à gauche) Ozy (en haut à droite) et Oyx (en bas)

Que l'on peut représenter en trois dimensions, pour avoir une idée plus claire de la répartition spatiale de la densité nucléaire en Figure 3.15.



FIGURE 3.15 – Densité du 190 Pt dans le référentiel intrinsèque du noyau en représentation tridimensionnelle

Conclusions

A ce stade, nous disposons donc des outils formels et avons développé des outils numériques permettant de rendre compte des effets de la déformation sur l'ensemble des noyaux atomiques au niveau champ-moyen. Toutefois il est important de noter que la configuration réelle d'un noyau atomique ne peut-être obtenue qu'après restauration des symétries brisées [RG87]. Ainsi des méthodes projectives ou de mélange de configuration (GCM) peuvent in-fine induire dans le référentiel intrinsèque des déformations différentes que celle prédite au seul niveau champ-moyen. Les codes utilisés dans ce cadre ont été massivement parallélisés afin de produire plus rapidement et efficacement des PES correctement convergées. De plus la prise en compte de l'ensemble de ces déformations permet de transcrire correctement la richesse phénoménologique du noyau atomique. Néanmoins l'obtention de configurations spécifiques, implique d'être à même de déterminer des chemins de convergence optimaux sous un nombre particulièrement élevé de contraintes. Dans la section suivante nous proposons une nouvelle méthode pour minimiser le nombre d'itération et donc le temps de calcul pour obtenir des configurations sur-contraintes, permettant notamment de simuler la structure de certains états excités.

3.3 Champ-moyen sous contraintes multiples

3.3.1 Problématique

Comme nous l'avons vu précédemment pour imposer une déformation à notre champ-moyen, on rajoute des contraintes, chacune de ces contraintes est caractérisée par un paramètre de Lagrange (3.33). Or en ayant étendu la portée de nos codes à des systèmes à la fois triaxiaux et octupolaires nous pouvons à présent contraindre plusieurs degrés de liberté (d) de la fonctionnelle, principalement :

1. Le rayon

- 2. Le moment quadripolaire β_2
- 3. Le moment octupolaire β_3
- 4. Le moment triaxial γ
- 5. Le moment tétraédrique β_{32}

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

3.3.2 Algorithmes bio-mimétiques

Formellement la détermination de ces jeux de contraintes n'est rien d'autre qu'un problème classique d'optimisation sous contraintes multiples. Toutefois les comportements vis-à-vis des contraintes varient très fortement d'un noyau à l'autre, ce qui empêche de prime abord la détermination d'une heuristique. De plus une méthode d'analyse statistique des contraintes est peu indiquée en raison des temps de calculs considérables nécessaires pour chacune des configurations échantillonnées. Aussi il est possible d'envisager une approche différente, permettant de définir une stratégie universelle pour déterminer de manière approchée les meilleurs jeux de contraintes possibles. Le principe de cette méthode repose sur les notions d'algorithmes évolutifs et génétiques[McC05]. Présentons brièvement les principes de ces algorithmes[Mit98].



FIGURE 3.16 – Représentation schématique d'un algorithme génétique usuel.

Bio-mimétisme

Le concept d'algorithmes bio-mimétique a pour objet de s'inspirer des fonctionnements de base des principes d'évolution et de mutation pour résoudre un problème d'optimisation. Dans la nature, le principe d'évolution traduit le fait qu'une population d'individus génère, à partir de croisements et mutations de leurs génome, des populations filles différentes et plus diverses que la population initiale. Un algorithme peut reprendre ce principe comme indiqué en Figure 3.16. La "population" est constituée de l'ensemble des variables du problème à optimiser. Le principe est d'évaluer cette population à chaque nouvelle génération et de conserver les solutions d'élite, qui seront solutions (approchées) du problème initial. Plus précisément dans notre cas les individus qui constituent la population sont les constantes associées à chaque contrainte appliquée. Initialement chaque individu se définit par son "code génétique" selon :

$$I^{(i)} = \begin{pmatrix} c_{\text{Rayon}}^{(i)} \\ c_{Q_{20}}^{(i)} \\ c_{Q_{30}}^{(i)} \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \end{pmatrix}$$
(3.78)

La population est composé d'un ensemble d'individus (3.78) dont les caractéristiques sont tirées aléatoirement

$$P = \{I^{(0)}, .., I^{(i)}, .., I^{(n)}\}$$
(3.79)

On peut ensuite procéder à la réalisation des différentes étapes de l'algorithme 3.16.

1. Évaluation

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

2. Sélection

L'étape de sélection est cruciale pour maximiser les performances d'un algorithme évolutif. Il existe plusieurs stratégies d'évolution. Nous nous sommes principalement focalisés sur les sélections par "tournoi". Le principe étant de comparer au sein de la population tous les individus deux à deux. On attribue à l'individu le plus performant une probabilité P_s d'être sélectionné, tandis qu'une probabilité de sélection plus faible (mais non nulle) est associée au perdant. La fonction de sélection peut s'écrire pour tout couple d'individus (3.78) à l'itération n de l'algorithme de champ-moyen

$$\mathcal{F}(I^{(a)}, I^{(b)}) = \min \begin{pmatrix} |\epsilon_n^{(a)} - \epsilon_{n-1}^{(a)}| \\ |\epsilon_n^{(b)} - \epsilon_{n-1}^{(b)}| \end{pmatrix}$$
(3.80)

3. Mutation

Il s'agit d'une étape fondamentale de l'algorithme, le principe étant de faire muter au hasard les caractéristiques des individus sélectionnés. Usuellement les taux de mutations noté τ_m doivent être inférieurs à 5% pour permettre de

CHAPITRE 3. SYMÉTRIES BRISÉES, PHÉNOMÈNES ÉMERGENTS ET AGRÉGATION NUCLÉAIRE

| Taille de la population | P_s (paramètre de sélection) | $	au_m$ (taux de mutation) | Nombre d'itérations |
|-------------------------|--------------------------------|----------------------------|---------------------|
| 100 | 0.75 | 0.01 | 581 |
| 100 | 0.8 | 0.02 | 456 |
| 100 | 0.9 | 0.01 | 654 |
| 100 | 0.75 | 0.02 | 421 |
| 300 | 0.75 | 0.02 | 373 |
| 300 | 0.8 | 0.02 | 392 |

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

maintenir une population diversifiée, mais dont l'élite reste favorisée. On peut illustrer une mutation d'un individu

$$I^{(i)} = \begin{pmatrix} c_{\text{Rayon}}^{(i)} \\ c_{Q_{20}}^{(i)} \\ c_{Q_{30}}^{(i)} \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Mutation}} \tilde{I}^{(i)} = \begin{pmatrix} c_{\text{Rayon}}^{(i)} \\ c_{Q_{20}}^{(i)} \\ c_{Q_{30}}^{(i)} \cdot \tau_m \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \\ c_{Q_{32}}^{(i)} \end{pmatrix}$$
(3.81)

4. Itération

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

Ainsi au lieu de fixer les constantes contraignantes les déformations en amont du code de résolution des équations RHB, on rend le choix de ces constantes dynamiques, les faisant évoluer au fur et à mesure de la procédure de convergence. Cette modification nécessite de prime abord plus de puissance de calcul, puisqu'il faut réaliser autant de calcul de champ moyen qu'il y'a d'individus dans notre population au lieu d'un seul. Toutefois cette technique permet d'explorer l'espace variationnel de manière bien plus optimale, pour peu que les paramètres de sélection P_s et le taux de mutation τ_m soient bien choisis. Dans le cadre de cette étude nous avons procédé par tâtonnement pour déterminer ces deux paramètres, mais on pourrait aisément considérer une extension permettant de déterminer le couple $\{P_s, \tau_m\}$ optimal. La taille de la population est également importante pour maximiser l'efficacité de l'algorithme évolutif. Typiquement dans nos simulations, la population était composée de plusieurs centaines d'individus (300 en général). On peut résumer nos choix à l'aide d'un tableau (Table 3.1) comparatif du nombre d'itération global nécessaire à l'obtention de la configuration d'intérêt. Pour ce test nous imposons 4 contraintes à un noyau d'Oxygène 16, dont on veut fixer

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

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

3.3.3 Résultats

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

| | Nombre d'itéra- | Nombre d'itéra- |
|--|-------------------|------------------|
| Noyau et contraintes | tions (code clas- | tions (code bio- |
| | sique) | mimétique) |
| ¹⁶ O { $R = 4$ fm, $\beta_2 = 0.3, \beta_3 = 0.1$ } | 1281 | 1513 |
| ¹⁶ O { $R = 4 \text{fm}, \beta_2 = 0.3, \beta_3 =$ | 1281 | 421 |
| $0.1, \gamma = 0\}$ | | |
| 16 O { $R = 4$ fm, $\beta_2 = 0.3, \beta_3 =$ | 1542 | 530 |
| $0.1, \gamma = 0, \beta_{32} = 0.3\}$ | | |
| ¹²⁰ Sn { $R = 4$ fm, $\beta_2 = 0.3, \beta_3 = 0.1$ } | 938 | 1119 |
| 120 Sn { $R = 4$ fm, $\beta_2 = 0.3, \beta_3 =$ | 2362 | 576 |
| $0.1, \gamma = 0\}$ | | |
| 120 Sn { $R = 4$ fm, $\beta_2 = 0.3, \beta_3 =$ | 2729 | 613 |
| $0.1, \gamma = 0, \beta_{32} = 0.3\}$ | | 015 |

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

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

3.4 Agrégation nucléaire

3.4.1 Introduction

Avec le formalisme et les outils numériques mis en place et décrits dans les précédentes sections nous pouvons nous tourner vers l'étude de l'ensemble des noyaux de la carte et on se focalisera à présent sur les noyaux légers. A ce stade nous avons pu constater que la distribution de matière au sein des noyaux peut-être, profondément anisotrope, néanmoins en première approximation les noyaux lourds semblent homogènes. Cette homogénéité est une trace du comportement de liquide quantique de la plupart des noyaux, cependant certains noyaux peuvent présenter des comportements différents. En effet l'Univers à différentes échelles d'observation peut, pour respecter le principe de minimisation de l'énergie, faire émerger des anisotropies, qui brisent l'homogénéité du système considéré mais abaissent son énergie. On peut notamment citer l'apparition d'amas localisés de galaxies aux échelles cosmologiques[Pea01], à l'échelle macroscopique la scission d'une goutte d'eau sphérique en deux plus petites, ou encore, aux échelles subatomiques le confinement de 2 ou 3 quarks au sein de mésons ou de hadrons. Le noyau atomique ne fait pas exception et des agrégats de nucléons, que nous appellerons *clusters* peuvent se former. L'idée de la présence de clusters dans les systèmes nucléaires apparaît très tôt[HT38] et est initialement motivée par une volonté de comprendre les mécanismes à l'origine de la radioactivité alpha. Un agrégat de deux neutrons et deux protons se préformerait dans le noyau avant d'être émis dans le continuum sous forme d'une particule α . De plus la présence de structures spécifiques dans les spectres expérimentaux de certains noyaux étaie l'idée d'une structure composite du noyau[DAA⁺17]. Ainsi l'énergie de liaison totale ramenée au nombre de nucléons est plus élevée pour les noyaux pairs-pairs dont le nombre de protons est égal au nombre de neutrons (du moins jusqu'au ²⁸Si) comme on peut le voir en Figure 3.17, ce qui tend à accréditer un modèle de noyau dont les degrés de liberté effectifs seraient des clusters à 4 nucléons, autrement dit des particules α .



FIGURE 3.17 – Évolution de l'énergie de liaison rapportée au nombre de nucléons, pour plusieurs éléments légers. Les noyaux N=Z sont plus liés que leurs isotopes respectifs (adaptée de [C10])

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

3.4.2 Champ-moyen relativiste et clusters

L'avantage des méthodes de type *EDF* réside dans leur universalité, comme nous l'avons vu, avec un faible nombre de paramètres nous sommes à même de décrire la quasi intégralité des éléments de la carte nucléaire. Si notre description est correcte, nous serons alors à même de décrire avec un même formalisme aussi bien les états de type liquide quantique que de type cluster. Tout d'abord considérons le Néon 20, élément fréquemment étudié dans le cadre de la physique des clusters, décrit en symétrie axiale. On peut de prime abord, au niveau du champ-moyen, identifier la déformation *prolate* axiale de l'état fondamental, facilement identifiable en Figure 3.18, correspondant à $\beta_2^{(GS)} = 0.54$. Énergétiquement le minimum $E_{(RHB)}^{(GS)} = -163.1$ MeV reproduit correctement l'énergie expérimentale $E_{(Exp)}^{(GS)} = -160.6$ MeV. On



FIGURE 3.18 – Réponse en énergie du ²⁰Ne vis-à-vis d'une déformation axiale.

peut représenter la densité associée à l'état fondamental du Néon dans le référentiel intrinsèque du noyau en Figure 3.19. Dans cette représentation, on voit émerger deux structures denses sur l'axe de symétrie Oz. Ces structures correspondent à des agrégats nucléoniques spatialement localisés, autrement dit dans un cadre relativiste les clusters émergent naturellement d'une description où les nucléons sont le degré de liberté fondamental[EKNV12]. Toutefois il est important de déterminer une mesure quantifiant l'émergence de ces agrégats, une simple étude de la densité nucléonique ne suffisant pas forcément. Par exemple pour l'étude de certains noyaux lourds ou des clusters peuvent se préformer, mais où la densité totale n'est que très faiblement modifiée⁴.

^{4.} C'est le cas pas exemple du Polonium 212, vu comme une superposition d'un noyau de Plomb 208 et d'un cluster alpha



FIGURE 3.19 – Densité dans le référentiel intrinsèque du ²⁰Ne, on note l'apparition de deux agrégats de densité qui correspondent à des clusters.

3.4.3 Mesure de localisation

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

$$P_{\tau\sigma}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r})\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}') - |\rho_{\tau\sigma\sigma}(\mathbf{r},\mathbf{r}')|^2$$
(3.82)

Où l'on note $\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \rho_{\tau\sigma\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ la densité locale. On peut ainsi construire la probabilité conditionnelle $R_{\tau\sigma}$ de trouver un nucléon en \mathbf{r}' connaissant la position d'un nucléon de même spin et isospin en \mathbf{r} .

$$R_{\tau\sigma}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}') - \frac{|\rho_{\tau\sigma\sigma}(\mathbf{r},\mathbf{r}')|^2}{\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r})}$$
(3.83)

Etant donné que nous nous intéressons uniquement aux propriétés de localisation de la probabilité (3.83), il suffit de considérer la partie locale de cette probabilité conditionnelle. On peut réaliser cette approximation en prenant la moyenne des orbitales de rayon δ_r autour d'un point **r** et en ne conservant que les premiers termes du développement de Taylor de cette moyenne.

$$R_{\tau\sigma}(\mathbf{r},\delta_r) = \frac{1}{3} \left(\tau_{\tau\sigma} - \frac{1}{4} \frac{(\nabla \rho_{\tau\sigma})^2}{\rho_{\tau\sigma}} \right) \delta_r^2 + O(\delta_r^3)$$
(3.84)



FIGURE 3.20 – Densités nucléoniques en vis-à-vis de la mesure de localisation $C_{\tau\sigma}$, le panel de gauche correspond à l'⁴He et le panel de droite à l'¹⁶O.

Où $\tau_{\tau\sigma}$ est la densité d'énergie cinétique que l'on calcule à partir des fonctions d'ondes Φ_{α} du système

$$\tau_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} |\nabla \Phi_{\alpha}(\mathbf{r}\sigma)|^2$$
(3.85)

Et $\nabla \rho_{\tau\sigma}$ indiquant la dérivée spatiale de la densité :

$$\nabla \rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = 2 \sum_{\alpha} \operatorname{Re}[\Phi_{\alpha}^{*}(\mathbf{r}\sigma) \nabla \Phi_{\alpha}(\mathbf{r}\sigma)]$$
(3.86)

Le terme traduisant la mesure de localisation $D_{\tau\sigma}$ peut s'écrire : ⁵

$$D_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \left(\tau_{\tau\sigma} - \frac{1}{4} \frac{(\nabla \rho_{\tau\sigma})^2}{\rho_{\tau\sigma}}\right)$$
(3.87)

Toutefois l'expression (3.87) correspond à une probabilité inversée, au sens où plus la probabilité de trouver deux particules de même spin dans un voisinage proche est grande, plus $D_{\tau\sigma}(\mathbf{r})$ est petit. Aussi pour simplifier l'interprétation on inversera cette quantité et on la normalisera.

$$C_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \left[1 + \left(\frac{\tau_{\tau\sigma}\rho_{\tau\sigma} - \frac{1}{4}[\nabla\rho_{\tau\sigma}]^2}{\rho_{\tau\sigma}\tau_{\tau\sigma}^{\mathrm{TF}}}\right)^2\right]^{-1}$$
(3.88)

Où l'on choisit comme facteur de normalisation la densité de Thomas-Fermi, ce choix est fondé par la nécessité de définir une échelle naturelle de densité.

$$\tau_{\tau\sigma}^{\rm TF} = \frac{3}{5} (6\pi^2)^{\frac{2}{3}} \rho_{\tau\sigma}^{\frac{5}{3}}$$
(3.89)

On peut distinguer deux cas d'intérêt pour notre étude, d'une part lorsque $C_{\tau\sigma} = 1$ cela traduit une localisation totale de 2 neutrons et 2 protons pouvant être interprété comme une particule alpha, d'autre part lorsque $C_{\tau\sigma} = 0.5$ cela traduit une délocalisation totale. En Figure 3.20 ces deux comportements sont illustrés. On remarque ici que dans le cas de l'étude du noyau d'Hélium 4 on obtient une localisation totale, tandis que pour l'Oxygène 16 (sphérique) correspond à un régime délocalisé. Il est également intéressant de remarquer que la présence d'anneaux dans la distribution de la mesure de localisation, traduit la structure en couche du système étudié[RMUO11]. A présent on peut dans le cadre des codes développés et présentés précédemment étudier cette quantité en regard de la simple densité à 1-corps. Ainsi dans le cas du Néon 20 on peut de nouveau représenter la densité nucléaire dans le référentiel intrinsèque



FIGURE 3.21 – Densité dans le référentiel intrinsèque du 20 Ne à droite, mesure de localisation associée au même élément à droite.

ainsi que la mesure de localisation (3.88) en Figure 3.21. Sur cette dernière figure on remarque que notre conclusion initiale quand à la présence de deux clusters est renforcée par cette nouvelle mesure de localisation. Cette distribution de probabilité est maximale dans les zones où la densité l'est aussi⁶, ce qui nous permet de conclure que dans le cadre d'une formalisme EDF covariant au niveau champ-moyen, on peut naturellement rentre compte de l'émergence d'agrégats nucléoniques. On peut également s'interroger quand à la nature des clusters mis en évidence. Cependant pour être à même d'étudier les propriétés physiques de ces agrégats, il nous faut aller au delà du champ-moyen et étudier l'état fondamental vrai, prédit après restauration des symétries brisées [MacEK⁺18]. Pour l'état fondamental $J = 0^+$ la déformation de l'état collectif correspondant au minimum en énergie de la Figure 3.22 correspond à un état oblate $\beta_2 = 0.47$, déformé octupolairement $\beta_3 = 0.5$. La densité correspondante ainsi que la mesure de localisation (3.88) peuvent être représentées dans le cadre d'une description octupolaire en Figure 3.23. Cette configuration présente une séparation claire d'une part d'un cœur surmonté d'autre part d'un agrégat. En intégrant la densité de ce cluster on peut déterminer le nombre de nucléons contribuant à l'agrégat et ainsi conclure quant à sa nature. Dans le cas de la densité présenté en Figure 3.23 les bornes d'intégration sont déterminées à partir de la mesure de localisation et sont indiquées par les segments brisés. On obtient $N_{\text{Nucléons}}^{(Cluster)} \simeq 4.06$ nucléons. Le néon 20 serait dont une superposition d'un cœur d'Oxygène 16 et d'une particule α , ce qui fait écho à l'intuition de formation de cluster α dans les noyaux N=Z. Ce résultat est d'autant plus marquant qu'il est obtenu dans le cadre d'une approche EDF relativiste, n'étant pas spécifiquement conçue pour décrire des clusters. De plus on note que ce même cœur d'¹⁶O semble lui-même présenter un début de clusterisation, particulièrement visible dans la mesure de localisation. Cet élément fera l'objet d'une étude plus fine dans une section ultérieure. Ainsi muni de cette mesure de localisation

^{5.} Un terme supplémentaire construit à partir des courants apparaît en régime dynamique

^{6.} A noter que le décalage entre les deux distributions provient du gradient de la densité dans (3.88) qui est maximal dans les zones ou la densité varie le plus vite, et donc plus proche de la surface du noyau



FIGURE 3.22 – Énergie totale normalisée du système dans le plan (β_2, β_3) le minimum global est indiqué par le point rouge. Figure issue de [MacEK⁺18]



FIGURE 3.23 – Densité dans le référentiel intrinsèque de l'état $J = 0^+$ du ²⁰Ne (à droite), mesure de localisation associée (à droite). Le cluster est localisé entre les traits en pointillés.

et des outils numériques exposés précédemment on peut quantifier l'émergence des clusters et conjecturer leur nature physique. Nonobstant ces résultats, il faut encore comprendre le mécanisme à l'origine de l'agrégation.

3.4.4 Origines de l'agrégation nucléaire

Pour comprendre l'origine de ces clusters il est intéressant de comparer les résultats issus des codes relativistes et non-relativistes. En effet les deux approches permettent de reproduire correctement les énergies de liaison tout en présentant des densités différentes. On peut comparer en Figure 3.24 différentes paramétrisation relativistes de portée nulle (DD-PC1) ou de portée finie (DD-ME2) et non relativistes de portée nulle (SLy4) ou de portée finie (D1S)[PSL⁺17].



FIGURE 3.24 – Densités dans le référentiel intrinsèque du ²⁰Ne, pour des paramétrisations relativistes et non-relativistes de portée nulle et de portée finie.

Il est flagrant que les clusters n'émergent que dans le cadre d'une approche relativiste, la compréhension de la différence entre ces deux approches peut être la clé de la compréhension du mécanisme d'agrégation. La différence majeure entre les deux approches est la structure du spectre de particules indépendantes⁷ qui diffère profondément d'un cas à l'autre. Les états de particules-indépendantes du dernier état occupé sont ceux qui contribuent le plus au cluster. Ces états sont plus prononcés et moins dispersés dans le cas relativiste, car plus liés que dans le cas non relativiste[EKNV12]. Cette différence s'explique par le fait qu'à déformations et rayons égaux, la profondeur des potentiels relativistes est plus grande que dans les cas non-relativistes ($V_{\text{pot}}^{(DD-ME2)}(r=0) = -77.4 \text{MeV}, V_{\text{pot}}^{(SLy4)}(r=0) = -68.3 \text{MeV}$). Cet écart est issu de la différence de traitement du terme de *spin-orbite* dans les deux approches. Dans le cas relativiste la profondeur du potentiel est fixée par la différence entre le potentiel scalaire attractif de Lorentz et le potentiel vecteur répulsif. Le choix de ces deux potentiels est contraint par le fait que leur somme fixe le potentiel de *spin-orbite* qui émerge naturellement du formalisme covariant. Dans le cas

^{7.} Il ne s'agit pas à proprement parler d'un spectre au sens où il ne s'agit pas d'une observable[DHHS15] mais bien d'une variable discriminante dans notre cas

non-covariant le terme *spin-orbite* est un ajout purement phénoménologique et par conséquent il est décorrélé des potentiels à l'origine du champ-moyen, en pratique on ajuste empiriquement son intensité sur les écarts en énergie entre partenaires de spin-orbites. Or dans l'approche relativiste, où les champs scalaires et vecteurs déterminent à la fois les potentiels de champ-moyen et de spin-orbite, il s'avère que la profondeur des potentiels relativistes est systématiquement plus grande que dans les cas non-relativiste ce qui amplifie la tendance des nucléons à former des agrégats. De même la paramétrisation DD-ME2, qui traduit la portée finie de l'interaction, capture davantage de corrélations. En conséquence elle présente un potentiel plus profond, favorisant l'émergence d'agrégats par rapport à l'approche DD-PC1 qui considère un modèle de couplage ponctuel moins réaliste. Ainsi la structure et l'agencement des fonctions d'ondes de particules élémentaires encode la physique responsable de l'agrégation. Le paramètre différenciant les régimes clusters des régimes liquides est relié à l'extension spatiale des fonctions d'ondes individuelles. En fonction de l'extension spatiale de ces états, un système fermionique peut exhiber une phase de cristal quantique ou *a contrario* de liquide quantique.

Dispersion spatiale

Cette idée a été formalisée pour l'étude de la transition entre cristal et liquide par Mottelson[Mot96]. Cette démarche peut-être généralisée en considérant cette fois les états clusters comme une phase intermédiaire entre les phases cristallines et liquides. Pour traduire ce concept on peut introduire[EKNcvacV13] un paramètre adimensionné $\alpha_{loc} = \frac{b}{r_0}$ ou *b* caractérise l'extension des fonctions d'ondes et r_0 la distance internucléonique moyenne. Ce paramètre permet de distinguer deux régimes scindés en trois phases tous illustrés en Figure 3.25. Le premier régime correspond à l'état de liquide quantique où les nucléons sont totalement délocalisés dans le système, le second est composé des phases présentant des signes de localisations plus ou moins prononcés.



FIGURE 3.25 – Représentation schématique des trois phases possibles dans le noyau caractérisé par le paramètre α_{loc} .

Pour déterminer une expression analytique approchée du paramètre de localisation on peut dans un premier temps se placer dans l'approximation où l'on considère le système comme analogue à un oscillateur harmonique sphérique. Cette approximation rend correctement compte des propriétés de localisation et de clusterisation dans le noyau[JSSN18]. Dans ce cas :

$$\alpha_{\rm loc} = \frac{b}{r_0} = \frac{\sqrt{\hbar}A^{\frac{1}{6}}}{\left(2mV_0r_0^2\right)^{1/4}} \tag{3.90}$$

où l'on à pris pour l'extension des fonctions d'ondes la longueur caractérisant l'oscillateur $b = \frac{\sqrt{\hbar}}{m\omega_0}$ et on fixe $r_0 = 1.25$ fm (correspondant à la moitié de la distance moyenne entre nucléons dans une sphère homogène de densité $\rho = \rho_{\text{sat}} \simeq 0.16 f m^{-3}$). Dans cette même formule, A indique le nombre de nucléons, m la masse d'un nucléon et V_0 la profondeur du potentiel harmonique Les états présentant des agrégats correspondent au régime où l'extension des fonctions d'ondes individuelles est de la même taille que la distance internucléons, dans ce cas le paramètre vaut $\alpha_{\text{loc}} \simeq 1$. La dépendance en $A^{1/6}$ implique que les clusters se forment préférentiellement dans les noyaux légers et que la frontière entre noyaux de type cluster et de type liquide quantique se situe autour de A = 20 - 30, ce qui correspond aux résultats expérimentaux. Ce premier succès nous encourage à généraliser l'expression de ce paramètre. En effet l'extension spatiale de systèmes de tailles finies dépend par définition des nombres quantiques des états de particules individuelles. De plus il est fondamental de remarquer[EKNcvacV13] que le paramètre b est directement relié à la dispersion spatiale selon

$$b = 2\Delta r$$
 Où $\Delta_r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2}$ (3.91)

En se plaçant toujours dans l'approximation d'oscillateur harmonique on peut déterminer l'expression formelle de la dispersion, d'une part le terme $\langle r^2 \rangle$ s'exprime simplement

$$\langle r^2 \rangle = b^2 \left(N + \frac{3}{2} \right) = b^2 \left(2n' + l + \frac{3}{2} \right)$$
 (3.92)

Où, adoptant les notations usuelles, N = 2(n-1) + l est le nombre quantique principal et on définit $n' \equiv n - 1$. Cependant le terme $\langle r \rangle$ est bien plus pénible à exprimer et prend la forme

$$\frac{\langle r \rangle}{b} = \sum_{q=0}^{n'} \frac{(-1)^q (l+q+1)! \Gamma(n'-q-\frac{1}{2})}{q! (n'-q)! \Gamma(l+q+\frac{3}{2}) \Gamma(-q-\frac{1}{2})}$$
(3.93)

Où Γ désigne la fonction d'Euler. On peut représenter en Figure 3.26 Δr construit à partir des équations (3.92) et (3.93), en fonction du moment orbital angulaire pour un noyau lourd, le Californium 288, afin de comprendre l'évolution de la dispersion pour de grandes plages de valeurs de n dans l'approximation d'oscillateur harmonique.



FIGURE 3.26 – Dispersion radiale des fonctions d'ondes du ²⁸⁸Cf modélisé par un oscillateur harmonique (symboles pleins). Dispersions minimales et maximales pour chaque n dans le cadre des approximations (3.95) et (3.98) (symboles vides)

Cette figure indique que la dispersion dépend principalement du nombre quantique radial n, mais peu du nombre quantique orbital l. On peut donc chercher à simplifier (3.93) en considérant deux cas de figures.

— Considérons les seuls états de l = 0 l'expression (3.93) se simplifie pour devenir

$$\frac{\langle r \rangle}{b} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{(2n'+1)!!}{(2n')!!}$$
(3.94)

On peut montrer[EKLV18], que la dispersion (3.91) pour l = 0 devient :

$$\left(\frac{\Delta r}{b}\right)^2 = \left(2 - \frac{5}{\pi}\right)n' + \left(\frac{3}{2} - \frac{4}{\pi}\right) \tag{3.95}$$

 Prenons dans ce cas la limite des grands moments orbitaux l, dans cette limite on peut utiliser l'approximation [AS64]

$$\frac{(l+q+1)!}{\gamma(l+q+\frac{3}{2})} \simeq \sqrt{l} + \frac{1}{\sqrt{l}} \left(\frac{q}{2} + \frac{5}{8}\right)$$
(3.96)

Ainsi (3.93) devient

$$\frac{\langle r \rangle}{b} = \sqrt{l} + \frac{1}{\sqrt{l}} \left(\frac{3n'}{4} + \frac{5}{8} \right) \tag{3.97}$$

Et par conséquent la dispersion dans la limite des grands l devient

$$\left(\frac{\Delta r}{b}\right)^2 \simeq \frac{n'}{2} + \frac{1}{4} \tag{3.98}$$

Les dispersions extrémales correspondant aux approximation (3.95) et (3.98) sont représentées par les symboles vides sur la Figure 3.26. On constate de nouveau le faible impact du nombre quantique orbital l sur la dispersion radiale. On peut à présent obtenir à partir des équations (3.90) et (3.98) un paramètre de localisation généralisé

$$\tilde{\alpha}_{\rm loc} \equiv \frac{b}{r_0} \sqrt{2n-1} = \frac{\sqrt{\hbar(2n-1)}}{(2mV_0 r_0^2)^{1/4}} A^{1/6}$$
(3.99)

A présent (3.99) dépend non seulement des paramètres de l'oscillateur mais surtout du nombre de nucléons ainsi que du nombre quantique radial de l'état considéré. De nouveau on note que pour les noyaux légers $A \leq 30$ et dont le nombre quantique des états occupés vaut 1 le paramètre de localisation vaudra $\tilde{\alpha}_{loc} \leq 1$ traduisant une forte probabilité de présence de clusters. Pour des noyaux plus lourds possédant des états de nombre quantique radial n > 1 les états sphériques sont grandement délocalisés ce qui explique le comportement de type liquide quantique de ces éléments. Cette description est cohérente avec notre représentation schématique naïve présentée en Figure (3.25).

Influence de la déformation sur la dispersion

Il est également intéressant de quantifier l'impact de la déformation nucléaire sur la dispersion, en effet celle-ci favorisant la formation de cluster[EKNcvacV13], le paramètre de localisation devrait y-être sensible. On calcule cette fois le paramètre de localisation microscopiquement, dans le cadre de notre code RMF (on néglige l'appariement, pour dissocier et comprendre l'effet de la seule déformation). On se focalise sur le calcul de la seule dispersion des états de valences du noyau, états où les agrégats ont tendance à se former comme vu précédemment lors des études qualitatives des densités du Néon 20. Sur la Figure 3.27 on peut voir l'évolution des énergies de particules individuelles des états neutroniques occupés du ²⁰Ne en fonction de la déformation quadripolaire, la dispersion du dernier état occupé ainsi que les densités du dernier état occupé pour les minima et maxima de la dispersion. On remarque sur cette figure que la dispersion diminue avec la déformation jusqu'à ce que l'on arrive à un croisement de niveaux pour le dernier état occupé. La plus grande augmentation de la dispersion spatiale advient pour une déformation où l'état $\frac{1}{2}^+$ (issu du niveau sphérique $2s\frac{1}{2}$) devient occupé. La dispersion est ainsi augmentée d'un facteur $\simeq 1.7$ ce qui correspond précisément au facteur prédit (3.98) pour la dispersion d'un état d'oscillateur harmonique lors du passage d'un niveau de n = 1 à un niveau n = 2 au niveau de l'oscillateur harmonique 3.99. En observant les densités de valence on remarque que la localisation est bien directement reliée à la dispersion. Lorsque la dispersion est faible les états sont bien localisés tandis que pour des états de dispersion plus grande (aux points C et D de la Figure 3.27 particulièrement) l'état est plus dilué spatialement. Cette étude tend à prouver que l'étude microscopique de la dispersion, prise comme une variable au niveau du champ-moyen, donne une indication fiable quant à la localisation des fonctions d'ondes condition qui favorise l'apparition de clusters. On peut systématiser cette étude à l'ensemble des noyaux pairs-pairs pour déterminer quels sont les éléments où il est probable d'avoir une préformation d'agrégats. En Figure 3.28 on représente dans le plan N-Z, les noyaux pairs-pairs que l'on étudie dans la cadre d'une approche RHB. Les noyaux dont la dispersion des états de valences⁸ protons et neutrons est particulièrement faible (de l'ordre du fermi) sont indiqués en rouge.

^{8.} Dans notre cas on définit un état de valence comme un état dont le facteur d'occupation $0.1 < v^2 < 0.9$



FIGURE 3.27 – Évolution des états neutroniques occupés des blocs de spin-parité du 20 Ne dans une approche RMF (traits pleins), dispersion de la fonction d'onde du dernier état occupé (trait bleu en pointillés). Le panel du bas présente les densités des neutrons de valences pour les déformations correspondantes aux minima (a,b,c,d) et maxima (A,B,C,D) de la dispersion



FIGURE 3.28 – Représentation dans laquelle les noyaux dont la dispersion des états de valence est faible (cercles rouges) sont superposés aux noyaux expérimentalement connus dans le plan N-Z. La dispersion est calculée dans le cadre d'une approche RHB axiale où l'on adopte la paramétrisation DD-ME2 ainsi qu'une interaction d'appariement de portée finie.

On remarque sur cette figure que la condition de localisation des états de valence comprise comme une condition à la préformation de clusters, est bien valide pour les noyaux légers, où l'on s'attend à les observer. Mais cette condition est également satisfaite pour des noyaux plus lourds en concordance avec les noyaux émetteurs α ou émetteurs clusters. Ainsi on prédit dans le cadre de l'étude de notre paramètre de localisation, une préformation possible d'agrégats au sein du ²¹²Po en accord avec l'expérience [APP+10]. Cette carte n'est pas à prendre comme une carte d'états clusterisés mais plus comme une preuve de principe que l'on peut, dans le cadre d'un formalisme unifié, décrire sur un pied d'égalité les noyaux légers présentant des clusters, et les noyaux lourds émetteurs α tout en distinguant états clusters et états de type liquide quantique. Avec ce paramètre de localisation et notre mesure de localisation, nous sommes à même d'étudier systématiquement les résultats d'un calcul champ-moyen et conclure quand à la probabilité d'observer des clusters. A présent que nous sommes en mesure d'identifier des possibles clusters et de connaître leur position dans le plan N-Z [EKLV18], il nous faut encore décrire le mécanisme physique à l'origine de la transition entre état cluster et état de type liquide quantique, c'est l'objet de la section suivante.

3.5 Transition de phases quantiques

3.5.1 D'une symétrie continue à une symétrie discrète

Pour comprendre en détail la transition entre phase liquide et clusters on se propose d'étudier l'Oxygène 16. De prime abord un noyau à double couche fermée comme l'¹⁶O devrait être sphérique dans le référentiel intrinsèque, comme vu précédemment. Toutefois structurellement, on peut imaginer dans le cadre du modèle de clusters α de Bloch-Brink [D.M66] que l'Oxygène 16 est en fait une superposition de 4 clusters α . L'idée à l'origine de cette modélisation réside dans la possibilité pour les nucléons de former des quartets spatialement localisés constitués de pairs de protons et neutrons de moment angulaire total nul. Spatialement la structure la plus simple que l'on peut envisager pour agencer ces agrégats serait un tétraèdre régulier dont les 4 sommets sont occupés par une particule α . Dans le cadre d'une approche de type champ-moyen, une telle transition de forme s'interprète comme une brisure de la symétrie rotationnelle vers une symétrie ponctuelle tétraédrique par l'intermédiaire d'une déformation prolate. En termes de théorie des groupes on interprète donc ce changement de forme comme la brisure de symétries continues en une symétrie ponctuelle, comme schématisé en Figure 3.29. Dans le cadre de notre approche *RMF*,



FIGURE 3.29 – Représentation schématique du passage dune forme sphérique correspondante au groupe de rotation O(3), au groupe ponctuel tétraédrique T_d

on peut étudier ce passage à une symétrie ponctuelle en étudiant les formes des configurations émergentes les plus favorisés énergétiquement.

3.5.2 Oxygène 16 : Résultats du champ-moyen

On utilise le code triaxial octupolaire développé et décrit précédemment pour étudier l'évolution de cet isotope. L'état fondamental de ce noyau est bien une sphère dont l'énergie de liaison est $E_{\rm RHB}^{(GS)} = -127.7$ MeV. Pour étudier les autres formes énergétiquement favorisées on fait artificiellement augmenter le rayon du noyau ce qui permet de faire évoluer la densité du noyau à l'instar des travaux de Schuck et Girod [GS13]. Tous les autres moments de la distribution de matière étant laissés libres, le système est à même d'adopter la forme abaissant le plus son énergie de liaison totale. Les résultats de cette analyse sont présentés en Figure 3.30. Sur cette



FIGURE 3.30 - Évolution de l'énergie totale de l'¹⁶O lorsque l'on augmente son rayon. Le trait noir indique l'état fondamental du système, le trait bleu indique la transition entre distribution continue et distribution tétraédrique. Trois approches sont présentées, un calcul sphérique sans appariement (en rouge) un calcul sphérique avec appariement(en vert) l'énergie d'appariement associée est représentée en gris, un calcul où l'on n'impose aucune symétrie (en jaune)

dernière figure, on effectue trois calculs en champ-moyen relativistes différents pour différents rayons du noyau :

- Un calcul où l'on impose la sphéricité et où l'on néglige l'appariement SSR-RMF (Spatial Symmetry Breaking–RMF)
- Un calcul où la sphéricité est toujours imposée mais où l'on prend en compte l'appariement dans l'approche Bogolioubov (SSR-RMF (Spatial Symmetry Breaking– RHB)
- Un calcul où l'appariement est pris en compte mais où l'on n'impose aucune symétrie spatiale (SSU-RHB (Spatial Symmetry Unrestricted–RHB)

L'état d'énergie minimale correspond bien à une sphère de rayon $R_{RHB}^{(GS)} = 2.7$ fm ou l'appariement, lorsque l'on augmente artificiellement le rayon on commence par

conserver la sphéricité de la distribution. En continuant d'augmenter le rayon jusqu'à une valeur critique $R_{RHB}^{(Critique)} = 5.8$ fm, il devient plus favorable énergétiquement d'adopter une configuration déformée de moments β_2 et β_{32} non nuls. Les densités nucléaires qui correspondent aux rayons $R_{rms}^{(GS)}$ et $R_{rms}^{(Critique)}$ sont tracés en Figure (3.31). Sur cette figure on constate la transition entre les formes sphériques et tétra-



FIGURE 3.31 – Densité de l'¹⁶O dans le référentiel intrinsèque, à gauche densité de l'état fondamental à droite densité tétraédrique au point critique correspondant au rayon $R_{\rm rms}^{\rm (Critique)} = 5.9$

édriques exactement à l'image de ce que l'on pouvait attendre au vu de notre analyse en terme de théories des groupes. On peut en toute rigueur décrire cette transition de forme en termes de transition de phase quantique. La théorie des transitions de phases Mott [**RSMS83**] appliquée à l'étude des noyaux atomiques prédit qu'une transition de phase à lieu à un point critique en densité $\rho^{(\text{Critique})} = \rho^{(GS)}/10$. Avec les rayons de l'état fondamental et du point critique obtenus dans le cadre de notre approche relativiste on peut calculer le ratio

$$\frac{\rho_{RHB}^{(Critique)}}{\rho_{RHB}^{(GS)}} = \left(\frac{R_{RHB}^{(GS)}}{R_{RHB}^{(Critique)}}\right)^3 = \left(\frac{2.7}{5.8}\right)^3 = 0.1$$
(3.100)

La transition de formes de notre modèle a ainsi exactement lieu pour la valeur du rayon nucléaire correspondant à la théorie de Mott, ce qui n'était pas le cas lors des précédentes études utilisant un formalisme non-relativiste[GS13]. Le paramètre d'ordre permettant de décrire cette transition est le module du moment tétraédrique $|Q_{32}|$. La transition n'est pas progressive et l'on passe bien de manière discontinue de la phase sphérique à la phase tétraédrique, comme on peut le voir en Figure 3.32. Un autre point important dans ce cadre est la transition entres phases superfluides et phases non-superfluides. Comme on le voit en figure 3.30, lorsque l'on augmente le rayon, on passe très vite, pour un rayon $R_{\rm rms} = 3.0$ fm dans une phase superfluide, où l'énergie d'appariement devient non nulle puis croît continuement avec le rayon pour atteindre juste avant la transition vers le tétraèdre une valeur $E_{\rm pair} \simeq 4.7$ MeV. Toutefois lorsque la distribution de matière change de forme, les corrélations d'appariement cessent de jouer un rôle et l'on repasse dans une phase non-superfluide. Cette transition se comprend en terme énergétique, l'intensité des corrélations d'appariement étant fonction de la densité de niveaux dans le noyau lorsque la dégénérescence liée à la sphéricité est levée, cette densité de niveaux diminue et par conséquent l'appariement s'annule. C'est précisément ce que l'on observe dans le cadre de cette étude de l'Oxygène 16. Toutefois il est intéressant d'étudier plus en détail l'influence des corrélations particules-particules, et donc entre autre de l'appariement sur la structure des observables nucléaires. En particulier, leur impact, sur les propriétés



FIGURE 3.32 – Évolution du moment tétraédrique en fonction du rayon dans le cadre de l'approche RHB, la transition a lieu pour $R_{\rm rms}^{\rm (Critique)} = 5.9$.

de localisation et en conséquence sur l'émergence d'agrégats nucléaires, c'est l'objet du chapitre suivant.

3.6 Conclusions

Dans ce chapitre nous avons introduit le formalisme nécessaire à la compréhension des phénomènes de brisures de symétries dans l'approche des méthodes fonctionnelles de la densité. L'intérêt et l'impact formel d'une telle brisure de symétrie a été discutée. En particulier le formalisme des déformations spatiales a été présenté dans le cas des systèmes axiaux, octupolaires et triaxiaux puis implémenté afin de construire un ensemble d'outils permettant de résoudre les équations de Hartree-Boglioubov dans un cadre covariant. De nombreuses optimisations numériques ont été apportées afin de s'assurer de l'obtention des solutions optimales tout en minimisant le temps de calcul. La prise en compte de contraintes spatiales permettant d'obtenir des configurations déformées et de calculer des PES a été discutée et des algorithmes bio-mimétiques ont été développés et implémentés afin de pouvoir obtenir en un temps minimal des configurations sous multiples contraintes. Dans le cadre de ce formalisme, l'émergence d'agrégats nucléaires, les clusters, a été discutée particulièrement pour les noyaux légers et une mesure de localisation a été formalisée et implémentée afin d'identifier la présence de ces clusters. Pour expliquer l'origine microscopique de l'agrégation nous avons introduit un paramètre de localisation, qui quantifie la dispersion des fonctions d'ondes individuelles au sein du noyau pouvant contribuer à l'émergence de clusters. Ce paramètre nous a permis d'identifier les noyaux pouvant potentiellement présenter une préformation d'agrégats dans l'état fondamental. Ces noyaux sont aussi bien des noyaux légers dont le caractère "clusterisé" est connu expérimentalement que des noyaux plus lourds, ce qui tend à indiquer que la préformation d'agrégats est l'une des conditions pour qu'un noyau soit un émetteur α ou un émetteur de radioactivité cluster. Enfin l'agrégation nucléaire a été étudiée en tant que transition de phase et en tant que passage d'une symétrie continue à une symétrie ponctuelle. En particulier la formation de clusters α dans l'Oxygène 16 a été étudiée dans un cadre relativiste mettant en évidence une transition de phase quantique au sens de Mott au niveau de la densité à 1-corps. Cette transition de forme s'accompagne d'une transition d'une phase superfluide sphérique à une phase non-superfluide tétraédrique tendant à mettre en exergue l'impact des corrélations particules-particules sur la géométrie des systèmes nucléaires et sur la formation des clusters en particulier.

3.7 Références

- [AAR16] S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev, and P. Ring. Octupole deformation in the ground states of even-even nuclei : A global analysis within the covariant density functional theory. *Phys. Rev. C*, 93 :044304, Apr 2016. 88
- [APP⁺10] A. Astier, P. Petkov, M.-G. Porquet, D. S. Delion, and P. Schuck. Novel manifestation of α -clustering structures : New " $\alpha + ^{208}$ Pb" states in ²¹²Po revealed by their enhanced *e*1 decays. *Phys. Rev. Lett.*, 104 :042701, Jan 2010. 112
 - [AS64] M. Abramovitz and I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, Mineola, NY, 1964. 109
- [BBH+87] D M Brink, B Buck, R Huby, M A Nagarajan, and N Rowley. Rotational bands in deformed nuclei. *Journal of Physics G : Nuclear Physics*, 13(5):629, 1987. 79
 - [BE90] A. D. Becke and K. E. Edgecombe. A simple measure of electron localization in atomic and molecular systems. *The Journal of Chemical Physics*, 92(9) :5397–5403, 1990. 102
 - [BHR03] Michael Bender, Paul-Henri Heenen, and Paul-Gerhard Reinhard. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. *Rev. Mod. Phys.*, 75 :121–180, Jan 2003. xi, 77
 - [BN96] P. A. Butler and W. Nazarewicz. Intrinsic reflection asymmetry in atomic nuclei. *Rev. Mod. Phys.*, 68:349–421, Apr 1996. 88
 - [But16] P A Butler. Octupole collectivity in nuclei. *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, 43(7) :073002, 2016. 88
 - [BW97] R R Betts and A H Wuosmaa. Nuclear molecules. *Reports on Progress in Physics*, 60(8) :819, 1997. 100
 - [C10] Beck. C. Cluster in Nuclei. Springer, 2010. xii, 100
 - [Cam97] Campbell. On a law of combination of operators (second paper)*. Proceedings of the London Mathematical Society, s1-29(1):14–32, 1897. 77
- [CPD⁺76] J. C. Cunnane, M. Piiparinen, P. J. Daly, C. L. Dors, T. L. Khoo, and F. M. Bernthal. High-spin level structure of ¹⁹⁰Pt and ¹⁹²Pt. *Phys. Rev. C*, 13 :2197–2207, Jun 1976. 92
- [DAA⁺17] D Dell'Aquila, L Acosta, L Auditore, G Cardella, E De Filippo, S De Luca, L Francalanza, B Gnoffo, G Lanzalone, I Lombardo, N S Martorana, A Pagano, E V Pagano, M Papa, S Pirrone, G Politi, L Quattrocchi, F Rizzo, E Rosato, P Russotto, A Trifirò, M Trimarchi, G Verde, and M Vigilante. Study of the cluster structure of 10 be and 16 c neutron-rich isotopes by means of intermediate energies breakup reactions. *Journal of Physics : Conference Series*, 863(1) :012029, 2017. 100
- [DHHS15] T. Duguet, H. Hergert, J. D. Holt, and V. Somà. Nonobservable nature of the nuclear shell structure : Meaning, illustrations, and consequences. *Phys. Rev. C*, 92 :034313, Sep 2015. 106

- [D.M66] Brink D.M. Alpha cluster model. proceedings of the international school of physics enrico fermi, 1966. 112
- [EKLV18] J.-P. Ebran, E. Khan, R.-D. Lasseri, and D. Vretenar. Single-particle spatial dispersion and clusters in nuclei. *Phys. Rev. C*, 97 :061301, Jun 2018. 109, 112
- [EKNcvacV13] J.-P. Ebran, E. Khan, T. Nikšić, and D. Vretenar. Localization and clustering in the nuclear fermi liquid. *Phys. Rev. C*, 87 :044307, Apr 2013. 107, 108, 110
 - [EKNV12] J.-P. Ebran, E. Khan, T. Niksic, and D. Vretenar. How atomic nuclei cluster. *Nature*, 487 :341 EP –, Jul 2012. 101, 106
 - [GMR07] Lu Guo, J. A. Maruhn, and P.-G. Reinhard. Triaxiality and shape coexistence in germanium isotopes. *Phys. Rev. C*, 76:034317, Sep 2007. 90
 - [GRJ⁺15] L. P. Gaffney, A. P. Robinson, D. G. Jenkins, A. N. Andreyev, M. Bender, A. Blazhev, N. Bree, B. Bruyneel, P. A. Butler, T. E. Cocolios, T. Davinson, A. N. Deacon, H. De Witte, D. DiJulio, J. Diriken, A. Ekström, Ch. Fransen, S. J. Freeman, K. Geibel, T. Grahn, B. Hadinia, M. Hass, P.-H. Heenen, H. Hess, M. Huyse, U. Jakobsson, N. Kesteloot, J. Konki, Th. Kröll, V. Kumar, O. Ivanov, S. Martin-Haugh, D. Mücher, R. Orlandi, J. Pakarinen, A. Petts, P. Peura, P. Rahkila, P. Reiter, M. Scheck, M. Seidlitz, K. Singh, J. F. Smith, J. Van de Walle, P. Van Duppen, D. Voulot, R. Wadsworth, N. Warr, F. Wenander, K. Wimmer, K. Wrzosek-Lipska, and M. Zielińska. Collectivity in the light radon nuclei measured directly via coulomb excitation. *Phys. Rev. C*, 91 :064313, Jun 2015. 88
 - [GRT90] Y.K Gambhir, P Ring, and A Thimet. Relativistic mean field theory for finite nuclei. *Annals of Physics*, 198(1):132 179, 1990. 84
 - [GS13] M. Girod and P. Schuck. α -particle clustering from expanding self-conjugate nuclei within the hartree-fock-bogoliubov approach. *Phys. Rev. Lett.*, 111:132503, Sep 2013. 113, 114
 - [HT38] L. R. Hafstad and E. Teller. The alpha-particle model of the nucleus. *Phys. Rev.*, 54 :681–692, Nov 1938. 100
 - [JSSN18] Paul Jerabek, Bastian Schuetrumpf, Peter Schwerdtfeger, and Witold Nazarewicz. Electron and nucleon localization functions of oganesson : Approaching the thomas-fermi limit. *Phys. Rev. Lett.*, 120:053001, Jan 2018. 108
 - [KBD⁺76] T.L. Khoo, F.M. Bernthal, C.L. Dors, M. Piiparinen, S. Saha, P.J. Daly, and J. Meyer-Ter-Vehn. Evidence for triaxial shapes in pt nuclei. *Physics Letters B*, 60(4):341 343, 1976. 90
 - [KEKH03] Yoshiko Kanada-En'yo, Masaaki Kimura, and Hisashi Horiuchi. Antisymmetrized molecular dynamics : a new insight into the structure of nuclei. *Comptes Rendus Physique*, 4(4) :497 – 520, 2003. 100
- [LNcvacVR05] G. A. Lalazissis, T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring. New relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon couplings. *Phys. Rev. C*, 71 :024312, Feb 2005. 86

- [LS84] G.A. Leander and R.K. Sheline. Intrinsic reflection asymmetry in odd-a nuclei. *Nuclear Physics A*, 413(3):375 415, 1984. 91
- [LVI⁺09] M. Lebois, D. Verney, F. Ibrahim, S. Essabaa, F. Azaiez, M. Cheikh Mhamed, E. Cottereau, P. V. Cuong, M. Ferraton, K. Flanagan, S. Franchoo, D. Guillemaud-Mueller, F. Hammache, C. Lau, F. Le Blanc, J. F. Le Du, J. Libert, B. Mouginot, C. Petrache, B. Roussière, L. Sagui, N. de Séréville, I. Stefan, and B. Tastet. Experimental study of ⁸⁴Gaβ decay : Evidence for a rapid onset of collectivity in the vicinity of ⁷⁸Ni. *Phys. Rev. C*, 80 :044308, Oct 2009. 90
- [MacEK⁺18] P. Marević, J.-P. Ebran, E. Khan, T. Nikšić, and D. Vretenar. Quadrupole and octupole collectivity and cluster structures in neon isotopes. *Phys. Rev. C*, 97 :024334, Feb 2018. xii, 104, 105
 - [McC05] John McCall. Genetic algorithms for modelling and optimisation. Journal of Computational and Applied Mathematics, 184(1):205 – 222, 2005. Special Issue on Mathematics Applied to Immunology. 96
 - [Mei60] Paul H.E. Meijer. A group theoretical proof of kramers' theorem. *Physica*, 26(1):61–65, 1960. 85
 - [Mit98] Melanie Mitchell. An Introduction to Genetic Algorithms. MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1998. 96
 - [Mot96] B. Mottelson. Nuclear structure, les houches, 1996. 107
- [NcvacRV⁺10] T. Nikšić, P. Ring, D. Vretenar, Yuan Tian, and Zhong-yu Ma. 3d relativistic hartree-bogoliubov model with a separable pairing interaction : Triaxial ground-state shapes. *Phys. Rev. C*, 81 :054318, May 2010. xii, 94
 - [NPVR14] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, and P. Ring. Dirhb—a relativistic self-consistent mean-field framework for atomic nuclei. *Computer Physics Communications*, 185(6):1808 – 1821, 2014. 85, 90, 92
 - [PBM⁺18] Deepak Pandit, Srijit Bhattacharya, Debasish Mondal, Pratap Roy, K. Banerjee, S. Mukhopadhyay, Surajit Pal, A. De, Balaram Dey, and S. R. Banerjee. Experimental signature of collective enhancement in nuclear level density. *Phys. Rev. C*, 97 :041301, Apr 2018. 80
 - [Pea01] John A. at al Peacock. A measurement of the cosmological mass density from clustering in the 2df galaxy redshift survey. *Nature*, 410 :169 EP –, Mar 2001. Article. 99
 - [PMRZ08] J. Peng, J. Meng, P. Ring, and S. Q. Zhang. Covariant density functional theory for magnetic rotation. *Phys. Rev. C*, 78 :024313, Aug 2008. 90
 - [PSL⁺17] R. Navarro Perez, N. Schunck, R.-D. Lasseri, C. Zhang, and J. Sarich. Axially deformed solution of the skyrme–hartree–fock–bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis (iii) hfbtho (v3.00) : A new version of the program. *Computer Physics Communications*, 220 :363 – 375, 2017. 83, 106

- [RG87] P-G Reinhard and K Goeke. The generator coordinate method and quantised collective motion. *Reports on Progress in Physics*, 50(1):1, 1987. 95
- [RGL97] P. Ring, Y.K. Gambhir, and G.A. Lalazissis. Computer program for the relativistic mean field description of the ground state properties of even-even axially deformed nuclei. *Computer Physics Communications*, 105(1):77 – 97, 1997. 82
 - [RJ84] H. J. Rose and G. A. Jones. A new kind of natural radioactivity. *Nature*, 307 :245 EP –, Jan 1984. 100
- [RMUO11] P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, A. S. Umar, and V. E. Oberacker. Localization in light nuclei. *Phys. Rev. C*, 83 :034312, Mar 2011. 102, 103
- [RSMS83] G. Röpke, M. Schmidt, L. Münchow, and H. Schulz. Particle clustering and mott transition in nuclear matter at finite temperature (ii). *Nuclear Physics A*, 399(2):587 – 602, 1983. 114
- [SDNR05] M.V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and P. Ring. Axially deformed solution of the skyrme–hartree–fock–bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis. the program hfbtho (v1.66p). *Computer Physics Communications*, 167(1):43 – 63, 2005. 83
- [SLW17] B. H. Sun, C. Y. Liu, and H. X. Wang. Correlating double-difference of charge radii with quadrupole deformation and b(e2) in atomic nuclei. *Phys. Rev. C*, 95 :014307, Jan 2017. 80
- [SSBN10] A. Staszczak, M. Stoitsov, A. Baran, and W. Nazarewicz. Augmented lagrangian method for constrained nuclear density functional theory. *The European Physical Journal A*, 46(1):85–90, Oct 2010. 86
 - [Tas11] Benoit Tastet. Structure des noyaux de gallium, de germanium et d'arsenic riches en neutrons autour de N=50 et Développement d'une source d'ionisation laser à ALTO. Theses, Université Paris Sud - Paris XI, May 2011. 90
- [TMR09] Yuan Tian, Zhong-yu Ma, and Peter Ring. Separable pairing force for relativistic quasiparticle random-phase approximation. *Phys. Rev. C*, 79 :064301, Jun 2009. 85
- [vOFKE06] W. von Oertzen, Martin Freer, and Yoshiko Kanada-En'yo. Nuclear clusters and nuclear molecules. *Physics Reports*, 432(2):43 – 113, 2006. 100
- [WAK⁺17] Meng Wang, G. Audi, F.G. Kondev, W.J. Huang, S. Naimi, and Xing Xu. The ame2016 atomic mass evaluation (ii). tables, graphs and references. *Chinese Physics C*, 41(3) :030003, 2017. 86, 88, 94

Chapitre 4

Corrélations à 2 et 4 corps : Impact sur la structure nucléaire

« The smallest particles of matter were said to be right-angled triangles which, after combining in pairs, joined together into the regular bodies of solid geometry. [...] The most important result of it all, perhaps, was the conviction that, in order to interpret the material world we need to know something about its smallest parts. »

Werner Heisenberg

Sommaire

| 4.1 | Appar | iement et structure nucléaire | 122 |
|-----|--------|---|-----|
| | 4.1.1 | Introduction | 122 |
| | 4.1.2 | Interaction d'appariement | 122 |
| | 4.1.3 | Appariement et agrégation | 125 |
| 4.2 | Struct | ure spatiale des corrélations d'appariement | 126 |
| | 4.2.1 | Éléments de formalisme | 126 |
| | 4.2.2 | Transformations de Talmi et Moshinsky | 129 |
| | | Produits de fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique | 129 |
| | | Description axiale et triaxiale | 130 |
| | 4.2.3 | Propriétés spatiales du tenseur d'appariement | 132 |
| | 4.2.4 | Impact de la restauration du nombre de particules | 136 |
| | 4.2.5 | Paires de Cooper nucléoniques | 141 |
| | 4.2.6 | Conclusions | 144 |
| 4.3 | Corré | lations à 4 corps | 145 |
| | 4.3.1 | Modèles de quartets | 145 |
| | 4.3.2 | Coût numérique et optimisations | 146 |
| | 4.3.3 | Cas du Néon 20 | 148 |
| | | Impact des corrélations à 4-corps | 148 |
| | | Impact des corrélations à deux et quatre corps | 149 |
| | | Localisation spatiale d'un quartet | 151 |
| | 4.3.4 | Noyaux N=Z | 152 |
| 4.4 | Conclu | usions | 154 |
| 4.5 | Référe | ences | 155 |

4.1 Appariement et structure nucléaire

4.1.1 Introduction

Le phénomène d'agrégation nucléaire, tel que décrit dans le chapitre précédent, traduit un changement profond du comportement des protons et des neutrons. Il est, dans certaines conditions, plus favorable énergétiquement pour les nucléons, de former des clusters plutôt que de se répartir de manière homogène. L'étude de ce phénomène en tant que transition de phase dans le cas de l'Oxygène 16 a mis en évidence l'importance des corrélations particule-particule sur le mécanisme d'agrégation et plus généralement sur la structure nucléaire. Dans les chapitres précédents nous avons introduit le formalisme nécessaire à la description de la structure nucléaire, ainsi qu'à la prise en compte de corrélations de divers types. Nous nous proposons à présent d'étudier en détail l'impact des corrélations de type particule-particule sur les systèmes nucléaires. Dans un premier temps nous reviendrons brièvement sur l'implémentation des corrélations d'appariement et étudierons l'impact sur la densité nucléonique, qui dans une approche RMF, se résume à la somme des contributions à un corps et en particulier sur les propriétés de localisation et d'agrégation. Pour ce faire il est important de revenir sur le détail et la structure de l'interaction d'appariement dans le cadre de notre approche relativiste.

4.1.2 Interaction d'appariement

Dans le cadre du formalisme EDF, on introduit phénoménologiquement une contribution d'appariement à la fonctionnelle de la densité. Plusieurs approches permettent la construction de cette interaction phénoménologique [SSVn05][FS99]. Formellement la plus simple interaction que l'on puisse construire, serait une interaction de portée nulle dans le canal d'appariement[Men98]. Ce type d'interaction a l'avantage d'être particulièrement peu gourmande en ressources numériques que ce soit pour des configurations sphériques ou déformées[DNS02]. Toutefois une interaction de ce type engendre des divergences ultraviolettes que l'on peut régulariser en limitant l'espace variationnel dans le canal d'appariement. Néanmoins cette régularisation par troncation implique l'introduction d'un cut-off phénoménologique, limitant le caractère prédictif de notre théorie en particulier pour les noyaux proches des drip-lines [NcvacRV05]. Pour pallier à cette spéciosité intrinsèque, il faudrait construire une interaction de portée finie, ne nécessitant pas l'introduction d'un schéma de régularisation *ad-hoc*. Le choix le plus naturel¹ serait d'étendre l'interaction relativiste du canal particule-trou au canal particule-particule. Néanmoins cette interaction n'est pas séparable et par conséquent le temps de calcul devient particulièrement important pour des configurations déformées. De plus on peut montrer qu'un traitement relativiste de l'appariement n'est pas nécessaire pour reproduire correctement les observables lui étant directement reliés[SRR01]. On peut donc trouver un compromis et construire une interaction non-relativiste de portée finie et séparable construite de manière à reproduire l'évolution du gap d'appariement prédit par la fonctionnelle D1S de Gogny dans la matière nucléaire, comme on peut le voir en Figure [TMR09b][yMTR10][TMR09a]. Dans l'espace des moments les éléments de matrice de l'interaction particule-particule V^{pp} s'expriment entre deux état d'impulsions k et k'.

$$\langle k|V^{pp}|k'\rangle = -Gp(k)p(k') \tag{4.1}$$

On peut simplifier le problème en adoptant un *ansatz* Gaussien pour $p(k) = e^{-a^2k^2}$. Cette interaction dépend de deux paramètres G et a que l'on obtient en par ajustement

^{1.} Mais pas forcément le plus juste, dans le cadre d'une approche effective.



FIGURE 4.1 – Comparaison des gaps d'appariements dans la matière nucléaire en fonction des densités prédites par les paramétrisations D1 et D1S (en traits pleins) avec l'évolution issue de l'interaction séparable. Figure issue de [TMR09a].

sur le gap d'appariement prédits par l'interaction D1S[BGG91] :

$$G = 728 \text{MeV} \cdot \text{fm}^3 \qquad a = 0.644 \text{fm} \qquad (4.2)$$

Puis on exprime cette interaction à deux-corps (4.1) dans l'espace des configurations

$$V^{pp}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r'}_1, \mathbf{r'}_2) = -G\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R'})P(r)P(r')$$
(4.3)

Où l'on définit les coordonnées relatives \mathbf{r} et du centre de masse \mathbf{R} selon

$$\mathbf{r} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \tag{4.4}$$

$$\mathbf{R} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \tag{4.5}$$

Tandis que $P(\mathbf{r})$ est la transformée de Fourier de p(k) :

$$P(\mathbf{r}) = \frac{1}{(4\pi a^2)^{3/2}} e^{-\frac{\mathbf{r}^2}{2a^2}}$$
(4.6)

L'invariance par translation est assurée par le terme $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$, mais ce dernier rend l'interaction non-séparable dans l'espace des configurations. Toutefois les éléments de matrices associés, correctement anti-symétrisés $\langle n_1 n_2 | \tilde{V}^{pp} | n'_1 n'_2 \rangle$ peuvent êtres représentés comme une somme de termes séparables dans la base d'oscillateur harmonique

$$\langle n_1 n_2 | \tilde{V^{pp}} | n'_1 n'_2 \rangle = \sum_N \left(W^N_{n_1 n_2} \right)^* W^N_{n'_1 n'_2} \tag{4.7}$$

En effet on peut, à l'aide des transformations de Talmi et Moshinsky [Tal52][Fie79][Rob10] exprimer les fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique dans le systèmes des coordonnées relatives et du centre de masse, par exemple pour un oscillateur harmonique à une dimension selon l'axe x

$$|n_x^{\alpha} n_x^{\beta}\rangle = \sum_{N_x n_x} \mathcal{M}_{n_x^{\alpha} n_x^{\beta}}^{N_x, n_x} |N_x n_x\rangle$$
(4.8)

Les n_x indiquent les nombres quantiques de l'oscillateur harmonique dans le référentiel $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ et les N_x les nombres quantiques dans le référentiel du centre de masse $(\mathbf{R}_1, \mathbf{r})$. Où $\mathcal{M}_{n_x^\alpha n_x^\beta}^{N_x, n_x}$ est le coefficient de Talmi à une dimension s'exprimant

$$\mathcal{M}_{n_x^{\alpha} n_x^{\beta}}^{N_x, n_x} = \sqrt{\frac{n_x^{\alpha}! n_x^{\beta}! n_x! N_x!}{2^{(n_x^{\alpha} + n_x^{\beta})}}} \sum_{k=\max[0, (n_x^{\beta} - n_x)]}^{k=\min[n_x^{\beta}, N_x]} \frac{(-1)^k}{k! (n_x^{\beta} - k)! (N_x - k)! (n_x - n_x^{\beta} + k)!}$$
(4.9)

Ainsi pour un oscillateur harmonique à trois dimensions où l'invariance sous les reflections spatiales n'est pas imposée a priori, dont les fonctions d'ondes s'expriment dans un système de coordonnées cartésiennes, l'expression de l'élément de matrice de l'interaction d'appariement selon x s'exprime

$$V_x^{pp} = \int dx_1 dx_2 dx_1' dx_2' \phi_{n_x}^{\alpha}(x_1) \phi_{n_x}^{\beta}(x_2) P(\frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}) \delta(X - X') P(\frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}}) \phi_{n_x}^{\gamma}(x_1') \phi_{n_x}^{\delta}(x_2')$$
(4.10)

X indiquant la coordonnée du centre de masse et X' la coordonnée relative. On peut ainsi à l'aide de (4.8) exprimer l'élément de matrice d'appariement total selon x, y et z en tant que somme

$$\langle \alpha \beta | V^{pp} | \gamma \delta \rangle = -G \sum_{N_x} \sum_{N_x} \sum_{N_z} \left(W^{N_x N_y N_z}_{\alpha \beta} \right)^* W^{N_x N_y N_z}_{\gamma \delta}$$
(4.11)

Où

$$W_{\alpha\beta}^{N_{x}N_{y}N_{z}} = W_{n_{x}^{\alpha}n_{x}^{\beta}}^{N_{x}} W_{n_{y}^{\alpha}n_{y}^{\beta}}^{N_{y}} W_{n_{z}^{\alpha}n_{z}^{\beta}}^{N_{z}}$$
(4.12)

En introduisant l'indice générique $\mu = \{x, y, z\}$, on peut exprimer les éléments de matrices à 1-corps en reprenant les notations introduites au Chapitre 3 comme

$$W_{n_{\mu}^{\gamma}n_{\mu}^{\gamma}}^{N_{\mu}} = \sqrt{\beta_{\mu}} \mathcal{M}_{n_{\mu}^{\gamma}n_{\mu}^{\delta}}^{n,N_{\mu}} \mathcal{I}_{n} (\alpha_{\mu}) \quad \text{avec} \quad n = N_{\mu} - n_{\mu}^{\gamma} - n_{\mu}^{\delta}$$
(4.13)

Avec $\alpha_{\mu} = a\beta_{\mu}$ et l'intégrale sur la coordonnée relative

$$\mathcal{I}_n(\alpha_\mu) = \frac{1}{\alpha_\mu} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{n_\mu}(\xi) e^{\frac{\xi^2}{2\alpha_\mu^2}} d\xi$$
(4.14)

Cette dernière intégrale est nulle quand n_{μ} est impair. De plus on peut l'exprimer en utilisant la fonction génératrice des polynômes de l'Hermite $H_n(\xi)$.

$$e^{2\xi z - z^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) z^n$$
(4.15)

permettant d'obtenir une expression analytique pour (4.14)

$$\mathcal{I}_n(\alpha_\mu) = \frac{(-1)^{n/2}}{(2\pi)^{1/4}} \frac{\sqrt{n!}}{2^{n/2}(n/2)!} \left(\frac{1}{1+\alpha_\mu^2}\right)^{1/2} \left(\frac{1-\alpha^2}{1+\alpha^2}\right)^{n/2}$$
(4.16)

Ainsi on peut pour un faible coût numérique simuler une interaction de portée finie pour tout type de configuration. Néanmoins pour les systèmes axiaux, il faut introduire des transformations de Talmi bidimensionnelles pour la partie radiale de la fonction d'ondes, nous reviendrons sur ce point dans la section 4.2.2. A partir des éléments de matrices (4.11) le champs d'appariement $\Delta_{n_1n_2}$ s'exprime [yMTR10]

$$\Delta_{n_1 n_2} = \sum_N P_n \left(W_{n_1 n_2}^N \right)^* \qquad \text{Avec} \quad P_N = \frac{1}{2} Tr(W^N \kappa) \tag{4.17}$$

Où κ est le tenseur d'appariement. Enfin l'énergie d'appariement quantifiant l'intensité de ces corrélations s'obtient

$$E_{\text{Pair}} = -G \sum_{N} \left(P_N \right)^* P_N \tag{4.18}$$

Ainsi on peut, avec ces seuls paramètres G et a, ajuster cette interaction sur la paramétrisation D1S dans le canal d'appariement[NPVR14].

4.1.3 Appariement et agrégation

Avec cette interaction on peut étudier tout type de configuration et de noyaux, y compris ceux présentant des agrégats nucléoniques. Pour étudier spécifiquement l'influence des corrélations d'appariement, on fait varier l'intensité de l'appariement en modifiant la constante d'appariement G par un préfacteur multiplicatif. Revenons sur le cas du Néon 20, son état fondamental est déformé et l'énergie d'appariement associée est nulle. En augmentant artificiellement l'intensité de l'appariement, toutes choses par ailleurs fixées, on observe en Figure 4.2 l'évolution de la déformation lorsque l'on augmente la valeur du coefficient multiplicatif. On peut représenter en



FIGURE 4.2 – Évolution de la déformation axiale β_2 du ²⁰Ne en fonction de l'intensité des corrélations d'appariements matérialisés par l'énergie d'appariement en MeV. En lettres capitales 4 configurations spécifiques

Figure 4.3 les densités et les mesures de localisation associées aux quatre configurations de la figure 4.2.

| А | В | C | D |
|---|----|----|----|
| 0 | 10 | 14 | 20 |

TABLEAU 4.1 - Energie d'appariement en MeV pour les 4 configurations présentées

L'augmentation de l'intensité des corrélations d'appariement, tend à rendre la distribution de matière nucléaire isotrope en réduisant la déformation. De plus ces corrélations tendent également à rendre la distribution homogène et à faire disparaître les agrégats présents comme on peut le constater sur les mesures de localisation en Figure 4.3. Initialement les deux clusters sont totalement localisés ($C_{\tau\sigma} = 1$) lorsque les corrélations d'appariement augmentent le système se délocalise ($C_{\tau\sigma} = 0.5$). Ainsi quand les corrélations d'appariement augmentent, il est plus favorable énergétiquement de restaurer les dégénérescences du système, levées par la déformation, plutôt que de maintenir l'anisotropie du système. Autrement dit d'une part le potentiel de champ-moyen tend à former des sous-structures localisées tandis que le champ d'appariement renforce le comportement collectif du système en tendant à rendre le noyau sphérique et homogène. Pour aller plus loins dans notre compréhension du


FIGURE 4.3 – Évolution pour le ²⁰Ne de la densité (à gauche) et de la mesure de localisation (à droite) lorsque l'on augmente l'intensité des corrélations d'appariement. Les configurations A,B,C,D sont celles indiquées en figure 4.2 et correspondent aux valeurs de 4.1. Calculs effectués dans une approche *RMF* pour la paramétrisation DD-ME2.

processus physique exact à l'origine de ce phénomène il faut étudier l'agencement spatial microscopique des nucléons appariés. C'est l'objet de la section suivante.

4.2 Structure spatiale des corrélations d'appariement

La structure spatiale des corrélations d'appariement, en particulier dans les systèmes de taille finie suscite l'intérêt de la communauté scientifique afin de comprendre plus finement l'impact de l'appariement dans les noyaux [Mat13] [PSSB10] [PSS07]. D'une part pour comprendre au mieux l'influence des corrélations sur la structure d'un point de vue formel, mais également pour faire le lien avec certaines observables expérimentales, en particulier l'étude de l'émission de paires de nucléons dans le continuum [SSM⁺08] [SAB⁺16].

4.2.1 Éléments de formalisme

Pour étudier les propriétés spatiales des paires, on peut considérer différentes approches pour construire une fonction d'onde de deux nucléons corrélés. Formellement toute l'information physique d'un système à N-corps et des corrélations qui y apparaissent sont contenues dans la matrice densité d'ordre N, qui peut s'écrire, pour un état pur Ψ décrivant totalement le système.

$$\mathcal{D}_N(1,...,N;1',...,N') = \Psi(1,...,N) \left(\Psi(1',...,N')^*\right)$$
(4.19)

Ici l'indice 1 se réfère à l'ensemble des variables spatiales de spin et d'isospin, $1 \equiv {\bf r}_1, \sigma_1, \tau_1$. Toutefois cette matrice d'ordre N est un objet d'une complexité

telle qu'il ne peut-être appréhendé analytiquement. Aussi doit-on adopter une approche réductionniste en ne conservant l'information complète que sur une partition de p particules tandis que l'on ne considère que les effets moyennés des N - p autres particules. Cette généralisation du principe de champ-moyen, dérivé dans les Chapitre 1 et 2, s'exprime dans le cadre du formalisme des matrices densité réduites dites *RDM* (*Reduced Density Matrix*), usuelles en chimie théorique[HUS40][AV00]. La *RDM* d'ordre p s'exprime comme

$$\mathcal{D}_p(1,...,p;1',...,p') = \int d(p+1)..dN\Psi(1,...,N) \left(\Psi(1',...,p',p+1,...,N)^*\right)$$
(4.20)

Où l'intégrale $\int d1 \equiv \int d^3r_1 \sum_{\sigma_1,\tau_1}$. Les RDM sont par définition normalisées à l'unité. Physiquement parlant il fait plus sens dans le cadre d'une théorie en seconde quantification d'introduire les p-matrices ρ_p de Coleman [AV00] associées à (4.20) ainsi que les matrices densités réduites normalisées Γ_p , normalisées au nombre de p partitions possibles :

$$\Gamma_{p} = \frac{\rho_{p}(1,...,p;1',...,p')}{p!} = \frac{A!}{(A-p)!p!} \mathcal{D}_{p}(1,...,p;1',...,p')$$

$$= \frac{1}{p!} \langle \Psi | \psi^{\dagger}(p') .. \psi^{\dagger}(1')\psi(1) ..\psi(p) | \Psi \rangle$$
(4.21)

Où les $\{\psi^{\dagger}, \psi\}$ sont les opérateurs créations et annihilation nucléoniques usuels. Les états propres des Γ_p peuvent être compris comme des fonctions d'ondes à p-corps dans le milieu. Dans le cadre de l'étude de structures appariées, l'objet d'intérêt est donc la *RDM* à deux corps Γ_2 . En particulier, sa partie diagonale peut s'écrire

$$\Gamma_2(1,2) = \langle \Psi | \psi^{\dagger}(1)\psi^{\dagger}(2)\psi(2)\psi(1) | \Psi \rangle$$
(4.22)

Plus précisément (4.22) donne la probabilité jointe de trouver dans le système un nucléon de spin σ_1 d'isospin τ_1 localisée en \mathbf{r}_1 et un autre nucléon de spin σ_2 d'isospin τ_2 en \mathbf{r}_2 . Cette probabilité se décompose en une partie de type champ-moyen (*RH*) et une partie issue de corrélations supplémentaires. En toute généralité la contribution qui encode les corrélations correspond à un état propre associé à une valeur propre de l'ordre du nombre de particules A traduisant une ordre diagonale de longue portée. Plus pragmatiquement, dans le cas d'une théorie *RHB* l'expression (4.22) peut se factoriser

$$\Gamma_2(1,2) = \underbrace{\rho^{(1)}(1)\rho^{(1)}(2)}_{\text{Champ-moven}} + \underbrace{|\kappa(1,2)|^2}_{|\kappa(1,2)|^2}$$
(4.23)

Ou la densité à 1-corps est définie comme

$$\rho^{(1)}(x) = \langle \Psi_{\rm HFB} | \psi^{\dagger}(x) \psi(x) | \Psi_{\rm HFB} \rangle \tag{4.24}$$

Et le tenseur d'appariement à deux-corps

$$\kappa(1,2) = \langle \Psi_{\rm HFB} | \psi(2)\psi(1) | \Psi_{\rm HFB} \rangle \tag{4.25}$$

En utilisant les transformations de Bloch-Messiah-Zumino introduites en Chapitre 2, on peut exprimer le tenseur d'appariement (4.25) dans la base canonique

$$\kappa(1,2) = \sum_{k} u_k v_k f_k(1) f_{\bar{k}}(2)$$
(4.26)

Où les f_k représentent les fonctions d'ondes nucléoniques relativistes et les u_k et v_k sont les paramètres variationnels de type BCS précédemment décrits. Le tenseur

d'appariement encode l'information portant sur les corrélations à deux-corps, non incluses dans le terme de champ-moyen de l'équation (4.23). Pour pouvoir s'approprier au mieux le comportement spatial d'un opérateur à 2-corps de cet objet, il est préférable de se placer dans le référentiel du centre de masse et d'étudier ainsi en place de $\kappa(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$:

$$\kappa(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad \text{Où} \quad \begin{cases} \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{\sqrt{2}} \\ \mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{\sqrt{2}} \end{cases}$$
(4.27)

A noter, que la partie diagonale de (4.27), $\kappa(\mathbf{R}, \mathbf{r} = \mathbf{0})$ correspond à un facteur de normalisation près, au paramètre d'ordre de Ginzburg-Landau, qui quantifie la transition de phase entre phase non-superfluide ($\kappa(\mathbf{R}, \mathbf{r} = \mathbf{0}) = 0$) et phase superfluide ($|\kappa(\mathbf{R}, \mathbf{r})| > \mathbf{0} = 0$). On peut reprendre l'exemple du Néon 20. Pour les trois configurations où l'intensité des corrélations à été artificiellement magnifiée : la densité nucléonique à 1-corps en vis-à-vis de la partie locale du tenseur d'appariement est représentée en Figure 4.4.



FIGURE 4.4 – Évolution pour le ²⁰Ne de la densité (à gauche) et de la partie locale du tenseur d'appariement associé (à droite) lorsque l'on augmente l'intensité des corrélations d'appariements. Les configurations B,C,D sont celles de la figure 4.2. A noter que l'échelle de la norme de κ change pour chaque configuration.

On peut d'ores et déjà remarquer que la norme de la partie locale du tenseur d'appariement augmente bien avec l'intensité de l'interaction d'appariement. Plus cette norme est élevée plus la probabilité d'observer une paire de nucléons de spins opposés augmente. D'autre part les zones dont la densité nucléonique est la plus élevée correspondent également aux zones où cette probabilité est la plus haute, l'intensité de l'appariement étant fonction de la densité de niveaux. Toutefois cet objet, s'il caractérise la localisation spatiale de nucléons corrélés, ne peut être directement assimilé à la fonction d'onde de nucléons appariés. En effet ce tenseur n'est pas normalisé à l'unité comme il le devrait pour une fonction d'onde, mais par un facteur

$$\mathcal{N}_{\kappa} = \int d\mathbf{R} d\mathbf{r} |\kappa(\mathbf{R}, \mathbf{r})|^2$$
(4.28)

Ce facteur décrit la probabilité de trouver au sein du noyau, deux nucléons de spins opposés, sans se préoccuper de leur agencement spatial relatif. Aussi pour percevoir l'agencement spatial des paires il faut s'intéresser au tenseur complet à deux corps et non plus seulement à sa partie locale. Pour étudier cette partie non locale il est préférable de se placer dans le référentiel du centre de masse des paires. Encore fautil définir une méthode systématique pour passer des coordonnées des particules \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 aux coordonnées du centre de masse \mathbf{R} et relatives \mathbf{r} . Comme nous l'avions brièvement mentionné, les transformations de Talmi (puis plus tard de Moshinsky) sont la clé de ce changement de référentiel dans le cadre d'une base d'oscillateur harmonique. Toutefois le calcul précis de ces objets mérite d'être quelque peu détaillé, en raison de certaines subtilités pouvant entraîner des pathologies analytiques et numériques.

4.2.2 Transformations de Talmi et Moshinsky

Produits de fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique

Dans le cadre de l'étude des propriétés spatiales des paires nucléoniques, cette classe de transformation n'est pas qu'un simple intermédiaire de calcul comme c'était le cas pour le calcul des éléments de l'interaction en 4.1.2, mais bien un enjeu physique à part entière. Pour calculer les éléments de matrice de l'interaction d'appariement il s'agissait d'exploiter la séparabilité de l'interaction. Tandis que pour l'étude à venir il s'agit de se placer dans le référentiel du centre de masse pour étudier l'agencement spatial des paires. Le principe de la transformation est simple et est illustré en Figure 4.5. Le principe central de ces transformations est d'exprimer le produit des



FIGURE 4.5 – Représentation schématique des deux systèmes de coordonnées utilisés pour décrire les propriétés spatiales d'une paire de particules.

fonctions d'onde d'un oscillateur harmonique prises en $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ comme le produit de ces fonction d'ondes en (\mathbf{R}, \mathbf{r}) . Symboliquement on cherche une relation du type de

$$\Phi_{\mathbf{n}_{a}}(\mathbf{r}_{1})\Phi_{\mathbf{n}_{b}}(\mathbf{r}_{2}) = \sum_{\mathbf{n}_{c}} \mathcal{M}_{\mathbf{n}_{a},\mathbf{n}_{b}}^{\mathbf{n}_{c},\mathbf{n}_{a}+\mathbf{n}_{b}-\mathbf{n}_{c}} \Phi_{\mathbf{n}_{c}}(\mathbf{R})\Phi_{\mathbf{n}_{a}+\mathbf{n}_{b}-\mathbf{n}_{c}}(\mathbf{r})$$
(4.29)

Où les \mathbf{n}_i indiquent les ensembles de nombres quantiques indexant les fonctions d'ondes que l'on veut décrire. Le coefficient de Talmi-Moshinsky $\mathcal{M}_{\mathbf{n}_a,\mathbf{n}_b}^{\mathbf{n}_c,\mathbf{n}_a+\mathbf{n}_b-\mathbf{n}_c}$ reste à déterminer. Ces coefficients dépendent des symétries que l'on veut décrire pour étudier des systèmes sphériques, axiaux ou triaxiaux. Nous nous focaliserons sur ces deux derniers cas.

Description axiale et triaxiale

Comme nous l'avions vu au Chapitre 3, la fonction d'onde d'oscillateur d'un système axial s'exprime comme le produit d'une partie radiale et axiale. Ainsi pour un oscillateur de paramètres $\{\beta_z, \beta_r\}$ caractérisé par l'ensemble de nombres quantiques $\mathbf{n} = \{n_r, m_l, n_z\}$

$$\Phi_{n_r,m_l,n_z}(\mathbf{r},z) = \phi_{n_r,m_l}(\mathbf{r},\beta_r)\phi_{n_z}(z,\beta_z)$$
(4.30)

En conséquence le coefficient de Talmi-Moshinsky² axial s'exprime également comme produit d'un terme radial et axial.

$$\mathcal{M}_{\mathbf{n}_{a},\mathbf{n}_{b}}^{\mathbf{n}_{c},\mathbf{n}_{\mu}} = \mathcal{M}_{(n_{r_{a}}m_{l_{a}}),(n_{r_{\mu}}m_{l_{\mu}})}^{(n_{r_{c}}m_{l_{c}}),(n_{r_{\mu}}m_{l_{\mu}})} \cdot \mathcal{M}_{(n_{z_{a}}),(n_{z_{b}})}^{(n_{z_{c}}),(n_{z_{\mu}})}$$
(4.31)

Où l'indice réduit μ indique pour tout nombre quantique $n_{\mu} = n_a + n_b - n_c$. Pour déterminer les expressions de ces deux coefficients on peut en toute généralité utiliser les fonctions génératrices de l'oscillateur harmonique. Cette dérivation présente un intérêt particulier pour le coefficient radial à deux dimensions ($r = \sqrt{x^2 + y^2}$) qui doit être calculé avec un soin particulier. Les fonctions génératrices de sétats propres de l'oscillateur harmonique, autrement dit leur expression en termes de série polynomiale, sont l'élément fondamental permettant d'obtenir l'expression de ces coefficients. L'idée de cette approche est d'utiliser les propriétés multiplicatives remarquables de ces fonctions pour exprimer le produit (4.29). Une dérivation complète est proposée en Annexe F. On obtient ainsi les expressions des coefficients satisfaisant aux relations :

 Radiale (2D), portant sur les polynômes de Laguerre, où l'on veut exprimer le produit

$$\phi_{n_{r_{a}},m_{l_{a}}}(\mathbf{r}_{1})\phi_{n_{r_{b}},m_{l_{b}}}(\mathbf{r}_{2}) = \sum_{n_{r_{c}},m_{l_{c}}} \mathcal{M}_{(n_{r_{a}}m_{l_{a}}),(n_{r_{b}}m_{l_{b}})}^{(n_{r_{c}},m_{l_{a}}),(n_{r_{b}}m_{l_{b}})} \\ \phi_{n_{r_{c}},m_{r_{c}}}\left(\frac{\mathbf{r}_{1}+\mathbf{r}_{2}}{\sqrt{2}}\right)\phi_{n_{r_{\mu}},m_{r_{\mu}}}\left(\frac{\mathbf{r}_{1}-\mathbf{r}_{2}}{\sqrt{2}}\right)$$
(4.32)

Où le coefficient de Talmi radial prend pour expression

$$\mathcal{M}_{(n_{r_{a}}m_{l_{a}}),(n_{r_{b}}m_{l_{b}})}^{(n_{r_{c}}m_{l_{\mu}})} = \sqrt{\left[\left(\frac{X_{a}\pm m_{l_{a}}}{2}\right)!\left(\frac{X_{b}\pm m_{l_{b}}}{2}\right)!\left(\frac{X_{c}\pm m_{l_{c}}}{2}\right)!\left(\frac{X_{\mu}\pm m_{l_{\mu}}}{2}\right)!\right]} \frac{(-1)^{(n_{r_{a}}+n_{r_{b}}+n_{r_{c}}+n_{r_{\mu}})}}{2^{(X_{a}+X_{b})/2}}\sum_{n_{r},m_{l}}\frac{(-1)^{m_{l}}}{\mathcal{A}!\mathcal{B}!\mathcal{C}!\mathcal{D}!}$$

$$(4.33)$$

Où l'on a noté

$$\mathcal{A} = \left(\frac{X \pm m_l}{2}\right)! \qquad \mathcal{B} = \left(\frac{X_{\mu} - X \pm (m_{l_{\mu}} - m)}{2}\right)$$
$$\mathcal{C} = \left(\frac{X_b - X \pm (m_{l_b} - m)}{2}\right) \qquad \mathcal{D} = \left(\frac{X_c - X_b + X \pm (m_{l_c} - m_b + m)}{2}\right)$$

Avec $n_{r\mu} = \frac{X_a + X_b - X_c - |m_{\mu}|}{2}$, $m_{l\mu} = m_{la} + m_{lb} - m_{lc}$ où l'on a posé $\forall i X_i = 2n_{r_i} + |m_{l_i}|$ Autrement dit pour calculer le simple produit (4.32) en un

^{2.} Un certain flou règne usuellement sur la paternité de ces transformations. L'idée séminale de cette approche provient bien des travaux de thèse d'Igal Talmi[Tal52]. Moshinsky et Brody implémentèrent ces transformations et proposèrent des tables de ces coefficients[Mos59] [BM67]. Enfin James Talman (dont la quasi homophonie avec Talmi rajoute à la confusion) a proposé une autre méthode pour obtenir ces coefficients[TL71][Tal70].

couple de point $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ il faut effectuer 4 sommes imbriquées, ce qui pourrait rapidement s'avérer très lourd numériquement. Heureusement les seuls termes contribuant à l'expression sont ceux conservant les arguments des factorielles positives ou nulles. Pour alléger le nombre d'opérations effectuées par la machine, on peut donc imposer, sur la somme la plus interne en n_r intervenant dans (4.33) les conditions

$$2n_r \ge \max(0, X_b - X_c - |m_l| + |m_l + m_{l_c} - m_{l_b}|)$$

$$2n_r \le \min(X_b - |m_l| + |m_l - m_{l_b}|, X_\mu - |m_l| + |m_l - m_{l_\mu}|)$$
(4.34)

De plus en imposant le fait que la borne supérieure de la somme sur n_r soit plus grande que sa borne inférieure, deux conditions supplémentaires apparaissent :

$$2m_{l} \geq -\min(X_{b} - m_{l_{b}}, X_{\mu} - m_{l_{\mu}}, X_{a} + m_{l_{a}} - 2m_{l_{\mu}}, X_{c} + m_{l_{c}} - 2m_{l_{b}})$$

$$2m_{l} \leq \min(X_{b} + m_{l_{b}}, X_{\mu} + m_{l_{\mu}}, X_{a} - m_{l_{a}} + 2m_{l_{c}}, X_{a} - m_{l_{a}} + 2m_{l_{\mu}})$$

(4.35)

 Axiale (1D), portant sur les polynômes de l'Hermite, où l'on veut exprimer le produit

$$\phi_{n_{z_a}}(z_1)\phi_{n_{z_b}}(z_2) = \sum_{n_{z_c}} \mathcal{M}_{n_{z_a}, n_{z_b}}^{n_{z_c}, n_{z_{mu}}} \phi_{n_{z_c}}\left(\frac{z_1 + z_2}{\sqrt{2}}\right) \phi_{n_{z_a} + n_{z_b} - n_{z_c}}\left(\frac{z_1 - z_2}{\sqrt{2}}\right)$$
(4.36)

Où le coefficient de Talmi axial s'exprime

$$\mathcal{M}_{n_{z_a}, n_{z_b}}^{n_{z_c}, n_{z_{mu}}} = \sqrt{\left[\frac{n_{z_a}! n_{z_b}! n_{z_c}! n_{z_{\mu}}!}{2^{n_{z_a} + n_{z_b}}}\right]} \sum_{n_z} \frac{(1)^{n_z}}{n_z! (n_{z_b} - n_z)! (n_{z_{\mu}} - n_z)! (n_{z_c} - n_{z_b} + n_z)!}$$
(4.37)

Où l'on a posé $n_{z_{\mu}} = n_{z_a} + n_{z_b} - n_{z_c}$. Pour assurer la positivité ou la nullité des arguments des factorielles, la somme sur n_z dans (4.37) est contrainte aux seules valeurs

$$\max(0, n_{z_b} - n_{z_c}) \le n_z \le \min(n_{z_b}, n_{z_{\mu}}) \tag{4.38}$$

Muni de ces transformations nous pouvons à présent et pour la première fois dans un cadre relativiste, exprimer tous produits de deux états propres de l'oscillateur harmonique en symétrie axiale dans le référentiel du centre de masse. De plus en implémentant correctement ce calcul on peut fortement limiter le nombre de termes inutilement calculés en ne conservant que les bornes précédemment indiquées. Cependant il est important de noter un *caveat* majeur; la partie radiale de la fonction d'onde étant définie comme une suite de polynôme définis dans $L^2(\mathbb{R}^+)$, il faut par conséquent faire attention lorsque l'on passe dans le référentiel du centre de masse, à ne conserver que les configurations où l'on a simultanément \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 définis positifs. Il faut donc contraindre la transformation de Talmi à n'être calculée que sur \mathbb{R}^+ pour s'assurer de sa bijectivité, sous peine de voir apparaître des symétries artificielles induites par une extension arbitraire de l'ensemble de définitions des fonctions d'ondes radiales, ce qui est illustré en Figure 4.6. En pratique nous avons imposé dans notre implémentation la vérification des égalités (4.32) et (4.36) en tant que tests unitaires, afin de s'assurer de leur fiabilité. On peut représenter en Figures 4.7 et 4.8 quelques produits des parties axiales et radiales d'états propres de l'oscillateur harmonique pour différentes combinaisons de nombres quantiques. Sur ces figures on note les propriétés de symétrie et de parité propres à l'oscillateur harmonique. En particulier en Figure 4.7 on constate que la parité de $n_{z_1} + n_{z_2}$ assure bien la symétrie sous l'échange z_1, z_2 ce qui correspond bien au comportement attendu [Tal70]. D'un point de vue



FIGURE 4.6 – Illustration de l'apparition d'une symétrie artificielle sur le produits de deux fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique (à droite). Même produit de fonction d'ondes en restreignant la transformation à \mathbb{R}^+ (à gauche), la symétrie en $r_1 = r_2$ disparaît.

numérique, le calcul des transformations est effectué une seule fois et parallèlement pour toutes les combinaisons possibles de nombres quantiques puis stockés binairement, ce qui permet de diminuer drastiquement le temps de calcul nécessaire. Cette opération prend toutefois une trentaine de minutes pour une base à 12 couches d'oscillateurs sur une architecture *quad-core* où l'on active le *multithreading*. Ces dérivations dans le cadre d'un système axial sont trivialement étendues au cas triaxial, la fonction d'onde du système étant le produit de trois fonctions d'oscillateurs harmoniques à une dimension. Pour exprimer un produit de fonctions d'ondes dans cette base il suffit de calculer le produit de trois coefficients (4.37) selon chaque axe du système, ce qui augmentera considérablement le temps de calcul nécessaire. Maintenant que nous sommes à même de transposer l'expression d'une fonction d'ondes à deux corps dans les coordonnées du centre de masse, nous pouvons nous tourner vers l'étude détaillée du tenseur d'appariement à deux corps.

4.2.3 Propriétés spatiales du tenseur d'appariement

Pour être à même d'étudier spécifiquement la distribution des corrélations d'appariement, on s'affranchit de la déformation et dans cette section on étudiera spécifiquement des systèmes sphériques. On se focalise de plus pour décorréler l'appariement entres fermions de natures différentes, sur des noyaux où seul l'appariement neutron-neutron est présent. Nous avons fait le choix d'étudier le Nickel 66, L'Étain 124 et le Plomb 200, l'appariement neutronique étant relativement fort dans les états fondamentaux de ces trois noyaux (de l'ordre de la dizaine de MeV). En appliquant les transformations de Talmi, on peut à présent étudier les configurations non-locales du tenseur d'appariement, ce qui correspond à des valeurs $\mathbf{r}_1 \neq \mathbf{r}_2$. On peut représenter en Figures (4.9),(4.10) et (4.11), pour chacun de ces noyaux, les densités, partie locale du tenseur d'appariement et la partie non-locale de ce tenseur dans le repère du centre de masse des paires de nucléons.



FIGURE 4.7 – Produits des fonctions d'ondes l'oscillateur harmonique axial en projection selon l'axe Oz prise en $r_1 = r_2 = 0$, en abscisse la coordonnée du centre de masse Z en ordonnée la coordonnée relative z. Les valeurs des nombres quantiques n_{z_1} , n_{z_2} sont indiquées pour chaque configuration.



FIGURE 4.8 – Produits des fonctions d'ondes l'oscillateur harmonique axial en projection selon l'axe Or prise en $z_1 = z_2 = 0$, en abscisse la coordonnée du centre de masse R en ordonnée la coordonnée relative r. Les valeurs des nombres quantiques n_{r_1} , n_{r_2} ainsi que les différentes projections du moment angulaire associées m_{l_1} , m_{l_2} sont indiquées pour chaque configuration.



FIGURE 4.9 – ⁶⁶Ni : Densité à 1-corps et en vis-à-vis la partie locale du tenseur d'appariement (à gauche), Partie non locale de $|\kappa(R, r)|^2$ dans le système de coordonnées relatives **r** et du centre de masse **R** de la paire (à droite).



FIGURE 4.10 – ¹²⁴Sn : Densité à 1-corps et en vis-à-vis la partie locale du tenseur d'appariement (à gauche), Partie non locale de $|\kappa(R, r)|^2$ dans le système du centre de masse **R** et relatives **r** de la paire (à droite).



FIGURE 4.11 – ²⁰⁰Pb : Densité à 1-corps et en vis-à-vis la partie locale du tenseur d'appariement (à gauche), Partie non locale de $|\kappa(R, r)|^2$ dans le système du centre de masse **R** et relatives **r** de la paire (à droite).

Dans le cadre d'une approche de type *RHB*, on note que les corrélations à deuxcorps se manifestent majoritairement pour des faibles distances relatives entre les neutrons d'une paire ($\mathbf{r} = \mathbf{0}$) ce qui confirme les études réalisées dans le cadre d'approche non-relativiste[CIMV84][PSSB10]. On note également que les paires composées de nucléons proches et donc les plus petites, semblent êtres principalement localisées en surface des noyaux. Pour étudier plus précisément cet aspect et être en mesure de quantifier la "taille" d'une paire il est intéressant d'introduire la longueur de cohérence associée au tenseur d'appariement. Cette longueur permet de quantifier l'extension d'une paires de nucléons en fonction de la position de son centre de masse. Une manière possible de la définir[PSSB10],[PSS07] peut s'écrire

$$\xi(\mathbf{R}) = \left(\frac{\int d\mathbf{r} \, \mathbf{r}^2 |\kappa(\mathbf{R}, \mathbf{r})|^2}{\int d\mathbf{r} |\kappa(\mathbf{R}, \mathbf{r})|^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(4.39)

Ici on a choisi comme dénominateur le facteur de normalisation usuel pour un opérateur à deux-corps. Ainsi pour une paire dont le centre de masse est localisé en **R**, la quantité $\xi(\mathbf{R})$ donne un ordre de grandeur de la taille de la paire. De surcroît, si l'on intègre (4.39) sur la coordonnée relative **r** on obtiendra la longueur de cohérence moyenne des paires présentes dans le noyau. On peut représenter en Figure 4.12 l'évolution de cette longueur de cohérence pour les trois noyaux précédemment évoqués.



FIGURE 4.12 – A gauche, Longueur de cohérence associée au tenseur d'appariement dans le cadre d'une approche de type *RHB* pour le ⁶⁶Ni, ¹²⁴Sn et ²⁰⁰Pb. A droite, le numérateur et le dénominateur de (4.39) sont représentés.

Sur cette dernière figure le fait le plus marquant, est que pour les trois noyaux, la longueur de cohérence issue du tenseur d'appariement neutron-neutron, est de l'ordre de deux fois le rayon de la distribution neutronique dans le noyau. Cette longueur diminue ensuite rapidement pour atteindre un minimum au delà de la surface du noyau. Ces minima apparaissent comme conséquences des pentes différentes entre numérateur et dénominateur de (4.39), le dénominateur décroissant plus vite au delà de la surface du noyau. De l'étude de cette première variable, on peut conclure que dans le cadre d'une théorie RHB que les paires dont les nucléons sont les plus proches l'un de l'autre, se situent principalement en surface du noyau. Toutefois comme exposé en Chapitre 2, la seule approche de Bogolioubov ne saurait suffire à une description fidèle des propriétés nucléaires. Comme nous l'avons vu, la symétrie de jauge brisée pour capturer les corrélations d'appariement n'est pas restaurée à ce niveau, ce qui peut s'avérer préjudiciable pour l'étude précise des paires de neutrons. De plus d'un point de vue formel, une approche de type PBCS, permet de faire varier continuement l'énergie d'appariement en fonction de l'intensité de l'interaction dans le canal particule-particule. En effet dans le cadre d'une théorie de type Bogolioubov, comme nous l'avons vu, la transition entre phases non-superfluide et superfluide est discontinue. Autrement dit l'appariement ne s'enclenche qu'au dessus d'une certaine valeur

| Nuclei | E(MeV) | | | r _n (fm) | | E _{pair} (MeV)) | |
|-------------------|--------|----------|---------|---------------------|----------|--------------------------|----------|
| | RHB | RMF+PBCS | Exp | RHB | RMF+PBCS | RHB | RMF+PBCS |
| ⁶⁶ Ni | 575.6 | 576.9 | 576.81 | 3.92 | 3.89 | 5.14 | 6.21 |
| 124 Sn | 1048.7 | 1050.2 | 1049.96 | 4.81 | 4.77 | 8.9 | 11.5 |
| ²⁰⁰ Pb | 1574.7 | 1578.2 | 1576.37 | 5.56 | 5.42 | 13.4 | 15.7 |

TABLEAU 4.2 – Énergie de l'état fondamental (*E*), rayon *rms* de la distribution neutronique (r_n) et énergie d'appariement (E_{pair}) calculés au niveau des approximations *RHB* et *RMF*+*PBCS*. La colonne notée "Exp" indique les valeurs expérimentales des énergies des états fondamentaux de chacun des noyaux[WAK⁺17].

critique de intensité de l'interaction. Par contre dans le formalisme PBCS proposé, nous pouvons profiter de cet avantage pour étudier plus finement la transition d'un état non-superfluide à un état superfluide conservant le nombre total de particules du système. Nous avons donc, toujours dans une approche relativiste, étendu notre formalisme en réalisant la projection sur le bon nombre de particule dans le cadre de l'approximation *PBCS*.

4.2.4 Impact de la restauration du nombre de particules

Pour pouvoir comparer strictement les résultats issus des deux approches, nous conserverons la même interaction dans le canal d'appariement ainsi que les mêmes paramètres au niveau du champ moyen. Les calculs ont été effectués en utilisant la paramétrisation DD-ME2 dans une base à 13 couches d'oscillateur. De plus l'ensemble des calculs sont effectués de manière totalement auto-cohérente en utilisant les relations de récurrence dérivées au Chapitre 2. On obtient ainsi le premier code relativiste avec des interactions de portée finies séparables reproduisant l'interaction de Gogny, où le nombre de particules est correctement restauré. Rappelons brièvement que cette fois, nous postulons comme état de référence, l'état *PBCS* qui conserve le nombre de particules du système que l'on notera N, selon

$$|\mathbf{PBCS}(N)\rangle = \left(\Gamma^{\dagger}\right)^{N/2}|0\rangle \tag{4.40}$$

Où l'opérateur création de paires corrélées s'exprime

$$\Gamma^{\dagger} = \sum_{k} y_k a_k^{\dagger} a_{\bar{k}}^{\dagger} \tag{4.41}$$

Où les amplitudes de mélanges $y_k = \frac{v_k}{u_k}$ s'obtiennent par minimisation de $\langle PBCS | H | PBCS \rangle$ tout en imposant la normalisation des états PBCS. On peut à ce niveau comparer quelques observables dans les formalismes *RHB* et *RMF*+*PBCS*

Tout d'abord au niveau de l'énergie de l'état fondamental on se rend compte dans la table 4.2, que pour ces noyaux sphériques on reproduit très bien l'énergie expérimentale, particulièrement lorsque l'on restaure le nombre de particules. La quantité équivalente au tenseur d'appariement de Bogolioubov dans le cas *PBCS* peut formellement s'écrire

$$\kappa(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)^{(\text{PBCS})} \equiv \langle \text{PBCS}(\mathbf{N}) | \psi(\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1) | PBCS(N-2) \rangle$$
(4.42)

Cette relation traduit bien le lien entre tenseur d'appariement et la probabilité de transfert de deux particules depuis l'état initial à N particules. En utilisant le même formalisme que dans le cas *RHB* on peut étudier la partie-non locale de (4.42) dans le référentiel du centre de masse des paires en Figure (4.13). De même on peut dé-

CHAPITRE 4. CORRÉLATIONS À 2 ET 4 CORPS : IMPACT SUR LA STRUCTURE NUCLÉAIRE



FIGURE 4.13 – Partie non locale de tenseurs d'appariements dans le cadre d'une approche de type RMF+PBCS pour le ⁶⁶Ni (a'), ¹²⁴Sn (b') et ²⁰⁰Pb (c')

finir la longueur de cohérence associée au tenseur d'appariement après restauration de symétrie par exacte analogie avec (4.39) que l'on représente en Figure 4.14. Qualitativement les tenseurs d'appariement (4.42) et (4.25) présentent le même type de comportement les corrélations d'appariement agissent principalement pour des nucléons proches l'un de l'autre. Toutefois, par rapport à l'approche *RHB* la restauration de la symétrie U(1) tend à augmenter l'intensité des corrélations au centre des noyaux. Pour être plus précis on peut étudier plus en détail ce tenseur en regardant l'évolution de la taille d'une paire pour des valeurs de **R** fixées. Ainsi en Figure 4.15, on note qu'au centre du noyau pour **R** = 1.0 fm le tenseur d'appariement présente un comportement oscillant. Ceci s'explique par la superposition de plusieurs fonctions d'ondes nucléoniques présentant différents nombres de nœuds pour cette valeur de **R**. Au delà de la surface du noyau, pour une valeur de **R** qui correspond au minimum des longueurs de cohérences (4.39) et (4.14) (valeur que l'on note **R** = $r_{\min(\kappa)}$), le tenseur d'appariement ne présente plus d'oscillations et tend à s'annuler pour des valeurs **r** > 4 fm.



FIGURE 4.14 – A gauche, Longueur de cohérence associée au tenseur d'appariement dans le cadre d'une approche de type RMF+PBCS pour le ⁶⁶Ni, ¹²⁴Sn et ²⁰⁰Pb. A droite, le numérateur et le dénominateur de (4.39) sont représentés.



FIGURE 4.15 – Comparaison des approches RMF+PBCS et RHB sur l'évolution du tenseur d'appariement en fonction de la coordonnée relative pour trois valeurs de la coordonnée du centre de masse, $\mathbf{R} = 1.0$ fm (à droite), $\mathbf{R} = r_n$ (au centre) et $\mathbf{R} = r_{\min(\kappa)}$ (à gauche). Pour les noyaux ⁶⁶Ni (a'), ¹²⁴Sn (b') et ²⁰⁰Pb (c').



FIGURE 4.16 – Longueurs de cohérence calculées dans le cadre de l'approche *RMF+PBCS* pour l'¹²⁰Sn, pour différentes valeurs de l'intensité d'appariement, dont les éléments de matrices sont multipliés par le facteur d'échelle α . L'énergie d'appariement pour chaque valeur de ce paramètre sont également présentés.

On peut également noter qu'en Figure 4.15 pour le ¹²⁴Sn et le ²⁰⁰Pb, que les corrélations d'appariement de faible extension sont plus intenses en RMF+PBCS que dans le cas RHB. On peut expliquer cette différence par le fait que dans le cadre d'une approche projective, les probabilités d'occupation des états proches du niveau de Fermi, (dans ce cas les niveau $1h_{11/2}$ et $1i_{3/2}$) augmentent par rapport au cas HFB. Ces états ne présentant pas de nœud dans la direction radiale et confinent plus fortement les nucléons aux faibles distances relatives. Dans le cadre d'une approche RMF+PBCS, il est intéressant d'étudier l'évolution de la longueur de cohérence en fonction de l'intensité de l'interaction d'appariement. L'impact de la réduction de l'intensité est représentée en Figure 4.16 pour l'étain 120. L'allure de la longueur de cohérence associée au tenseur d'appariement varie pour une large plage de l'intensité de l'interaction. Toutefois à partir d'un facteur $\alpha = 0.04$ (α étant le facteur de scaling de l'interaction d'appariement) la longueur de cohérence commence à augmenter jusqu'à ce que l'on atteigne la limite *RMF* où l'appariement est quasi-nul. Pour mieux comprendre ces résultats on peut analyser la manière dont les états des couches principales contribuent à la longueur de cohérence. Chaque état i contribue d'un facteur $\kappa_i \equiv \langle \text{PBCS}(N) | c_i c_i | PBCS(N-2) \rangle$. Ce facteur correspond, à un facteur de normalisation près, au produit des coefficients variationnels $u_i v_i$, où v_i correspond à la probabilité d'occupation de l'état *i* issu d'un calcul *PBCS*, et $u_i^2 = 1 - v_i^2$. En Figure 4.17 est représentée l'évolution du facteur $u_i v_i$ pour les mêmes intensités de l'interaction d'appariement qu'en Figure 4.16. On note ainsi, que dans la limite RMF la longueur de cohérence est construite par la fonction d'onde de la couche $2d_{3/2}$. Cet état étant totalement occupé dans la limite d'appariement nul, la longueur de cohérence dans la limite *RMF* représente les corrélations spatiales induites par les propriétés spatiales de l'état $2d_{3/2}$ et n'est donc pas relié à l'appariement. L'impact de l'appariement sur



FIGURE 4.17 – Evolution de la quantité $u_i v_i$ pour les états des couches majeures de particules individuelles pour le ¹²⁰Sn.

la longueur de cohérence est le résultat du mélange de plusieurs orbitales, mélange pondéré par le facteur $u_i v_i$. Dans notre cas quand l'appariement devient suffisamment fort, les premiers niveaux commençant à contribuer sont les états $2d_{3/2}$ et $3s_{1/2}$ comme on le voit en Figure 4.17 (hexagones gris). Ce mélange a un effet majeur sur la longueur de cohérence, les états contribuants ayant des propriétés de localisation spatiale très différentes les uns des autres et que le coefficient de mélange évolue en fonction de l'intensité de l'interaction. Ensuite lorsque l'on augmente encore l'intensité de l'appariement, les trois autres états $(1h_{11/2}, 2d_{5/2}$ et $1g_{7/2})$ composant la couche majeure commencent également à présenter une contribution conséquente au mélange. Comme ces états présentent d'importantes dégénérescences, leur contribution à la longueur de cohérence devient rapidement prépondérante. Ensuite comme on peut le voir en Figure 4.16, l'intensité de l'appariement n'affecte quasiment plus la longueur de cohérence une fois que ces trois états commencent à contribuer au mélange. En effet les facteurs $u_i v_i$ associés à ces trois états évoluent de la même manière lors de l'augmentation de l'intensité d'appariement. En conséquence le facteur de normalisation au dénominateur de (4.14) masque l'augmentation de la contribution de ces trois états, ce qui justifie la similarité de la longueur de cohérence lorsque l'on augmente suffisamment l'intensité des corrélations d'appariement. Pour conclure cette étude on peut quantifier l'influence des seules corrélations d'appariement sur la longueur de cohérence en comparant les longueurs de cohérences obtenues d'une part pour un calcul où l'on reproduit l'énergie expérimentale ($\alpha = 1$) et d'autre part pour la limite RMF ($\alpha = 0.005$). L'appariement agit aussi bien sur les corrélations au centre du noyau qu'au niveau de la surface nucléaire. Au centre du noyau on passe d'une longueur de cohérence valant 6.5 fm sans appariement à 4.5 fm tandis que le minimum de la longueur de cohérence passe de 3.3 fm à 2.6 fm. La longueur de cohérence permet donc bien de distinguer l'effet inhérent à la taille finie du système (mesuré dans la limite *RMF*) et l'effet de l'appariement. Il est intéressant de comparer nos résultats obtenus dans un cadre relativiste avec les précédentes études, toutes établies dans un cadre non-relativiste [PSSB10]. De prime abord, les longueurs de cohérence ne différent pas pour la plupart des noyaux. Toutefois par exemple pour le ⁸⁴Ni, l'approche non-relativiste prédit une longueur de cohérence bien plus grande que pour le Nickel 66, ce qui n'est pas le cas dans un cadre relativiste comme on peut le voir en Figure 4.18. Cette différence s'explique aisément, par le fait que le



FIGURE 4.18 – Longueur de cohérence associée au tenseur d'appariement dans une approche *RHB* pour le ⁸⁴Ni (à gauche). Longueurs de cohérences associées aux isotopes du Nickel dans le cadre d'une approche Bogolioubov non relativiste (à droite Figure issue de [PSS07]).

spin-orbite ne contribue pas de la même façon pour les champs moyens relativistes et non relativistes. Cette différence se ressent principalement pour des noyaux proches des *drip-lines* neutrons, et qui présentent des états de bas moments angulaires au voisinage du niveau de Fermi. C'est notamment le cas pour le Nickel 84 ce qui génère cette écart. Plus précisément l'état $3s_{1/2}$ est bien plus lié dans une approche relativiste que dans une approche non-covariante et en conséquence contribue davantage à la longueur de cohérence dans le cas non-relativiste. L'approche relativiste couplée à la restauration du nombre de particules permet de traiter l'ensemble des noyaux y compris ceux particulièrement riches en neutrons et de proposer ainsi une théorie plus universelle que les autres modèles étudiés par le passé. Une fois décrite la localisation des corrélations d'appariement au travers de l'étude du tenseur d'appariement, on peut s'interroger quant à la nature physique des paires de nucléons.

4.2.5 Paires de Cooper nucléoniques

Dans le cadre de l'étude des systèmes électroniques, les degrés de libertés fondamentaux associés aux théories de type BCS sont les paires de Cooper, formées de deux électrons appariés[Coo56]. Ces paires sont de nature quasi-bosonique, au sens où elles satisfont en moyenne à des relations de commutations bosoniques. C'est cette nature qui permet aux paires de s'affranchir du principe d'exclusion de Pauli et donc de faire passer le système dans une phase superfluide, voir de former un condensat (de type Bose-Einstein). Aussi si l'on veut étudier la transition de phase quantique entre la phase superfluide de type *BCS* et un éventuel régime condensé *BEC* (*Bose-Einstein-Condensate*) les paires de Cooper sont les objets à considérer[OD05]. Pour étudier leur structure on peut revenir un instant sur la représentation coordonnée des états de type *BCS* ou *PBCS*. Comme vu en chapitre 2 on peut toujours réexprimer les états fondamentaux de ces théories comme fonction des opérateurs de paires corrélées Γ^{\dagger} , dans le cas Bogolioubov ou *BCS* :

$$|\mathbf{BCS}\rangle = \prod_{k} \left(u_{k} + v_{k} a_{k}^{\dagger} a_{\bar{k}}^{\dagger} \right) |0\rangle \propto \sum_{n} \frac{(\Gamma^{\dagger})^{n}}{n!} |0\rangle \quad \text{Où} \quad \Gamma^{\dagger} = \sum_{k} \frac{v_{k}}{u_{k}} a_{k}^{\dagger} a_{\bar{k}}^{\dagger} \quad (4.43)$$

De même dans le cas PBCS

$$|\text{PBCS}(\mathbf{N})\rangle = \left(\Gamma^{\dagger}\right)^{N/2}|0\rangle \quad \text{Ou} \quad \Gamma^{\dagger} = \sum_{k} y_{k} a_{k}^{\dagger} a_{\bar{k}}^{\dagger}$$
(4.44)

Où y_k est déterminé variationellement lors de la procédure itérative. En toute généralité on peut écrire ces état produits des paires corrélées en représentation coordonnée sous la forme

$$\Phi_{\text{PBCS}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) = \mathcal{A}\left[\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\phi(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)...\phi(\mathbf{r}_{N-1}\mathbf{r}_N)\right)$$
(4.45)

Cette fois $\phi(x, x')$ désigne la fonction d'onde à deux corps correspondant à une paire de Cooper. Cette fonction peut s'exprimer

$$\phi(x, x') = \begin{cases} \sum_{k} \frac{u_k}{v_k} f_k(x) f_{\bar{k}}(x') & \text{Dans le cas BCS} \\ \sum_{k} y_k f_k(x) f_{\bar{k}}(x') & \text{Dans le cas PBCS} \end{cases}$$
(4.46)

Cette fonction d'onde (4.46) décrivant une paire de Cooper, possède une signification physique différente que le tenseur d'appariement κ discuté précédemment. Comme nous l'avons vu, le tenseur est relié à l'amplitude de probabilité de transfert de paires et peut par conséquent être considéré comme une observable et mesuré expérimentalement lors de réactions de transfert de deux nucléons. La paire de Cooper (4.46) ne peut être reliée à une observable mais permet de caractériser le régime de couplage des paires dans le noyau. De fait, si l'extension spatiale de la fonction d'onde décrivant la paire de Cooper est plus grande que la distance moyenne inter-nucléonique le système est dans le régime de couplage faible, autrement dit le régime BCS. A contrario si la paire de Cooper est plus petite que la distance moyenne entre les nucléons le système est dans un régime de couplage fort, et présente une phase condensée de type Bose-Einstein (BEC). D'un point de vue formel il est intéressant de noter que dans la limite BEC la fonction d'onde de Cooper prend la même forme que le tenseur d'appariement[OD05]. Pour quantifier l'extension spatiale de cette fonction d'onde, on fait appel aux mêmes outils que pour l'étude du tenseur d'appariement et on peut définir une nouvelle longueur de cohérence, ξ_C calculée cette fois à partir de la fonction d'onde (4.46):

$$\xi_C(\mathbf{R}) = \left(\frac{\int d\mathbf{r} \, \mathbf{r}^2 |\phi(\mathbf{R}, \mathbf{r})|^2}{\int d\mathbf{r} |\phi(\mathbf{R}, \mathbf{r})|^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(4.47)

Cette longueur de cohérence peut être représentée dans le cas *RHB* et *RMF+PBCS* en Figure 4.19. On remarque que ces longueurs de cohérences ont une allure similaire à celles associées au tenseur d'appariement (Figures 4.12 et 4.14) en particulier dans le cas où l'on a restauré le nombre de particules. Ces similitudes s'expliquent du fait que les deux quantités mesurent les corrélations entre nucléons de spin corrélés. Il faut toutefois garder à l'esprit que le tenseur d'appariement encode l'information concernant les corrélations entre n'importe quelle paire de nucléons tandis que la fonction d'onde de Cooper prend en compte les seules corrélations entre neutrons au sein d'une même paire de Cooper. De même on peut également comparer les



FIGURE 4.19 – A gauche, Longueur de cohérence associée à la fonction d'onde de Cooper dans le cadre d'une approche de type *RHB* (en haut) et dans une approche *RMF*+*PBCS* (en bas) pour le ⁶⁶Ni, ¹²⁴Sn et ²⁰⁰Pb. A droite, les numérateurs et les dénominateurs de (4.47) sont représentés.

longueurs de cohérences moyennes pour le tenseur d'appariement et les paires de Cooper ainsi que la distance moyenne inter-nucléons dans le tableau 4.3.

| Nuclei | | $<\xi>$ | | $\langle d_n \rangle$ | |
|-------------------|------|----------|------|-----------------------|------|
| | RHB | RMF+PBCS | RHB | RMF+PBCS | |
| ⁶⁶ Ni | 4.05 | 4.49 | 3.90 | 4.35 | 1.86 |
| 124 Sn | 4.85 | 5.69 | 4.48 | 5.16 | 1.84 |
| ²⁰⁰ Pb | 6.81 | 7.31 | 6.33 | 6.83 | 1.82 |

TABLEAU 4.3 – Longueurs de cohérences moyennes pour le tenseur d'appariement et la fonction d'onde de Cooper. $\langle d_n \rangle$ est la distance moyenne entre neutrons du noyau.

La distance moyenne entre nucléons est estimée à partir de la densité de neutrons ρ_n du noyau.

$$\langle d_n \rangle = \frac{1}{\rho_n^{1/3}} \quad \text{Ou} \quad \rho_n = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi r_n^3}$$
(4.48)

où les rayons *rms* neutroniques r_n sont ceux présentés dans la table 4.2. Il est particulièrement intéressant de remarquer les longueurs de cohérence moyennes sont plus petites que la taille (le diamètre) du noyau. Toutefois ces longueurs de cohérences moyennées restent plus grandes que la distance moyenne entre les neutrons du système, ce qui correspond bien au fait que les paires au sein de noyaux sont dans un régime BCS [STM10] [BZ13]. On peut préciser ce constat en affinant la comparaison entre la taille des paires et la distance entre nucléons, en calculant le paramètre

$$\chi = \frac{\xi_C(\mathbf{R})}{d_n(\mathbf{R})} \tag{4.49}$$

Où $d_n(\mathbf{R}) = \frac{1}{\rho_n(\mathbf{R})^{1/3}}$ est la distance entre nucléons calculée pour chaque valeur de la coordonnée du centre de masse. On peut représenter ce ratio en Figure 4.20.



FIGURE 4.20 – Évolution du ratio (4.49) entre la longueur de cohérence associée à la paire de Cooper et la distance entre neutrons pour le ⁶⁶Ni, dans le cadre *RHB* (en rouge) et dans l'approche *RMF*+*PBCS* (en vert).

Sur cette figure on remarque bien que pour $R = r_n$ (donc à la surface de la distribution de neutrons) la longueur de cohérence est plus grande que la distance entre les neutrons. On reste donc dans un régime BCS, toutefois lorsque la longueur de cohérence est minimale (vers 4.5 fm) on tend à se rapprocher d'un état condensé sans pour autant l'atteindre, la densité neutronique étant très faible au delà 4.4 fm. Cependant si l'on augmente artificiellement le rayon du noyau, on pourrait forcer notre système à N-corps à basculer dans un régime de type BEC.

4.2.6 Conclusions

Dans cette partie, nous avons présenté le formalisme nécessaire à l'étude des corrélations à 2-corps de type particule-particule dans le cadre d'une approche relativiste. Différentes longueurs de cohérences ont été présentées pour étudier les parties non locales des tenseurs d'appariement ainsi que les fonctions d'ondes représentant les paires de Cooper. L'impact de la restauration de symétrie a également pu être étudiée, ainsi que l'évolution des longueurs de cohérence lorsque l'on change l'intensité de l'interaction dans le canal particule-particule. Enfin l'étude des fonctions d'ondes de Cooper permet de conclure quant à l'absence de phase condensée au sein du noyau[LEKS18]. Comme nous l'avons vu, l'appariement, aussi bien avant ou après restauration du nombre de particules, tend à amplifier le comportement collectif du noyau et à faire disparaître les sous-structures liées ainsi que les traces de la déformation. Néanmoins en étudiant la partie locale du tenseur d'appariement on peut noter que les corrélations semblent se localiser dans les zones de densités les plus fortes et donc au niveau des clusters. Or comme discuté au chapitre précédent, on peut raisonnablement supposer que les clusters correspondent à des particules α préformées dans le milieu. Les particules α étant composées de 4 particules (deux neutrons et deux protons), il est possible qu'une description à deux corps des corrélations dans le canal particule-particule ne suffisent pas et qu'il faille étendre le formalisme pour prendre en compte des corrélations à 4 corps.



FIGURE 4.21 – Schéma de la composition d'un quartet décrit par (4.50) en rouge les protons, en noir les neutrons, la projection du spin est indiquée par l'orientation de la flèche.

4.3 Corrélations à 4 corps

4.3.1 Modèles de quartets

Dans cette dernière partie, nous portons notre intérêt sur la construction, l'implémentation et l'impact d'un modèle spécifique de corrélations à 4-corps, les quartets. Ici nous nous intéresserons au modèle *QCM* (*Quartet Condensation Model*) [SS15][SS17][SS13][Nég13] présenté formellement en Chapitre 2. Rappelons brièvement que l'état fondamental de ce condensat de quartet s'exprime

$$|\Phi_{\text{Quartet}}\rangle = \mathcal{Q}|0\rangle = \left(2\Gamma_{1}^{\dagger}\Gamma_{-1}^{\dagger} - \Gamma_{0}^{\dagger 2}\right)^{N_{q}}|0\rangle$$
(4.50)

Où les $\{\Gamma_1^{\dagger}, \Gamma_{-1}^{\dagger}, \Gamma_0^{\dagger}\}$ correspondent respectivement aux opérateurs créations de paires collectives neutrons-neutrons, protons-protons et protons-neutrons, s'exprimant génériquement comme :

$$\Gamma_t^{\dagger} = \sum_k x_k P_{k,t}^{\dagger}, \qquad (4.51)$$

avec P^{\dagger} les opérateurs de créations de paires indépendantes $P_k^{\dagger} = [a_k^{\dagger} a_{\bar{k}}^{\dagger}]^{J=0}$. Résoudre les équations QCM revient à déterminer variationellement les x_k paramètres de mélange associés aux corrélations de quartets la somme dans (4.51) parcourant tous les états pouvant contribuer au quartet. Ces paramètres s'obtiennent par minimisation de la valeur moyenne du Hamiltonien de l'interaction de quartet. Cette valeur est elle-même obtenue au moyen de relations de récurrences analogues à celle des approches PBCS discutées en Chapitre 2. On retrouve en annexe E, l'expression de certaines de ces relations. L'obtention des paramètres de mélange permettent ensuite d'obtenir des jeux de coefficients d'occupations des états qui contribuent au quartets. Cette approche permet simultanément de conserver le nombre de particules à l'instar d'une technique PBCS et de traiter sur un pied d'égalité les corrélations entre particule de même isospin, ou d'isospin différent. Cette dernière propriété est particulièrement importante lorsque l'on s'attache à décrire les propriétés des noyaux N = Z[FM14] ou encore lorsque l'on cherche à comprendre l'influence des corrélations sur la préformation de particules alpha dans les noyaux. Ici nous nous attacherons à la description de quartets isovecteurs, la contribution isoscalaire étant bien plus faible[KH04]. Schématiquement on peut représenter une configuration possible d'un quartet en terme des degrés de liberté nucléoniques en Figure 4.21. Nous proposons ici deux implémentations du QCM dans un cadre de champ-moyen relativiste. Tout d'abord on obtient dans une base d'oscillateur harmonique un jeu de k fonctions d'ondes nucléoniques et les nombres d'occupations v_k^2 associés. Dans une approche *RMF* on distingue les états occupés $v_k^2 = 1$ des autres $v_k^2 = 0$. On distingue alors un cœur dont les états resteront totalement occupés et une fenêtre de valence, composée des états les moins liés. On applique aux états contenus dans cette fenêtre, notre algorithme QCM qui génère un nouveau jeu de facteurs d'occupation, fractionnaires cette fois. La première approche consiste à geler la configuration du champ-moyen après convergence et à n'appliquer qu'une seule fois la procédure QCM : on désignera cette approche par $RMF \oplus QCM$. Elle a l'avantage d'être très économique numériquement et donne une bonne idée de l'influence des corrélations de quartets sur la structure. Toutefois, elle reste artificielle au sens où les corrélations ne sont pas répercutées sur les fonctions d'ondes nucléoniques de manière auto-cohérente. La seconde approche permet de corriger cette approximation : après quelques itérations RMF servant à initialiser le champ-moyen, on applique l'algorithme QCM, puis on modifie les fonctions d'ondes nucléoniques en prenant en compte les nombres d'occupations, que l'on réinjecte dans les équations Hartree relativistes. On itère alors cette procédure jusqu'à convergence totale des équations RMF+QCM. De cette manière les corrélations à 4-corps sont prises en compte : l'état final n'est plus un pur déterminant de Slater mais un mélange de configurations, conservant le bon nombre de particules. Néanmoins le coût numérique de cette approche augmente considérablement avec le nombre de quartets que l'on considère et l'on est dans certains cas contraint à se limiter à la première méthode.

4.3.2 Coût numérique et optimisations

Le temps de calcul associé à la procédure QCM que nous utilisons dépend principalement du nombre de paramètres variationnels x_k (autrement dit du nombre d'états de la fenêtre de valence) ainsi que du nombre de quartets considérés, qui augmente le nombre de relations de récurrences à résoudre pour calculer la valeur moyenne du Hamiltonien de quartet. Cette étape de résolution d'équations de récurrences indépendantes est entièrement parallélisée en pratique seule la minimisation reste numériquement coûteuse. Pour donner une idée des temps de calcul on peut quantifier la durée d'exécution de la procédure QCM. Ainsi sur une architecture 8 cœurs, une itération QCM prend 10 secondes pour un quartet, 90 secondes pour deux quartets et environ 20 minutes pour trois quartets. Les choses se complexifient lorsque l'on veut obtenir une réalisation totalement auto-cohérente, c'est à dire qu'a chaque itération de champ-moyen on fait appel à la routine de quartets. Ainsi, pour un cas aussi simple que l'étude du Néon 20 dans un cadre octupolaire et pour une base à 8 couches d'oscillateur, on passe d'environ 1.02 minutes d'exécution dans le cas RMF à 24.6 minutes pour RMF+QCM. Cette augmentation du temps de calcul s'explique notamment par la complexification du chemin de convergence. En effet la méthode de résolution des équations de quartets, repose sur une minimisation qui est particulièrement sensible aux valeurs initiales supposées des paramètres de mélanges x_k . Aussi pour chaque nouvelle itération de champ-moyen il faut optimiser les valeurs de départ de l'étape QCM. La méthode naïve, consiste à prendre pour la n-ième itération, les valeurs obtenues pour la n-1 ième. Toutefois cette méthode s'avère dangereuse dans le cas où l'on couple l'approche variationnelle associée au champ-moyen avec une deuxième approche variationnelle pour le quartet. En effet lors du processus d'exploration de l'espace des solutions, la convergence des équations RMF n'étant pas nécessairement monotone, il est possible que la n-ième itération de champ-moyen soit plus éloignée du minimum global que la n-1 ième. Ainsi les coefficients de mélanges obtenue à l'issu de la n-ième itération peuvent induire une bifurcation vers un autre point de moindre qualité, comme représenté schématiquement à gauche de la figure 4.22. Sur ce schéma, on note que la présence du premier point rouge (à la sixième itération) peut entraîner une bifurcation du système vers un chemin de convergence plus complexe et long lorsque l'on prend comme amplitudes initiales x_k les seuls coefficient issues de cette itération pathologique. Une solution possible



FIGURE 4.22 – Chemins de convergences schématisés, dans un cadre RMF en noir, RMF+QCM sans optimisation en rouge, RMF+QCM avec optimisation de mélange en bleu. En ordonnée, on note convergence l'écart de l'itération n à l'itération n - 1 que l'on normalise.

| Système | RMF | RMF+QCM | RMF+QCM Optimisé |
|---------------------------------------|-----|---------|------------------|
| ⁸ Be (2 Quartet, 12 états) | 110 | 798 | 506 |
| 20 Ne (1 Quartet, 10 états) | 44 | 631 | 329 |

TABLEAU 4.4 – Comparaison du nombre d'itérations nécessaires à l'obtention d'une convergence pour deux types de systèmes, dans le cadre d'une approche RMF, de la méthode RMF+QCM classique et avec l'optimisation décrite précédemment.

est représentée à droite de la figure 4.22. Dans ce cas les coefficients d'initialisation sont calculés comme moyenne pondérée des amplitudes de mélanges des trois itérations précédentes (choix présentant le meilleur compromis entre amélioration de la convergence et utilisation des ressources), ce qui peut permettre de lisser les chemins de convergences. On obtient donc les k coefficients de mélange à l'itération n selon.

$$\forall k \qquad x_k^{(n)} = \sum_{i=(n-1),\dots,(n-3)} \zeta_i \cdot x_k^{(i)}$$
(4.52)

Nous avons choisis de considérer trois itérations comme compromis permettant d'éviter d'éventuelles discontinuités liées à un seul point pathologique tout en conservant un minimum d'information sur le système. De plus empiriquement ce choix s'avère être le plus raisonnable, les résultats variant très peu au delà de trois itérations considérées. Toutefois le choix des poids ζ_i est primordial pour l'efficacité de la méthode : si l'on accorde trop d'importance aux précédentes itérations, le chemin de convergence sera plus lisse mais également plus long tandis que si l'on n'accorde pas assez d'importance aux itérations précédentes, on risque de nouveau de tomber sur une bifurcation. Dans le cadre de notre étude nous avons choisi comme pondération le simple écart entre l'énergie associée à l'itération i et celle associée à l'itération (i-1), le tout normalisé à l'unité. A droite de la figure 4.22 est représenté le nouveau schéma de convergence obtenu avec cette méthode, on peut ainsi obtenir une optimisation conséquente du nombre d'itération total RMF+QCM d'une part mais également du temps de calcul de chaque itération QCM, puisque l'on part de meilleures valeurs initiales. On peut quantifier cette optimisation dans le tableau 4.4. Avec ces nouvelles optimisations, on peut à présent se focaliser sur les conséquences physiques de la prise en compte de corrélations à 4-corps.



FIGURE 4.23 – Énergies *single-particle* des neutrons dans la base canonique. A gauche l'évolution des énergies lorsque l'on augmente β_2 jusqu'à la valeur obtenue pour l'état fondamental et l'on conserve β_3 fixé à 0. A droite on fixe β_2 à la valeur de l'état fondamental puis l'on fait évoluer β_3 . Le niveau de Fermi est indiqué par la ligne grise discontinue.

4.3.3 Cas du Néon 20

Impact des corrélations à 4-corps

On se propose d'étudier l'influence des corrélations à 4-corps sur une configuration octupolaire clusterisée du Néon 20. En s'inspirant de l'idée d'Ikeda[ITH68], on considère ce noyau comme une superposition d'une particule alpha et d'un cœur d'Oxygène 16. On scinde donc naturellement notre espace, en un cœur de 16 nucléons (correspondant à une double fermeture de couche) et une fenêtre de valence dans laquelle peuvent évoluer les 4 protons et neutrons restants pouvant préformer une particule alpha. On considère donc un système à un quartet et une fenêtre de 10 niveaux au dessus du cœur d'¹⁶O. On peut vérifier cette hypothèse en traçant les états d'énergie de particules individuelles pour le Néon 20 en faisant évoluer β_2 puis β_3 en Figure 4.23. On observe clairement la séparation entre les états formant le cœur d'Oxygène 16 et les états que l'on inclut dans la fenêtre de valence. Dans le cadre de l'approche totalement auto-cohérente 4.3.2 on obtient une énergie supplémentaire associée aux corrélations à 4 corps $E_{Quart} = 4.7$ MeV. On peut représenter la densité totale de nucléons associée à cette configuration dans les cas *RMF* et *RMF*+*QCM* en Figure 4.24.



FIGURE 4.24 – Densité du ²⁰Ne dans le référentiel intrinsèque contraint à une configuration ($\beta_2 = 0.5, \beta_3 = 0.47$). A droite dans le cas *RMF* à gauche dans le cas *RMF*+*QCM*.

Sur cette figure on remarque que l'agrégat situé autour de 3 fm selon la direction axiale reste présent lorsque l'on prend en compte les corrélations inhérentes au quartet mais semble être légèrement déformé et moins marqué. Pour visualiser plus finement cette délocalisation on peut représenter, en coupe selon l'axe (Oz), les valeurs de la densité ainsi que la mesure de localisation en Figure 4.25. Ainsi le cluster est



FIGURE 4.25 – Mesure de localisation (à gauche) et densité (à droite) du ²⁰Ne dans le référentiel intrinsèque contraint à une configuration ($\beta_2 = 0.5, \beta_3 = 0.47$) en coupe selon l'axe (Oz). Courbes obtenues dans un cadre *RMF*(en bleu) et *RMF*+*QCM* (en vert)

moins prononcé que dans le cas d'un pur champ-moyen mais reste toutefois correctement localisé. Il est donc particulièrement intéressant de comparer cette localisation à celle obtenue dans le cadre usuel où l'on ne prend en compte les seules corrélations d'appariement dans le cadre du formalisme de Bogolioubov ou PBCS.

Impact des corrélations à deux et quatre corps.

Pour pouvoir comparer ces deux approches on conserve exactement la même interaction dans le canal particule-particule, générant 5 MeV supplémentaire et on

cherche à déterminer la configuration minimisant l'énergie dans ces deux cas. Tout d'abord on peut observer la densité à 1-corps en Figure 4.26. La différence est par-



FIGURE 4.26 – Densité du ²⁰Ne dans le référentiel intrinsèque dans le cadre du formalisme *RHB* (appariement) à droite, et dans le cadre *RMF*+*QCM* (quartets) à gauche.

ticulièrement forte entre les deux approches, comme on l'a vu en section 4.1.2, l'appariement a pour effet d'homogénéiser le système et de réduire sa déformation. Dans le cas quartet on conserve à la fois la déformation et surtout la présence d'un cluster toujours bien localisé. De nouveau on peut visualiser la mesure de localisation en vis-à-vis de la densité en coupe selon l'axe (Oz) en Figure 4.27. On note que la



FIGURE 4.27 – Densité du ²⁰Ne dans le référentiel intrinsèque (à gauche), mesure de localisation (à droite) en coupe selon l'axe (Oz). En rouge les résultats dans le formalisme *RHB*, en bleu *RMF*+*QCM*.

configuration minimisant l'énergie dans le formalisme où l'on ne prend en compte que des corrélations d'appariement est bien plus homogène et n'exhibe plus de structure localisée. A contrario la configuration obtenue dans le formalise *QCM*, présente l'émergence d'un agrégat parfaitement localisé autour de 4 fm. Ce résultat particulièrement marquant peut nous faire supposer que le quartet se comporte comme une structure localisée et pourrait s'identifier à une particule alpha préformée dans le milieu. Pour étudier cette hypothèse il est intéressant de représenter l'équivalent de la partie locale d'un tenseur d'appariement dans le cas quartet.

Localisation spatiale d'un quartet

On peut définir un objet analogue au tenseur d'appariement κ en étudiant la représentation coordonnée de l'opérateur Q défini en (4.50), dans le cas ou $r_1 = r_2 = r_3 = r_4$, les r_i étant les coordonnées des nucléons corrélés au sein du quartet. Ces objets capturant respectivement les corrélations à deux et quatre corps nous renseignent sur la localisation spatiale la plus probable des paires ou des quartets. En figure 4.28 sont représentés les mesures de localisation dans le cadre *RHB* et *RMF*+*QCM* ainsi que les parties locales de κ et de Q.



FIGURE 4.28 – 20 Ne : Mesure de localisation (à gauche) et probabilité de trouver une structure corrélée, paire ou quartet (à droite). Le panel de gauche correspond à l'approche *RMF*+*QCM*, le panel de droite à l'approche *RHB*.

Cette figure illustre parfaitement la différence entre les deux approches, d'une part l'appariement délocalise les nucléons, les paires se localisant principalement à la surface, là où la variation de densité est la plus forte. D'autre part les corrélations de quartets se localisent parfaitement au niveau de l'agrégat de nucléons. Ainsi dans le cadre de cette approche il semble que les clusters signent l'émergence de fortes corrélations à 4-corps, autrement dit les clusters sont bien des particules alpha préformées dans le noyau. Il est intéressant de noter que le formalisme où l'on ne prend en compte que les corrélations d'appariement ne suffit pas pour rendre compte de cette émergence. Une des différences principales avec le formalisme QCM, permettant d'expliquer cette non-émergence, est le fait de ne pas pouvoir traiter sur un pied d'égalité les corrélations dans les différence il est donc intéressant d'étudier la part de la contribution protons-neutrons. En Figure 4.29, sont ainsi représentés la part des corrélations neutrons-neutrons ³, la part protons-neutrons, nécessairement absente des calculs *RHB* et la contribution totale des corrélations du quartet.

^{3.} Identique à la contribution protons-protons



FIGURE $4.29 - {}^{20}$ Ne : Localisation spatiale de la partie locale des corrélations à 4-corps, dans le cas neutrons-neutrons A, protons-neutrons B et contribution totale C.

Il est intéressant de remarquer que la part protons-neutrons est localisée principalement dans le lobe correspondant au cluster, alors que la partie neutrons-neutrons présente une délocalisation sur deux lobes. On peut en conclure que les corrélations protons-neutrons renforcent l'émergence d'une structure de cluster- α pour le Néon 20, ce qui justifie d'autant plus l'absence d'émergence dans une approche *RHB*.

4.3.4 Noyaux N=Z

Pour généraliser notre propos on peut brièvement étudier la localisation des agrégats et des quartets pour d'autres noyaux N = Z. Toujours dans l'approche prônée par Ikeda[ITH68] et reprise plus récemment dans le cadre d'une approche microscopique [EKNcvacV14], on peut supposer que les clusters sont des particules alpha s'agençant soit dans l'espace libre, soit autour d'un cœur doublement magique. On se limite ici à l'étude des quatre noyaux ⁸Be,¹²C, ²⁰Ne, et ²⁴Mg. Pour confirmer l'identification des agrégats en tant que cluster- α , on étudie spécifiquement des configurations permettant l'émergence respective de un, deux ou trois quartets s'agençant dans le plan. Dans un premier temps on considère les systèmes légers, dans une philosophie no-core, tous les états du système pouvant contribuer aux corrélations de quartets. Ainsi les noyaux de Berylium 8 et de Carbone 12 s'interprètent respectivement comme des superpositions de deux ou trois particules alpha. Certaines configurations déformées de ces systèmes, correspondant à des excitations du champ-moyen, mettent en évidence l'émergence d'agrégats, comme on peut le voir en Figure 4.30. Sur cette figure on constate la localisation de deux agrégats localisés linéairement. On peut surtout noter la parfaite concordance de la localisation de la partie locale des corrélations à 4-corps. Autrement dit pour cette configurations, le noyau de ⁸Be est correctement représenté par deux clusters- α . Pour conforter notre compréhension de systèmes en tant qu'agencements de particules alpha, on peut étudier des noyaux



FIGURE 4.30 - On a représenté dans le panel de droite ; à gauche la densité dans le référentiel intrinsèque, et en vis-à-vis la mesure de localisation. Pour le panel de droite ; à gauche la mesure de localisation et à droite la partie locale de l'opérateur de quartet pour le ⁸Be

légèrement plus lourds. Comme nous l'avions vu au chapitre précédent, lorsque l'on considère 8 protons et neutrons, ils peuvent soit, si on les excite, former un tétraèdre de 4 particules α , soit s'agencer de manière à former un système sphérique et homogène, correspondant à l'état fondamental de l'Oxygène 16. Ce noyau étant à double couches fermées, et en conséquence très stable énergétiquement, on peut naturellement le considérer comme le cœur de notre système. Lorsque l'on rajoute des protons et neutrons en suivant la ligne N=Z, on rajoute ainsi des particules alpha à l'¹⁶O. Dans un cadre planaire on peut ainsi décrire les noyaux Néon 20, comme l'agencement ¹⁶O+ α et le Magnésium 24 comme : ¹⁶O+ α + α . On peut de nouveau vérifier cette hypothèse en Figure 4.31. Sur cette dernière figure, on retrouve l'isotope du Néon précédemment étudié, correspondant bien à l'agencement d'un cœur d'Oxygène 16 surmonté (pour les états de parité positive) par un agrégat au niveau duquel les corrélations à 4-corps se concentrent. De même pour la configuration considérée du Magnésium 24, est représenté l'agencement linéaire de deux agrégats aux extrémités d'un noyau d'¹⁶O. Ces deux agrégats sont localisés spatialement et correspondent aux maxima d'intensité de la partie locale des corrélations de quartets. En généralisant et en optimisant les algorithmes de quartets décrits précédemment on pourrait étendre la portée prédictive de notre théorie pour étudier des systèmes à plus de trois particules alpha, pour des systèmes triaxiaux notamment. Une piste intéressante serait de changer la manière d'exprimer les relations de commutations entre opérateurs de paires corrélées(4.51). On pourrait par exemple passer de la méthode itérative utilisée actuellement, à une méthode symbolique, permettant l'expansion analytique rapide des chaînes de commutateurs intervenant dans l'expression à minimiser en utilisant l'outil CADABRA[Pee07] dont l'adaptation à nos besoins est en cours.



FIGURE 4.31 – Pour les panels en lettres majuscules, on a représenté à gauche la densité dans le référentiel intrinsèque, et en vis-à-vis la mesure de localisation. Pour les figures indicées par une minuscule, à gauche la mesure de localisation et à droite la partie locale de l'opérateur de quartet. La lettre A se réfère au 20 Ne et la lettre B au 24 Mg.

4.4 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons discuté l'influence des corrélations particules-particules, sur la structure des noyaux atomiques. Dans un premier temps nous avons constaté que les corrélations d'appariement avaient tendance à s'opposer à l'agrégation et à la déformation et à favoriser un comportement collectif du système le rendant sphérique et homogène. Pour comprendre la localisation spatiale de ces corrélations nous avons introduit les jeux de transformations de Talmi, permettant de nous placer dans un système de coordonnées adapté pour étudier la structure spatiale des paires de nucléons corrélées. Les propriétés des parties locales et non locales du tenseur d'appariement ont été discutées et nous avons introduit une mesure de la longueur de cohérences des corrélations, quantifiant la taille des paires de nucléons. Nous avons également introduit les expressions d'une fonction d'onde de paires de Cooper permettant d'étudier le régime de couplage dans lequel se situe le système et ainsi nous avons pu confirmer la nature de type BCS des corrélations en œuvre au sein des noyaux. L'effet de la restauration du nombre de particules a également été discuté sur la localisation spatiale des paires dans le cadre du formalisme PBCS. Suite à cela nous sommes revenu sur le formalisme et l'implémentation dans un cadre relativiste d'une technique de prise en compte de corrélations à 4-corps, les quartets. Cette méthode permet de rendre compte de corrélations entre nucléons de nature identiques et différentes et d'étudier en particulier les structures présentant des agrégats. Ainsi, par une approche purement microscopique on a pu mettre en évidence l'émergence de structures à 4-corps corrélés au sein des noyaux atomiques, structures spatialement localisées au niveau d'agrégats de nucléons. On peut donc conclure de cette étude que les clusters dont

nous étudions l'émergence, sont très probablement des particules alpha se préformant dans le noyau. On peut ainsi présenter un formalisme universel à même de décrire sur un pied d'égalité aussi bien les états de type liquide quantique, que les états présentant cluster- α . Pour affiner ces travaux, la prochaine étape est de définir une longueur de cohérence à 4-corps permettant de quantifier sans perte de généralité les contributions non locales de l'opérateur de quartets, afin de conclure définitivement quand à la bijection entre agrégat nucléaire et cluster- α pour les noyaux N = Z.

4.5 Références

- [AV00] Coleman A.J. and Yukalov V.I. *Reduced Density Matrices*. Springer, 2000. 127
- [BGG91] J.F. Berger, M. Girod, and D. Gogny. Time-dependent quantum collective dynamics applied to nuclear fission. *Computer Physics Communications*, 63(1):365 – 374, 1991. 123
 - [BM67] T. A Brody and (joint author.) Moshinsky, Marcos. Tables of transformation brackets for nuclear shell-model calculations. New York : Gordon and Breach Science Publishers, 2d ed edition, 1967. English and Spanish. 130
 - [BZ13] Ricardo A Broglia and Vladimir Zelevinsky. *Fifty Years of Nuclear BCS*. WORLD SCIENTIFIC, 2013. 143
- [CIMV84] F. Catara, A. Insolia, E. Maglione, and A. Vitturi. Relation between pairing correlations and two-particle space correlations. *Phys. Rev. C*, 29 :1091–1094, Mar 1984. 134
 - [Coo56] Leon N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Phys. Rev.*, 104 :1189–1190, Nov 1956. 141
 - [DNS02] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and M. V. Stoitsov. Contact Pairing Interaction for the Hartree-Fock-Bogoliubov Calculations, pages 181–188. Springer Netherlands, Dordrecht, 2002. 122
- [EKNcvacV14] J.-P. Ebran, E. Khan, T. Nikšić, and D. Vretenar. Density functional theory studies of cluster states in nuclei. *Phys. Rev. C*, 90 :054329, Nov 2014. 152
 - [Fie79] G Fieck. Racah algebra and talmi transformation in the theory of multi-centre integrals of gaussian orbitals. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 12(7):1063, 1979. 123
 - [FM14] S. Frauendorf and A.O. Macchiavelli. Overview of neutron-proton pairing. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 78:24-90, 2014. 145
 - [FS99] M. Farine and P. Schuck. Surface properties of nuclear pairing with the gogny force in a simplified model. *Physics Letters B*, 459(4):444 449, 1999. 122
 - [HUS40] K HUSIMI. Some formal properties of the density matrix. Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan. 3rd Series, 22(4):264–314, 1940. 127

- [ITH68] Kiyomi Ikeda, Noboru Takigawa, and Hisashi Horiuchi. The systematic structure-change into the molecule-like structures in the selfconjugate 4n nuclei. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, E68 :464–475, 1968. 148, 152
- [KH04] K. Kaneko and M. Hasegawa. Competition between isoscalar and isovector pairing correlations in n = z nuclei. *Phys. Rev. C*, 69 :061302, Jun 2004. 145
- [LEKS18] R.-D. Lasseri, J.-P. Ebran, E. Khan, and N. Sandulescu. Localization of pairing correlations in nuclei within relativistic mean field models. *Phys. Rev. C*, 98 :014310, Jul 2018. 144
 - [Mat13] Masayuki Matsuo. Spatial Structure of Cooper Pairs in Nuclei, pages 61–72. WORLD SCIENTIFIC, 2013. 126
 - [Men98] J. Meng. Pairing interaction in exotic nuclei : Finite range or zero range ? *Phys. Rev. C*, 57 :1229–1232, Mar 1998. 122
 - [Mos59] Marcos Moshinsky. Transformation brackets for harmonic oscillator functions. *Nuclear Physics*, 13(1):104 – 116, 1959. 130
- [NcvacRV05] T. Nikšić, P. Ring, and D. Vretenar. Renormalized relativistic hartree-bogoliubov equations with a zero-range pairing interaction. *Phys. Rev. C*, 71:044320, Apr 2005. 122
 - [Nég13] Daniel Négréa. Proton-neutron pairing correlations in atomic nuclei. Theses, Université Paris Sud - Paris XI, September 2013. 145
 - [NPVR14] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, and P. Ring. Dirhb—a relativistic self-consistent mean-field framework for atomic nuclei. *Computer Physics Communications*, 185(6):1808 – 1821, 2014. 124
 - [OD05] G. Ortiz and J. Dukelsky. Bcs-to-bec crossover from the exact bcs solution. *Phys. Rev. A*, 72 :043611, Oct 2005. 141, 142
 - [Pee07] Kasper Peeters. Cadabra : a field-theory motivated symbolic computer algebra system. Computer Physics Communications, 176(8):550–558, apr 2007. 153
 - [PSS07] N. Pillet, N. Sandulescu, and P. Schuck. Generic strong coupling behavior of cooper pairs on the surface of superfluid nuclei. *Phys. Rev. C*, 76 :024310, Aug 2007. xiv, 126, 135, 141
 - [PSSB10] N. Pillet, N. Sandulescu, P. Schuck, and J.-F. Berger. Two-particle spatial correlations in superfluid nuclei. *Phys. Rev. C*, 81 :034307, Mar 2010. 126, 134, 135, 141
 - [Rob10] Luis M. Robledo. Separable approximation to two-body matrix elements. *Phys. Rev. C*, 81 :044312, Apr 2010. 123
 - [SAB⁺16] I. Ruiz Simo, J.E. Amaro, M.B. Barbaro, A. De Pace, J.A. Caballero, G.D. Megias, and T.W. Donnelly. Emission of neutron–proton and proton–proton pairs in neutrino scattering. *Physics Letters B*, 762 :124 – 130, 2016. 126
 - [SRR01] M. Serra, A. Rummel, and P. Ring. Relativistic theory of pairing in symmetric nuclear matter. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 46(1):175 – 176, 2001. 122

- [SS13] M. Sambataro and N. Sandulescu. Isovector pairing in a formalism of quartets for n = z nuclei. *Phys. Rev. C*, 88 :061303, Dec 2013. 145
- [SS15] M. Sambataro and N. Sandulescu. Four-body correlations in nuclei. *Phys. Rev. Lett.*, 115 :112501, Sep 2015. 145
- [SS17] M. Sambataro and N. Sandulescu. Quartet correlations in n = z nuclei induced by realistic two-body interactions. *The European Physical Journal A*, 53(3):47, Mar 2017. 145
- [SSM⁺08] R. Subedi, R. Shneor, P. Monaghan, B. D. Anderson, K. Aniol, J. Annand, J. Arrington, H. Benaoum, F. Benmokhtar, W. Boeglin, J.-P. Chen, Seonho Choi, E. Cisbani, B. Craver, S. Frullani, F. Garibaldi, S. Gilad, R. Gilman, O. Glamazdin, J.-O. Hansen, D. W. Higinbotham, T. Holmstrom, H. Ibrahim, R. Igarashi, C. W. de Jager, E. Jans, X. Jiang, L. J. Kaufman, A. Kelleher, A. Kolarkar, G. Kumbartzki, J. J. LeRose, R. Lindgren, N. Liyanage, D. J. Margaziotis, P. Markowitz, S. Marrone, M. Mazouz, D. Meekins, R. Michaels, B. Moffit, C. F. Perdrisat, E. Piasetzky, M. Potokar, V. Punjabi, Y. Qiang, J. Reinhold, G. Ron, G. Rosner, A. Saha, B. Sawatzky, A. Shahinyan, S. Širca, K. Slifer, P. Solvignon, V. Sulkosky, G. M. Urciuoli, E. Voutier, J. W. Watson, L. B. Weinstein, B. Wojtsekhowski, S. Wood, X.-C. Zheng, and L. Zhu. Probing cold dense nuclear matter. *Science*, 320(5882) :1476–1478, 2008. 126
- [SSVn05] N. Sandulescu, P. Schuck, and X. Viñas. Nuclear pairing : Surface or bulk ? *Phys. Rev. C*, 71 :054303, May 2005. 122
- [STM10] Bao Yuan Sun, Hiroshi Toki, and Jie Meng. Relativistic description of bcs-bec crossover in nuclear matter. *Physics Letters B*, 683(2):134 – 139, 2010. 143
 - [Tal52] Igal Talmi. Nuclear spectroscopy with harmonic oscillator wavefunctions. PhD thesis, ETH Zürich, 1952. 123, 130
 - [Tal70] James D. Talman. Some properties of three-dimensional harmonic oscillator wave functions. *Nuclear Physics A*, 141(2) :273 – 288, 1970. 130, 131
 - [TL71] J.D. Talman and A. Lande. Computation of moshinsky brackets by direct diagonalization. *Nuclear Physics A*, 163(1):249 – 256, 1971. 130
- [TMR09a] Y. Tian, Z.Y. Ma, and P. Ring. A finite range pairing force for density functional theory in superfluid nuclei. *Physics Letters B*, 676(1):44 – 50, 2009. xiii, 122, 123
- [TMR09b] Yuan Tian, Zhong-yu Ma, and Peter Ring. Separable pairing force for relativistic quasiparticle random-phase approximation. *Phys. Rev. C*, 79 :064301, Jun 2009. 122
- [WAK⁺17] Meng Wang, G. Audi, F.G. Kondev, W.J. Huang, S. Naimi, and Xing Xu. The ame2016 atomic mass evaluation (ii). tables, graphs and references. *Chinese Physics C*, 41(3) :030003, 2017. xvii, 136

[yMTR10] Zhong yu Ma, Yuan Tian, and P. Ring. Density functional theory with a separable pairing force in finite nuclei. *Nuclear Physics A*, 834(1):50c – 53c, 2010. The 10th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2009). 122, 124

Conclusions générales

Ce mémoire de thèse nous a permis d'introduire un formalisme unifié permettant l'analyse de l'impact des corrélations nucléoniques sur la structure nucléaire. Le cadre formel de cette étude est celui des EDF relativistes, théorie philosophiquement analogue à la DFT électronique mais sans bases formelles rigoureuses. Toutefois cette approche, est à l'heure actuelle la seule à permettre un traitement précis et universel de l'ensemble de la carte des noyaux pour un faible nombre de paramètres libres. Au cœur des EDF, le concept de brisure de symétries permet d'inclure plusieurs classes de corrélations. Ces corrélations sont à l'origine d'une large gamme de phénomènes émergents tels que la déformation, l'appariement ou l'agrégation nucléaire. Pour inclure ces corrélations, on peut soit développer les observables d'intérêt en perturbations, soit autoriser la brisure de classes de symétries plus générales.

Dans le cadre de la première approche, on maîtrise explicitement la portée des corrélations que l'on introduit. Pendant cette thèse une approche diagrammatique automatisée a été proposée pour déterminer l'expression d'observables à tout ordre en perturbation. L'approche reposant sur la brisure de symétries, permet de resommer une large classe de corrélations, pour un coût formel et numérique minimal. C'est dans ce cadre que s'inscrit la majeure partie du travail présenté ici. Tout d'abord nous avons optimisé et étendu la portée de codes permettant la résolution d'équations de champ-moyen relativiste. L'introduction d'algorithmes bio-mimétiques a permis une réduction drastique du temps de calcul nécessaire à l'étude de configurations déformées, lorsque l'on considère des système à déformations triaxiales.

L'objectif principal de cette thèse fut de préciser les mécanismes et les corrélations à l'origine de la formation de clusters dans les noyaux atomiques. Aussi une mesure de la localisation a été introduite pour étudier les propriétés spatiales précises des agrégats. Nous avons également dérivé un paramètre de localisation, basé sur la dispersion spatiale des fonctions d'ondes des états de valence du système considéré. Ce paramètre nous a permis d'identifier les noyaux susceptibles de présenter des clusters dans leur état fondamental, aussi bien pour noyaux légers, dont le caractère *clusterisé* est déjà bien établi expérimentalement, que dans les noyaux plus lourds émetteurs de particules α . Nous sommes également revenus sur le mécanisme d'agrégation nucléaire au travers du prisme des transitions de phases quantiques. Ainsi nous avons pu étudier dans le cas de l'Oxygène 16 la transition d'une distribution sphérique à une distribution tétraédrique lorsque l'on augmente artificiellement son rayon. Nous avons pu déterminer que cette transition correspond exactement à une transition de Mott couplée à une transition d'un régime superfluide à un régime non-superfluide.

Nous nous sommes ensuite intéressés à l'étude de la localisation spatiale des corrélations d'appariement. Ces corrélations ont tendance à rendre le noyau homogène et isotrope, traduisant l'augmentation du comportement collectif des nucléons se répartissant en paires de Cooper. En utilisant les transformations de Talmi, nous avons pu étudier la localisation spatiale des paires de Cooper et en conclure qu'elles se localisent principalement à la surface du noyau. De plus cette étude nous a permis de confirmer l'absence de condensat de paires de Cooper dans l'état fondamental des noyaux. L'impact de la restauration du nombre de particules, a également été étudié en particulier sur les propriétés de localisation spatiale des paires dans un formalisme PBCS. Nous avons aussi mis en évidence le fait que les corrélations d'appariement seules ont tendance à s'opposer à l'apparition de clusters. Or on peut de prime abord s'attendre à ce que les clusters soient de fait des agencements de 4 particules (2 neutrons et 2 protons) autrement dit des particules α dont la préformation dans le milieu serait favorisée par certains types de corrélations particules-particules. Nous avons donc introduit pour la première fois dans un cadre relativiste la prise en compte de corrélations à 4-corps par une approche QCM. Cette implémentation a nécessité l'introduction de plusieurs techniques d'optimisation afin de rendre possible, en un temps raisonnable, la résolution totalement auto-cohérente des équations de champ-moyen couplées aux équations QCM.

Cette approche, présente plusieurs avantages, conservant à la fois le nombre de particules et traitant sur un pied d'égalité les corrélations neutrons-neutrons, protonsprotons et neutrons-protons. Dans cette approche les structures agrégées restent correctement localisées. Ainsi lorsque l'on étudie la distribution spatiale des quartets localisés dans le noyau il s'avère que leurs positions coïncident précisément avec celles des agrégats nucléaires. C'est à dire que de fortes corrélations à 4-corps, sont à l'œuvre au sein de clusters. En particulier la prise en compte des corrélations neutrons-protons participe à l'obtention d'une localisation au niveau des clusters. Cette étude couplée avec le calcul de la densité au sein des agrégats, semble permettre de conclure, d'un point de vue microscopique, sur la nature de particule α des clusters pouvant se préformer dans les noyaux atomiques. Une extension des corrélations de quartets pour prendre en compte les paires isoscalaires pourrait permettre de préciser encore le propos. De même qu'une étude complémentaire des longueurs de cohérences de quartets permettrait de formuler une conclusion définitive quand à la nature des agrégats.

En guise d'ouverture, il est intéressant de mentionner le fait que les optimisations et algorithmes développés pour réaliser ces travaux de thèse semblent permettre de changer la manière usuelle de résoudre les équations de champ-moyen. En effet remplacer les approches exploratoires de l'espace variationnel (de type descente de gradient) par des approches bio-mimétiques permettrait d'une part d'accélérer considérablement l'obtention de PES, mais également de prouver formellement que l'on obtient pour chaque calcul, le minimum global de notre fonctionnelle. Ceci rendrait les calculs au niveau du champ-moyen ainsi que les approches de type GCM, plus rapides et indépendants des paramètres de la base que l'on considère.

Par ailleurs, cette thèse a également été l'occasion de construire des ponts interdisciplinaires en fournissant une description microscopique de la déformation nucléaire qui revêt un caractère fondamental pour les études d'une éventuelle brisure de la symétrie de Lorentz dans un cadre cosmologique (annexe I).

Annexe A

Listes des acronymes utilisés

EDF : Energy Density Functional

SR-EDF : Single Reference - EDF

MR-EDF : Multi Reference - EDF

DFT : Density Functional Theory

QCD : Quantum Chromo Dynamics

EFT : Effective Field Theory

QHD : Quantum Hadro Dynamics

DBHF : Dirac Brueckner Hartree Fock

SRG : Similarity Renormalisation Group

HF : Hartree Fock

HFB : Hartree Fock Bogoliouv

RMF : Relativistic Mean-Field

NSET : No Sea Effective Theory

MBPT : Many Body Perturbation Theory

BMBPT : Bogolioubov Many Body Perturbation Theory

ADG : Automatic Diagram Generator

ABP : Algorithmic Branching Program

BCS : Bardeen Cooper Schrieffer

PBCS : Projected BCS

QCM : Quartet Condensate Model

AMD : Antisymetrised Molecular Dynamics

FMD : Fermionic Molecular Dynamics

PES : Potential Energy Surface

GCM : Generator Coordinate Method
Annexe B

MBPT : Expressions et diagrammes à l'ordre 4

Dans cette annexe on trouvera un exemple type de l'output du code ADG, utilisé pour exprimer les contributions à l'énergie dans le cas ou l'on considère une interaction à deux corps quelconque. On représente tous les diagrammes contribuant au quatrième ordre en perturbation dans le cadre d'une théorie MBPT se construisant sur le vide d'une théorie Hartree-Fock.

Diagrams and algebraic expressions at order 4 in MBPT

RDL, JR, PA, MD, AT, TD, JPE

May 24, 2018

Valid diagrams: 39 Singles: 4 Doubles: 12 Triples: 16 Quadruples: 7 Quintuples and higher excitation levels: 0

Contents

- 1 Singles
- 2 Doubles
- 3 Triples
- 4 Quadruples
- 1 Singles
- Diagram 1:











Triples

ಲು



Triples



Annexe C

BMBPT : Expressions et diagrammes à l'ordre 2

Dans cette annexe on trouvera un exemple type de l'output du code ADG, utilisé pour exprimer les contributions à l'énergie dans le cas ou l'on considère une interaction à deux corps quelconque. On représente tous les diagrammes contribuant au second ordre en perturbation. Cette fois il s'agit des contributions obtenues le cadre d'une théorie BMBPT, qui se construit à partir d'un vide de Bogolioubov.

Diagrams and algebraic expressions at order 2 in $$\operatorname{BMBPT}$

RDL, JR, PA, MD, AT, TD, JPE

July 18, 2018

Valid diagrams: 8 2N valid diagrams: 8 2N canonical diagrams for the energy: 1 2N canonical diagrams for a generic operator only: 1 2N non-canonical diagrams: 6

Contents

| 1 | Two-body diagrams | 1 |
|---|---|---|
| | 1.1 Two-body energy canonical diagrams | 1 |
| | 1.2 Two-body canonical diagrams for a generic operator only | 1 |
| | 1.3 Two-body non-canonical diagrams | 2 |

1 Two-body diagrams

1.1 Two-body energy canonical diagrams

Diagram 1:

$$PO2.1 = \lim_{\tau \to \infty} \frac{(-1)^2}{(2!)^3} \sum_{k_i} O_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{40} \Omega_{k_5 k_6 k_1 k_2}^{22} \Omega_{k_5 k_6 k_3 k_4}^{04} \int_0^{\tau} d\tau_1 d\tau_2 \theta(\tau_2 - \tau_1) e^{-\tau_1 \epsilon_{k_1 k_2}^{k_5 k_6}} e^{-\tau_2 \epsilon_{k_3 k_4 k_5 k_6}} \\ = \frac{(-1)^2}{(2!)^3} \sum_{k_i} \frac{O_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{40} \Omega_{k_5 k_6 k_1 k_2}^{22} \Omega_{k_5 k_6 k_3 k_4}^{04}}{\epsilon_{k_1 k_2 k_3 k_4} \epsilon_{k_3 k_4 k_5 k_6}}$$
(1)

¥

1.2 Two-body canonical diagrams for a generic operator only

Diagram 2:

1.3 Two-body non-canonical diagrams

Diagram 3:

$$PO2.3 = \lim_{\tau \to \infty} \frac{(-1)^2}{(2!)^2} \sum_{k_i} O_{k_1 k_2}^{20} \Omega_{k_3 k_4}^{20} \Omega_{k_3 k_4 k_1 k_2}^{04} \int_0^{\tau} d\tau_1 d\tau_2 \theta(\tau_2 - \tau_1) e^{-\tau_1 \epsilon^{k_3 k_4}} e^{-\tau_2 \epsilon_{k_1 k_2 k_3 k_4}} \\ = \frac{(-1)^2}{(2!)^2} \sum_{k_i} \frac{O_{k_1 k_2}^{20} \Omega_{k_3 k_4}^{20} \Omega_{k_3 k_4 k_1 k_2}^{04}}{\epsilon_{k_1 k_2} \epsilon_{k_1 k_2 k_3 k_4}}$$
(3)

Diagram 4:

$$PO2.4 = \lim_{\tau \to \infty} (-1)^2 \sum_{k_i} O_{k_1 k_2}^{20} \Omega_{k_3 k_1}^{11} \Omega_{k_3 k_2}^{02} \int_0^{\tau} d\tau_1 d\tau_2 \theta(\tau_2 - \tau_1) e^{-\tau_1 \epsilon_{k_1}^{k_3}} e^{-\tau_2 \epsilon_{k_2 k_3}}$$

$$= (-1)^2 \sum_{k_i} \frac{O_{k_1 k_2}^{20} \Omega_{k_3 k_1}^{11} \Omega_{k_3 k_2}^{02}}{\epsilon_{k_1 k_2} \epsilon_{k_2 k_3}}$$

$$(4)$$

Diagram 5:

$$PO2.5 = \lim_{\tau \to \infty} \frac{(-1)^2}{(3!)} \sum_{k_i} O_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{40} \Omega_{k_5 k_1}^{11} \Omega_{k_5 k_2 k_3 k_4}^{04} \int_0^{\tau} d\tau_1 d\tau_2 \theta(\tau_2 - \tau_1) e^{-\tau_1 \epsilon_{k_1}^{k_5}} e^{-\tau_2 \epsilon_{k_2 k_3 k_4 k_5}} \\ = \frac{(-1)^2}{(3!)} \sum_{k_i} \frac{O_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{40} \Omega_{k_5 k_1}^{11} \Omega_{k_5 k_2 k_3 k_4}^{04}}{\epsilon_{k_1 k_2 k_3 k_4} \epsilon_{k_2 k_3 k_4 k_5}}$$
(5)

Diagram 6:

$$PO2.6 = \lim_{\tau \to \infty} \frac{(-1)^2}{(2!)^2} \sum_{k_i} O_{k_1 k_2}^{20} \Omega_{k_3 k_4 k_1 k_2}^{22} \Omega_{k_3 k_4}^{02} \int_0^\tau d\tau_1 d\tau_2 \theta(\tau_2 - \tau_1) e^{-\tau_1 \epsilon_{k_1 k_2}^{k_3 k_4}} e^{-\tau_2 \epsilon_{k_3 k_4}} \\ = \frac{(-1)^2}{(2!)^2} \sum_{k_i} \frac{O_{k_1 k_2}^{20} \Omega_{k_3 k_4 k_1 k_2}^{22} \Omega_{k_3 k_4}^{02}}{\epsilon_{k_1 k_2} \epsilon_{k_3 k_4}}$$
(6)

Diagram 7:

$$PO2.7 = \lim_{\tau \to \infty} \frac{(-1)^2}{2(2!)^2} \sum_{k_i} O_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{40} \Omega_{k_1 k_2}^{02} \Omega_{k_3 k_4}^{02} \int_0^\tau d\tau_1 d\tau_2 e^{-\tau_1 \epsilon_{k_1 k_2}} e^{-\tau_2 \epsilon_{k_3 k_4}} \\ = \frac{(-1)^2}{2(2!)^2} \sum_{k_i} \frac{O_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{40} \Omega_{k_1 k_2}^{02} \Omega_{k_3 k_4}^{02}}{\epsilon_{k_1 k_2} \epsilon_{k_3 k_4}}$$
(7)

Diagram 8:

$$PO2.8 = \lim_{\tau \to \infty} \frac{(-1)^2}{(3!)} \sum_{k_i} O_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{40} \Omega_{k_5 k_1 k_2 k_3}^{13} \Omega_{k_5 k_4}^{02} \int_0^{\tau} d\tau_1 d\tau_2 \theta(\tau_2 - \tau_1) e^{-\tau_1 \epsilon_{k_1 k_2 k_3}^{k_5}} e^{-\tau_2 \epsilon_{k_4 k_5}} \\ = \frac{(-1)^2}{(3!)} \sum_{k_i} \frac{O_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{40} \Omega_{k_5 k_1 k_2 k_3}^{13} \Omega_{k_5 k_4}^{02}}{\epsilon_{k_1 k_2 k_3 k_4} \epsilon_{k_4 k_5}}$$
(8)



Annexe D

PBCS : Relations de récurrences

On considère¹ une fonction d'onde PBCS composé de N-paires qui peut s'écrire

$$|N\rangle = \frac{1}{N!} \left(\Gamma^{\dagger}\right) |0\rangle \tag{D.1}$$

où

$$\Gamma^{\dagger} = \sum_{i} x_{i} P_{i}^{\dagger} \tag{D.2}$$

est l'opérateur de création de paires collectif et $P_i^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} [a_i^{\dagger} a_j^{\dagger}]$. Les amplitudes de mélanges x_i s'obtiennent en minimisant l'énergie :

$$E(x) = \frac{\langle N|H|N\rangle}{\langle N|N\rangle} \tag{D.3}$$

Les relations de récurrences nécessaire à la minimisation de (D.3) portent sur la norme $\langle N|N\rangle$ et sur les éléments de matrices du type $\langle N|H_{ij}|N\rangle \propto \langle N|P_i^{\dagger}P_j|N\rangle$. Ainsi

$$\langle N|N\rangle = \frac{1}{N} \sum_{i} x_i^2 \langle N-1|N-1\rangle - \frac{1}{2N} \sum_{i} x_i^3 \langle N-1|P_i^{\dagger}|N-2\rangle \qquad (D.4)$$

où l'on note

$$\langle N|P_i^{\dagger}|N\rangle = x_i \langle N-1|N-1\rangle - \frac{1}{2}x_i^2 \langle N-1|P_i^{\dagger}|N-2\rangle$$
(D.5)

Pour calculer cette norme on initialise la récurrence en utilisant les relations

$$\langle 1|1\rangle = \sum_{i} x_{i}^{2}$$
 et $\langle 1|P_{i}^{\dagger}|0\rangle = x_{i}$ (D.6)

Les éléments de matrices $\langle N|P_i^\dagger P_j|N
angle$ s'obtiennent quant à eux comme :

$$\langle N|P_i^{\dagger}P_j|N\rangle = \frac{1}{4}x_i^2 x_j^2 \langle N-2|P_j^{\dagger}P_i|N-2\rangle + x_j \langle N|P_i^{\dagger}|N-1\rangle -\frac{1}{2}x_j^2 x_i \langle N-1|P_j^{\dagger}|N-2\rangle +\delta_{ij}\frac{x_i^4}{4} \left(\langle N-2|N-2\rangle - \frac{1}{2} \langle N-2|N_i|N-2\rangle\right)$$
(D.7)

Et la valeur moyenne de l'opérateur Nombre N_i , apparaissant en (D.7), s'obtient selon

$$\langle N|N_i|N\rangle = 2x_i \langle N|P_i^{\dagger}|N-1\rangle$$
 (D.8)

L'initialisation s'effectue en partant de la relation $\langle 1|P_i^{\dagger}P_j|1\rangle = x_i x_j$.

^{1.} Phys. Rev. C 80, 044335

Annexe E

QCM : Relations de récurrences

Dans le cadre d'une approche QCM¹, on définit un opérateur de quartet définis à partir des opérateurs de créations de paires collectifs, $\{P_{i,0}^{\dagger}, P_{i,-1}^{\dagger}, P_{i,1}^{\dagger}\}$. En particulier le quartet composé de deux paires isovectorielle recouplé à un isospin total T = 0.

$$A_{ij}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(P_{i,1}^{\dagger} P_{j,-1}^{\dagger} + P_{i,-1}^{\dagger} P_{j,1}^{\dagger} - P_{i,0}^{\dagger} P_{j,0}^{\dagger} \right)$$
(E.1)

A partir de cet opérateur on peut construire l'opérateur de quartet collectif Q^{\dagger} :

$$Q^{\dagger} = \sum_{i,j} x_{ij} A^{\dagger}_{ij} \tag{E.2}$$

Qui permets de définir une fonction d'onde à n_q quartets :

$$|\Psi\rangle = \left(\mathcal{Q}^{\dagger}\right)^{n_q}|0\rangle \tag{E.3}$$

On prends comme hypothèse simplificatrice, la séparabilité de l'amplitude de mélange : $x_{ij} \simeq x_i x_j$ Dans ce cadre l'opérateur (E.2) se ré-exprime :

$$Q^{\dagger} = \sum_{i} x_{i} P_{i,1}^{\dagger} \sum_{j} x_{j} P_{j,-1}^{\dagger} + \sum_{i} x_{i} P_{i,-1}^{\dagger} \sum_{j} x_{j} P_{j,1}^{\dagger} - \sum_{i} x_{i} P_{i,0}^{\dagger} \sum_{j} x_{j} P_{j,0}^{\dagger}$$
(E.4)

On peut reconnaître dans cette dernière expression les opérateurs de créations de paires collectives introduites dans le formalisme PBCS, les Γ_{τ}^{\dagger} . On peut donc réécrire l'opérateur de quartet sous la forme compacte.

$$Q^{\dagger} = 2\Gamma_1^{\dagger}\Gamma_{-1}^{\dagger} - \left(\Gamma_0^{\dagger}\right)^2 \tag{E.5}$$

Par conséquent la fonction d'onde (E.3) devient

$$|\Psi\rangle = \left(2\Gamma_1^{\dagger}\Gamma_{-1}^{\dagger} - \left(\Gamma_0^{\dagger}\right)^2\right)^{n_q}|0\rangle = \sum_k \binom{n_q}{k}(-1)^{n_q-k}2^k \left(\Gamma_1^{\dagger}\Gamma_{-1}^{\dagger}\right)^k \Gamma_0^{\dagger 2(n_q-k)}$$
(E.6)

Ce qui permets de constater que la fonction d'onde de quartet est de fait une superposition de fonctions d'ondes de paires neutrons-neutrons, protons-protons et protonsneutrons. Pour calculer les expressions associées on peut introduire une base auxiliaires définie par

$$|n_1, n_2, n_3\rangle = \Gamma_1^{\dagger n_1} \Gamma_{-1}^{\dagger n_2} \Gamma_0^{\dagger n_3} |0\rangle$$
 (E.7)

Dans cette base (E.3) devient

$$|\Psi\rangle \sum_{k} \binom{n_q}{k} (-1)^{n_q-k} 2^k |k,k,2(n_q-k)\rangle$$
(E.8)

^{1.} Phys. Rev. C 85, 061303(R)

Il s'agit à présent d'exprimer les éléments de matrices entrant en jeu lors du calcul de la valeur moyenne de l'Hamiltonien QCM; pour ce faire on suis l'approche de Negrea et Sandulescu. Les opérateurs entrant en jeu sont ceux définissant l'algèbre associé au groupe SO(5), groupe définissant l'interaction d'appariement isovectorielle. Les opérateurs correspondants aux représentations irréductibles de ce groupe sont les opérateurs de créations de paires $P_{i,\tau}^{\dagger}$, les opérateurs nombres N ainsi que les opérateurs d'isospin définis comme $T_{i,\tau} = \left[a_i^{\dagger}a_i\right]_{M=0,\tau}^{J=0,T=1}$. Ces opérateurs satisfont aux relations de commutations suivantes

$$\begin{bmatrix} P_{i,0}, P_{j,0}^{\dagger} \end{bmatrix} = \delta_{ij} \left(1 - \frac{1}{2} N_{i,0} \right), \\ \begin{bmatrix} P_{i,0}, P_{j,1}^{\dagger} \end{bmatrix} = \delta_{ij} T_{i,1}, \\ \begin{bmatrix} P_{i,0}, P_{j,-1}^{\dagger} \end{bmatrix} = -\delta_{ij} T_{i,-1}$$

$$(E.9)$$

$$\begin{bmatrix} P_{i,1}, P_{i,1}^{\dagger} \end{bmatrix} = \delta_{ij} \left(1 - N_{i,1} \right), \\ \begin{bmatrix} P_{i,1}, P_{j,-1}^{\dagger} \end{bmatrix} = 0, \\ \begin{bmatrix} P_{i,-1}, P_{j,-1}^{\dagger} \end{bmatrix} = \delta_{ij} \left(1 - N_{i,-1} \right)$$

$$P_{i,1}, P_{j,1} = \delta_{ij} (1 - N_{i,1}), [P_{i,1}, P_{j,-1}] = 0, [P_{i,-1}, P_{j,-1}] = \delta_{ij} (1 - N_{i,-1})$$
(E.10)
(E.10)

$$\left[N_{i,0}, P_{j,\tau}^{\dagger}\right] = 2\delta_{ij}P_{i,\tau}^{\dagger} \tag{E.11}$$

$$\begin{bmatrix} N_{i,\pm 1}, P_{j,\mp 1}^{\dagger} \end{bmatrix} = 0, \ \begin{bmatrix} N_{i,\pm 1}, P_{j,\pm 1}^{\dagger} \end{bmatrix} = 2\delta_{ij}P_{i,\pm 1}^{\dagger}, \ \begin{bmatrix} N_{i,\pm 1}, P_{j,0}^{\dagger} \end{bmatrix} = \delta_{ij}P_{i,0}^{\dagger} \quad (E.12)$$
$$\begin{bmatrix} T_{i,1}, P_{j,-1}^{\dagger} \end{bmatrix} = -\delta_{ij}P_{i,0}^{\dagger}, \ \begin{bmatrix} T_{i,\pm 1}, P_{j,0}^{\dagger} \end{bmatrix} = -\mp \delta_{ij}P_{i,\pm 1}^{\dagger}, \ \begin{bmatrix} T_{i,-1}, P_{j,1}^{\dagger} \end{bmatrix} = \delta_{ij}P_{i,0}^{\dagger} \quad (E.13)$$

On peut à présent utiliser les relations de Jacobi propre aux algèbres de Lie pour obtenir l'expression

$$\left[A, B^{k}\right] = kB^{k-1}[A,B] + \frac{k(k-1)}{2}[[A,B],B]B^{k-2}(\mathbf{E}.\mathbf{14})$$

A partir de (E.14) et des jeux de commutateurs précédents on peut obtenir les relations de récurrences pour chaque opérateur de SO(5) dans la base auxiliaire définie en (E.7)

$$\begin{split} P_{i,1} | n_1, n_2, n_3 \rangle &= -\frac{n_3(n_3 - 1)}{2} x_i^2 P_{i,-1}^{\dagger} | n_1, n_2, n_3 - 2 \rangle \\ &+ n_1 x_i | n_1 - 1, n_2, n_3 \rangle \\ &- n_1 n_3 x_i^2 P_{i,0}^{\dagger} | n_1 - 1, n_2, n_3 - 1 \rangle \\ &- n_1(n_1 - 1) x_i^2 P_{i,1}^{\dagger} | n_1 - 2, n_2, n_3 \rangle \end{split} \end{split} \tag{E.15}$$

$$\begin{split} P_{i,-1} | n_1, n_2, n_3 \rangle &= -\frac{n_3(n_3 - 1)}{2} x_i^2 P_{i,1}^{\dagger} | n_1, n_2, n_3 - 2 \rangle \\ &+ n_2 x_i | n_1, n_2 - 1, n_3 \rangle \\ &- n_2 (n_2 - 1) x_i^2 P_{i,0}^{\dagger} | n_1, n_2 - 1, n_3 - 1 \rangle \\ &- n_2 (n_2 - 1) x_i^2 P_{i,-1}^{\dagger} | n_1, n_2 - 2, n_3 \rangle \end{split} \end{split} \end{split} \tag{E.16}$$

$$\begin{split} P_{i,0} | n_1, n_2, n_3 \rangle = n_3 x_i | n_1, n_2, n_3 - 1 \rangle \\ &- \frac{n_3(n_3 - 1)}{2} x_i^2 P_{i,0}^{\dagger} | n_1, n_2, n_3 - 2 \rangle \\ &- n_2 n_1 x_i^2 P_{i,0}^{\dagger} | n_1 - 1, n_2 - 1, n_3 \rangle \\ &- n_2 n_3 x_i^2 P_{i,1}^{\dagger} | n_1 - 1, n_2, n_3 - 1 \rangle \\ &- n_2 n_3 x_i^2 P_{i,-1}^{\dagger} | n_1, n_2 - 1, n_3 - 1 \rangle \\ &- n_2 n_3 x_i^2 P_{i,-1}^{\dagger} | n_1, n_2 - 1, n_3 - 1 \rangle \\ &+ 2 n_1 x_i P_{i,0}^{\dagger} | n_1 - 1, n_2, n_3 - 1 \rangle \\ \end{aligned}$$

XVIII

$$N_{i,1} |n_1, n_2, n_3\rangle = n_3 x_i P_{i,0}^{\dagger} |n_1, n_2, n_3 - 1\rangle + 2n_1 x_i P_{i,1}^{\dagger} |n_1 - 1, n_2, n_3\rangle \quad (E.19)$$

$$N_{i,-1} |n_1, n_2, n_3\rangle = n_3 x_i P_{i,0}^{\dagger} |n_1, n_2, n_3 - 1\rangle + 2n_2 x_i P_{i,-1}^{\dagger} |[\rangle n_1, n_2 - 1, n_3$$
(E.20)

$$T_{i,1} |n_1, n_2, n_3\rangle = -n_2 x_i P_{i,0}^{\dagger} |n_1, n_2 - 1, n_3\rangle - n_3 x_i P_{i,1}^{\dagger} |n_1, n_2, n_3 - 1\rangle \quad (E.21)$$

$$T_{i,-1} |n_1, n_2, n_3\rangle = n_1 x_i P_{i,0}^{\dagger} |n_1 - 1, n_2, n_3\rangle + n_3 x_i P_{i,-1}^{\dagger} |n_1, n_2, n_3 - 1\rangle$$
(E.22)

Cet ensemble d'équations permets de calculer tous les éléments de type

$$\langle n'_1, n'_2, n'_3 | P^{\dagger}_{i,1} P_{j,1} | n_1, n_2, n_3 \rangle$$
 (E.23)

éléments qui apparaissant lorsque l'on cherche à calculer les éléments de matrices de l'Hamiltonien d'appariement.

Annexe F

Coefficients de Talmi : Dérivations

Dans cette annexe nous donnerons les principes de dérivation des relations de Talmi permettant d'exprimer un produit de fonctions d'ondes d'oscillateur harmonique évaluée en deux points \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 dans le référentiel du centre de masse. Pour cela on commence par rappeler l'expression des fonctions d'ondes d'un oscillateur harmonique axial.

$$\Phi_{n_r,\Lambda,n_z}(r,z) = \phi_{n_r,\Lambda}(r,b_r)\phi_{n_z}(z,b_z) \tag{F.1}$$

Avec

$$\phi_{n_r,\Lambda}(r,b_r) = \frac{1}{b_r\sqrt{\pi}} \left(\frac{n_r!}{(n_r+|\Lambda|)!}\right)^{1/2} e^{-1/2r^2/b_r^2} \left(\frac{r}{b_r}\right)^{|\Lambda|} L_{n_r}^{\Lambda}(r^2/b_r^2) e^{i\Lambda\theta}$$
(F.2)

$$\phi_{n_z}(z,b_z) = \frac{1}{(b_z\sqrt{\pi})^{1/2}} \frac{1}{(2^{n_z}n_z!)^{1/2}} H_{n_z}(z/b_z) e^{-1/2z^2/b_z^2}$$
(F.3)

Où $L_{n_r}^{\Lambda}$ et H_{nz} représentent les polynômes de Laguerre et Hermite. Par la suite on introduira la notation $\beta_{r/z} = \frac{1}{b_r/b_z}$ Il est à présent nécessaire d'exprimer les fonctions génératrices de l'oscillateur harmonique (F.1). Ces fonctions permettent de traduire en terme analytique une série (ici polynomiale) ainsi pour la partie radiale

$$\chi_{n_r,\Lambda}(\mathbf{t}_r) = \mathcal{N}_{n_r,\Lambda} t_r^{2n_r + |\Lambda|} e^{i\Lambda\theta_t}$$
(F.4)

Avec

$$\mathcal{N}_{n_r,\Lambda} = \frac{(-1)^{n_r}}{(n_r!(n_r+|\Lambda|)!)^{1/2}}$$
(F.5)

Et pour la partie axiale

$$\chi_{n_z}(t_z) = \mathcal{N}_{n_z} t_z^{n_z} \tag{F.6}$$

Et ici

$$\mathcal{N}_{n_z} = \left(\frac{2^{n_z}}{n_z!}\right)^{1/2} \tag{F.7}$$

L'intérêt d'exhiber des fonctions génératrices réside dans leurs propriétés multiplicative remarquables, nécessaire lorsque l'on veut exprimer aisément un produit des fonctions d'ondes associées. Ainsi (F.4) et (F.6) satisfont la relation centrale :

$$\sum_{\mathbf{n}} \chi_{\mathbf{n}}^{*}(\mathbf{t})\phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r},\mathbf{b}) = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{N/4} \cdot e^{-1/2\beta r^{2} + 2\mathbf{t}\cdot\mathbf{r}\sqrt{\beta} - \mathbf{t}^{2}}$$
(F.8)

N valant 1 pour les fonctions axiales et 2 pour les fonctions radiales et **n** indiquant l'ensemble des nombres quantiques axiaux et radiaux. De plus les fonctions généra-

trices ont d'autres propriétés nécessaires par la suite

$$\sum_{\mathbf{n}} \chi_{\mathbf{n}}(\mathbf{t}_{1})\chi_{\mathbf{n}}(\mathbf{t}_{2}) = e^{2\mathbf{t}_{1}\cdot\mathbf{t}_{2}}$$

$$\chi_{\mathbf{n}}(\mathbf{t}_{1})\chi_{\mathbf{n}}(\mathbf{t}_{2}) = \sum_{(3)} \frac{\mathcal{N}_{1}\mathcal{N}_{2}}{\mathcal{N}_{3}}\delta_{3,1+2}\chi_{3}(\mathbf{t})$$

$$\chi_{3}(\mathbf{t}_{1}+\mathbf{t}_{2}) = \sum_{1,2} \frac{\mathcal{N}_{1}\mathcal{N}_{2}}{\mathcal{N}_{3}}\delta_{3,1+2}\chi_{1}(\mathbf{t}_{1})\chi_{2}(\mathbf{t}_{2})$$
(F.9)

Où on note 3 = 1 + 2 les conditions

$$\Lambda_3 = \Lambda_1 + \Lambda_2 \quad \text{Et} \quad n_{z_3} = n_{z_1} + n_{z_2} \tag{F.10}$$

Et l'on notera également

$$X_3 = X_1 + X_2$$
 Avec $X = 2n_r + |\Lambda|$ (F.11)

Muni de ces éléments on peut exprimer le produit le produit des deux fonctions d'ondes :

$$P = \sum_{(\alpha),(\gamma)} \chi_{(\alpha)}(\mathbf{t}_1) \phi_{(\alpha)}^*(\mathbf{r}) \chi_{(\gamma)}^*(\mathbf{t}_2) \phi_{(\gamma)}(\mathbf{r})$$

= $\pi^{-N/4} e^{-1/2 (\mathbf{r}^2 + 2\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{r} - \mathbf{t}_1^2)} \cdot \pi^{-N/4} e^{-1/2 (\mathbf{r}^2 + 2\mathbf{t}_2 \cdot \mathbf{r} - \mathbf{t}_2^2)}$ (F.12)

Ce produit se réexprime en utilisant les propriétés des fonctions génératrices précédentes et deviens :

$$P = \pi^{N/4} \phi_{(0)}(\mathbf{r}) e^{\mathbf{t}_1^2 + \mathbf{t}_2^2} \sum_{(\alpha)(\delta)} \chi_{(\beta)}^* (\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2) \phi_{(\beta)}(\mathbf{r}) \chi_{(\delta)}^* (\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2) \phi_{(\delta)}(\mathbf{r})$$
(F.13)

Cette relation permet ensuite par identification d'obtenir les coefficients de Talmi axiaux ou radiaux, exprimés au Chapitre 4.

Annexe G

Éléments de matrices triaxiaux (parité brisée)

Les éléments de matrices de Dirac sont donnés dans le corps de la thèse, on trouvera dans cette annexe les expressions des éléments de matrices de Klein-Gordon nécessaire pour la résolution des équations RMF. En coordonnées cartésiennes les équations des champs mésoniques ϕ_m avec un terme source s_{ϕ_m} s'expriment

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\phi_m(x, y, z) = s_{\phi_m}(x, y, z) \tag{G.1}$$

Leurs solutions s'obtiennent en réalisant une expansion sur une base complète, ici on choisira une seconde base d'états de l'oscillateur harmonique de même paramètres $\{b_x, b_y, b_z\}$ que la base utilisée pour l'équation de Dirac, tout en se réservant numériquement le droit de modifier le nombre de couches de cette base. Ainsi

$$\phi_m(x, y, z) = \psi_{n_z}(x, b_x)\psi_{n_y}(y, b_y)\psi_{n_z}(y, b_z)$$
(G.2)

Dans cette base l'équation (G.1) devient

$$\sum_{n'_x,n'_y,n'_z}^{N} \mathcal{H}_{n_x,n_y,n_z,n'_x,n'_y,n'_z}^{KG} \phi_{n'_x,n'_y,n'_z} = s_{n_x,n_y,n_z}$$
(G.3)

Où les éléments de matrices de \mathcal{H}^{KG} s'expriment

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{n_{x},n_{y},n_{z},n_{x}',n_{y}',n_{z}'}^{KG} = & \beta_{x}^{2} \left[\sqrt{(n_{x}+1)n_{x}'} \delta_{n_{x},n_{x}'-2} + \sqrt{n_{x}(n_{x}'+1)} \delta_{n_{x},n_{x}'+2} \right] \delta_{n_{y},n_{y}'} \delta_{n_{z},n_{z}'} \\ & - \beta_{y}^{2} \left[\sqrt{(n_{y}+1)n_{y}'} \delta_{n_{y},n_{y}'-2} + \sqrt{n_{y}(n_{y}'+1)} \delta_{n_{y},n_{y}'+2} \right] \delta_{n_{x},n_{x}'} \delta_{n_{z},n_{z}'} \\ & - \beta_{z}^{2} \left[\sqrt{(n_{z}+1)n_{z}'} \delta_{n_{z},n_{z}'-2} + \sqrt{n_{z}(n_{z}'+1)} \delta_{n_{z},n_{z}'+2} \right] \delta_{n_{x},n_{x}'} \delta_{n_{y},n_{y}'} \\ & + \left[\beta_{x}^{2} \left(n_{x}+1/2 \right) + \beta_{y}^{2} \left(n_{y}+1/2 \right) + \beta_{z}^{2} \left(n_{z}+1/2 \right) \\ & + m_{\phi}^{2} \delta_{n_{x},n_{x}'} \delta_{n_{y},n_{y}'} \delta_{n_{z},n_{z}'} \end{aligned}$$

$$(G.4)$$

Annexe H

Stabilité du système : Influence des paramètres de base

L'utilisation d'une base d'oscillateur harmonique dépends principalement de deux paramètres, d'une part le nombre de couches d'oscillateur considérés, qui fixe le nombre d'états considéré, on parle également de taille de base. Ce paramètre est fondamental pour s'assurer de la stabilité des solutions numériques. Il faut trouver un compromis entre un nombre de couche élevé impliquant un important temps de calcul et un nombre de couche faible pouvant fausser les résultats. Pour se convaincre de l'influence de ce paramètre on représente en Figure H.1 l'influence du nombre d'états d'oscillateur.



FIGURE H.1 – Évolution de l'énergie du 20 Ne lorsque l'on augmente β_2 pour différents nombres de couches d'oscillateur Nf

Dans le cadre de cette thèse la stabilité d'un calcul vis-à-vis du nombre de couche est considérée comme obtenue si l'énergie du fondamental ne varie pas de plus de 500 keV lorsque l'on change le nombre de couche. Dans le cas présenté ici, on pourrait se limiter à un calcul à 7 couches d'oscillateur. Un autre paramètre majeur est l'énergie caractéristique de la base $\hbar\omega$, qui dans l'idéal devrait être fixé de manière à minimiser l'énergie de l'état fondamental, on peut constater en Figure H.2 l'impact de ce paramètre, la valeur optimale correspondant dans ce cadre à $\hbar\omega = 8$



FIGURE H.2 – Évolution de l'énergie du ²⁰Ne lorsque l'on augmente β_2 pour différentes valeurs de $\hbar\omega$, le nombre de couches étant fixé à 8.

L'optimisation de ce paramètre est plus complexe est s'effectue pour l'instant empiriquement, toutefois l'adaptation d'algorithmes génétiques permettrait de s'assurer de l'optimisation de ce paramètre. Annexe I

Cosmologie et physique nucléaire

S

Lorentz-symmetry test at Planck-scale suppression with nucleons in a spin-polarized ¹³³Cs cold atom clock

H. Pihan-Le Bars,^{1,*} C. Guerlin,^{1,2,†} R.-D. Lasseri,³ J.-P. Ebran,⁴ Q. G. Bailey,⁵ S. Bize,¹ E. Khan,³ and P. Wolf¹

¹SYRTE, Observatoire de Paris, PSL Research University, CNRS, Sorbonne Universités,

UPMC University Paris 06, LNE, 75014 Paris, France

²Laboratoire Kastler Brossel, ENS-PSL Research University, CNRS, UPMC-Sorbonne Universités,

Collége de France, 75005 Paris, France

³Institut de Physique Nucléaire, Université Paris-Sud, IN2P3-CNRS, F-91406 Orsay Cedex, France ⁴CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

⁵Embry-Riddle Aeronautical University, 3700 Willow Creek Road, Prescott, Arizona 86301, USA (Received 12 December 2016; published 21 April 2017)

We introduce an improved model that links the frequency shift of the ¹³³Cs hyperfine Zeeman transitions $|F = 3, m_F\rangle \leftrightarrow |F = 4, m_F\rangle$ to the Lorentz-violating Standard Model extension (SME) coefficients of the proton and neutron. The new model uses Lorentz transformations developed to second order in boost and additionally takes the nuclear structure into account, beyond the simple Schmidt model used previously in Standard Model extension analyses, thereby providing access to both proton and neutron SME coefficients including the isotropic coefficient \tilde{c}_{TT} . Using this new model in a second analysis of the data delivered by the FO2 dual Cs/Rb fountain at Paris Observatory and previously analyzed in [1], we improve by up to 13 orders of magnitude the present maximum sensitivities for laboratory tests [2] on the \tilde{c}_Q , \tilde{c}_{TJ} , and \tilde{c}_{TT} coefficients for the neutron and on the \tilde{c}_Q coefficient for the proton, reaching respectively 10^{-20} , 10^{-17} , 10^{-13} , and 10^{-15} GeV.

DOI: 10.1103/PhysRevD.95.075026

I. INTRODUCTION

Our best current fundamental theories, General Relativity and the Standard Model of particle physics, are not expected to be valid at the Planck scale, where presumably a theory of quantum gravity holds. This, among other motivations, has given rise to the study of unified theories such as string theory or theories of quantum gravity such as loop quantum gravity. The Planck-scale energy E_P is on the order of 10^{19} GeV, and the highest-energy experiments or observations are well below this scale (ultrahigh-energy cosmic rays have energy lower than 10^{11} GeV). So testing these theories has been displaced to low-energy scales, where suppressed relics from Planck-scale physics may be observable, resulting in deviations from known physics.

There has been widespread interest in the last two decades in searching for such deviations, particularly among the so-called quantum gravity phenomenology [3–7]. Of the possible deviations from known physics, a central one is the breaking of the continuous space-time symmetries: Lorentz symmetry, which is the invariance under three rotations and three boosts (shown to be also

*Corresponding author. helene.pihan-lebars@obspm.fr

[†]Corresponding author.

associated with the discrete charge, parity, time-reversal (*CPT*) symmetry in Refs. [8–10]). Observable spontaneous breaking of these two symmetries could for example arise in string field theory, as was suggested nearly three decades ago [11,12].

A widely used effective field theory describing Lorentz invariance violations (LIVs) and CPT violations is the Standard Model extension (SME) [2,13–15]. Under the conservative physical assumptions of energy-momentum conservation and observer Lorentz invariance, the SME introduces all possible Lorentz- and CPT-violating tensor operators in the Lagrange densities of the Standard Model (and General Relativity), parametrized by coefficients. These coefficients can be seen as background tensor fields that are constant in space-time on the scale of solar system experiments and lead to a fundamentally different LIV approach than, e.g., space- or time-varying scalar field approaches [16-19]. They are allowed to be species dependent and vanish in the case of perfect Lorentz and CPT symmetry. As a test framework, the SME does not predict values of the coefficients. However, they are generally expected to be suppressed by a power of E/E_P increasing with the dimension of the associated LIV operator, where E is a cutoff energy. In Ref. [20], E has been taken as the electroweak energy ($E_{ew} \sim 10^2 \text{ GeV}$), leading to suppressions by a power of 10^{-17} .

christine.guerlin@lkb.ens.fr

H. PIHAN-LE BARS et al.

We focus here on the matter sector (electron, proton, and neutron) of the minimal SME (mSME) which includes Lorentz-violating operators of mass dimensions 3 and 4 in the Lagrange density.¹ Many of the coefficients are already constrained at or below their expected suppression [2]. Among still poorly constrained coefficients in this sector are, however, several components of the CPT-even, traceless, and symmetric $\bar{c}_{\mu\nu}$ tensor, namely \tilde{c}_{TT} for the proton and neutron (10⁻¹¹ GeV for laboratory experiments), \tilde{c}_{TJ} for the neutron (10⁻⁵ GeV), and \tilde{c}_Q for the neutron (10^{-14} GeV) , where indices (T, X, Y, Z) refer to the coordinates in the Sun centered celestial equatorial frame (SCF). In this study, reanalyzing with a more complete model the data taken in Ref. [1] on spin-polarized transitions in a ¹³³Cs fountain clock, we bring the bounds for all these coefficients below or near one Planck-scale suppression (i.e., 10^{-17} GeV), thereby improving them by up to 13 orders of magnitude. We constrain for the first time independently all $\bar{c}_{\mu\nu}$ components simultaneously. We find no evidence for Lorentz violation, which challenges suppressions generally expected from quantum gravity phenomenology or helps set limits on the cutoff energy E ([23–26]).

II. METHODS SUMMARY

Our generic approach is the following. LIV is manifested in our experiment as an anisotropy of the nucleons dispersion relation. Two states with a different nuclear momentum quadrupole moment undergo a different LIV energy shift, giving rise to a boost- and orientationdependent shift of the transition frequency. We measure directly this frequency shift by interferometry on atomic wave functions, using the usual clock Ramsey interrogation sequence but applied on spin-polarized states.

A Lorentz transformation allows us to express this lab LIV frequency shift in terms of the $\bar{c}_{\mu\nu}$ coefficients in an inertial frame (usually taken for Solar System experiments as the SCF, i.e., the Solar System rest frame). It combines a rotation, which gives sensitivity to \bar{c}_{JK} coefficients, and boosts, giving sensitivity to \bar{c}_{TJ} (suppressed by one order in boost) and to the isotropic \bar{c}_{TT} coefficient (suppressed by two orders in boost). The latter corresponds to an overall rescaling of energies, which gives rise to time variations at sidereal frequency and annual sidebands in the case of the lab frame. It can also be constrained using fast-moving particles; in that case, the observability of \bar{c}_{TT} depends on the velocity of the particles themselves. However, in laboratory experiments, the velocity of the particles can be neglected in comparison with the lab boost. LIV observables being usually expressed only to order 1 in boost, this coefficient has mostly been dismissed so far in this type of test and is consequently among the less constrained coefficients of the $\bar{c}_{\mu\nu}$ tensor. Its current best limits are set by its gravitational effects; for nucleons, torsion balance experiments bring a constraint on a linear combination involving this coefficient, at the 10^{-11} GeV level [2]. This gravitational LIV shift is negligible for hyperfine transitions, so without loss of generality, the clock observable is derived here in flat space-time.

We use a setup usually operated as a Cs fountain clock contributing to Temps Atomique International (TAI) in nonmagnetic ($m_F = 0$) states. For testing the SME, it has been operated on magnetized ($m_F \neq 0$) states to allow LIV tests during two periods respectively of 21 and 14 days at half a year interval. The two data sets were already analyzed in Ref. [1] and led to five new independent constraints on eight components of the proton $\bar{c}_{\mu\nu}$ tensor. In this second analysis, our advanced mSME model allows us to disentangle the nine components and provides new limits on the isotropic component \bar{c}_{TT} which was not included in the previous analysis.

We also introduce an alternative calculation of the nuclear quadrupole moment, also investigated in Refs. [27] and [28], to address the shortcomings of the usual Schmidt shell model considered so far in the derivation of SME clock observables, which only takes into account a single nucleon contribution [29] and therefore does not provide a realistic description of the nucleus for most atoms. The calculations are performed with self-consistent relativistic mean field (SCRMF) theory, which allows us to go beyond the single nucleon model and to calculate both the neutron and proton contributions to the nuclear quadrupole moment involved in the SME LIV shift.

In Sec. III, we recall the main features of the description of alkali hyperfine transitions in the SME and our experimental setup. This section is kept brief as details are known in the literature and can be found in the cited references. We then describe in Sec. IV the transformation to the Sun centred frame including the second order boost and the resulting model for our experiment, with some of the details relegated to an Appendix. After a description of our data analysis in Sec. V, we first present in Sec. VI our results using the Schmidt nuclear model, as is usual in SME analyses, in order to facilitate comparison with previous results from this and other experiments. We then briefly describe the SCRMF nuclear calculations (Sec. VII) and provide in Sec. VIII our constraints based on this nuclear model. Section IX is devoted to a general discussion with conclusions and perspectives in Sec. X.

III. SME FREQUENCY SHIFT IN THE LAB FRAME FOR ALKALI HYPERFINE TRANSITIONS AND EXPERIMENTAL SETUP

Treating in all generality the SME shift on an atomic transition includes curved space-time, eight mSME tensors, and summing over all electrons and nucleons. As shown

¹A detailed discussion of the questions of locality, causality, and stability can be found in Ref. [21].

LORENTZ-SYMMETRY TEST AT PLANCK-SCALE ...

previously (Refs. [29–31]), treated as a perturbation to usual hyperfine energy levels in alkali, LIV gives rise to a dipolar shift (parametrized in the SME by the \bar{b}_{μ} , $\bar{d}_{\mu\nu}$, and $\bar{g}_{\lambda\mu\nu}$ tensors) and a quadrupolar shift (parametrized by the $\bar{c}_{\mu\nu}$ tensor). The dipolar SME shift of a $|F, m_F\rangle$ state is proportional to m_F . In the specific linear combination of transition frequencies used as the observable, following the approach of Ref. [1], the linear dependence in m_F of our observable is nullified in order to reduce systematic shifts from magnetic fields. Our test is thus sensitive only to the quadrupolar shift, which we detail hereunder.

As shown previously (Refs. [29–31]), hyperfine states of alkali atoms are affected by a LIV quadrupolar energy shift given in curved space-time by the expectation value of the operator $\sum_{w} \delta \hat{H}_{w}$ with w = p, n, e for the proton, neutron, and electron, where for each particle

$$\delta \hat{H} = \frac{2U}{3c^2} \bar{c}_{tt} \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{1}{6m} C_0^{(2)} \hat{\mathcal{P}}_0^{(2)}.$$
 (1)

Here, we omitted the *w* index for the sake of simplicity. The Cartesian coordinate components are labeled with indices (t, x, y, z) and relate to the space-time lab frame; the direction *z* is taken along the quantization axis. *U* is the Newtonian gravitational potential, and \hat{p} and *m* are respectively the momentum operator and the mass of the particle. The spherical tensor component $\mathcal{T}_q^{(r)}$ associated with a tensor $\mathcal{T}_{\mu\nu}$ is used here for a compact formulation, with *r* its rank and $q \in (-r, ..r)$ the index of its spherical components. The $\mathcal{T}_0^{(2)}$ component appearing here is linked to the Cartesian coordinates via $\mathcal{T}_0^{(2)} = \mathcal{T}_{jj} - 3\mathcal{T}_{zz}$ with the convention of summation over like indices. This notation is used both for tensors $\mathcal{C}_{ij} = \bar{c}_{ij}$ and $\hat{\mathcal{P}}_{ij} = \hat{p}_i \hat{p}_j$:

$$C_0^{(2)} = \bar{c}_{jj} - 3\bar{c}_{zz} \tag{2}$$

$$\hat{\mathcal{P}}_0^{(2)} = \hat{\boldsymbol{p}}^2 - 3\hat{p}_z^2.$$
(3)

The first term of the quadrupolar LIV operator in Eq. (1) leads to an anomalous gravitational redshift [31]. It has been used in the analysis of the spectroscopy of an electronic transition in dysprosium to provide a gravitational constraint on the electron \bar{c}_{TT} coefficient [32]. This anomalous redshift scales as the differential internal kinetic energy between two states; therefore, it is relevant for electronic transitions, but it is negligible for transitions between hyperfine states, which differ essentially via the relative orientation of the nuclear and electronic spin. So this contribution plays a negligible role and will be ignored in the following.

The second term scales with the quadrupole moment operator of the momentum and can be regarded as an anisotropy of each particle's kinetic energy. It is governed by the quadrupole moment of the $\bar{c}_{\mu\nu}$ tensor, which is

usually, in the mSME, expressed in terms of energy for each particle by

$$\tilde{c}_q = mc^2 \mathcal{C}_0^{(2)}.\tag{4}$$

In an atomic hyperfine state $|F, m_F\rangle$, the perturbative energy shift contribution from each particle is therefore proportional to the expectation value of the momentum quadrupole moment operator $\langle F, m_F | \hat{\mathcal{P}}_0^{(2)} | F, m_F \rangle$, which using the Wigner-Eckart theorem can be expressed as a function of the expectation value in the extremal $m_F = F$ state $\langle F, F | \hat{\mathcal{P}}_0^{(2)} | F, F \rangle$ with a prefactor \tilde{m}_F (following the notation of Ref. [29]):

$$\widetilde{m}_F = \frac{\langle F, m_F | \hat{\mathcal{F}}_0^{(2)} | F, m_F \rangle}{\langle F, F | \hat{\mathcal{F}}_0^{(2)} | F, F \rangle}$$
(5)

$$=\frac{F(F+1)-3m_F^2}{F(F+1)-3F^2}.$$
(6)

This is a Clebsch-Gordan coefficient involving the quadrupole moment operator $\hat{\mathcal{F}}_0^{(2)} = \hat{F}^2 - 3\hat{F}_z^2$ of the tensor $\hat{F}_i\hat{F}_j$ with F the total magnetic moment of the atomic state; it does not depend on the considered particle within the atom.

Summing from Eq. (1) over all particles, the total LIV perturbative energy shift of a state $|F, m_F\rangle$ can therefore be expressed as

$$\delta E = \widetilde{m}_F \sum_{w} \gamma^w \widetilde{c}_q^w \tag{7}$$

with particle-dependent dimensionless scaling factors

$$\gamma^{w} = \frac{M_{20}^{w}}{6m_{w}^{2}c^{2}} \tag{8}$$

which are proportional to the total momentum quadrupole moment from the N_w particles of type w:

$$M_{20}^{w} = -\sum_{N=1}^{N_{w}} \langle F, F | \hat{\mathcal{P}}_{0,w,N}^{(2)} | F, F \rangle.$$
(9)

The analysis is performed using the data obtained from the ¹³³Cs and ⁸⁷Rb dual fountain FO2 (see Fig. 1), operating at the Paris Observatory, already used in Ref. [1]. An atomic gas is laser cooled and launched upward on a ballistic trajectory. The desired $|F, m_F\rangle$ initial state is prepared in the selection cavity, and remaining atoms in other states are pushed away by a push beam. A microwave cavity allows us to perform a Ramsey interferometry sequence as the atoms pass through its mode successively during their upward and downward passages. For further experimental details, we refer the reader to an abundant body of literature (e.g., Refs. [33,34]).



FIG. 1. Schematic view of an atomic fountain, from Ref. [35].

Our data consist of two measurement sets of 21 and 14 days duration, taken respectively in April and September 2005. During the experiment, the fountain was run in Cs mode, which interrogates transitions between the F = 3 and F = 4 hyperfine levels of the ground state $6^2S_{1/2}$, with a magnetic field oscillating at 9.2 GHz. It was interrogated alternatively on three $|3, m_F\rangle \leftrightarrow |4, m_F\rangle$ transitions with $m_F = +3, -3$, and 0, of respective frequencies ν_{+3}, ν_{-3} , and ν_0 .

The quantization magnetic field is vertical. The rotational and orbital motion of the Earth then provides a change of the orientation of this axis, as well as of the laboratory boost, with respect to the Sun centered frame (see Sec. IV). In the presence of LIV, this would result in a time variation of the particles kinetic energy anisotropy and therefore in a time-varying quadrupole shift of the atomic level energies described by Eq. (7).

From Eq. (7), the frequency shift of a $|F = 3, m_F\rangle \Leftrightarrow$ $|F = 4, m_F\rangle$ transition can be calculated through the differential energy shift between the two levels [30]. We use a combination of hyperfine transition frequencies, $\nu_c =$ $\nu_{+3} + \nu_{-3} - 2\nu_0$ already used in Ref. [1], which preserves the sensitivity to the quadrupolar LIV shift while canceling magnetic perturbations from the first order Zeeman effect. From Eq. (7), it can be shown that the LIV frequency shift of this observable is [30]

$$\delta\nu_c = -\frac{9}{7h} [\gamma^p \tilde{c}_q^p + \gamma^n \tilde{c}_q^n], \qquad (10)$$

with an overall scaling $9/7h = 3.1 \times 10^{23}$ Hz/GeV for SME coefficients expressed in GeV. Here γ^{w} is defined as in Eq. (8) but with the momentum quadrupole moment expectation value M_{20}^{w} in Eq. (9) taken in the $|I, I\rangle$ state.

PHYSICAL REVIEW D 95, 075026 (2017)

It is not sensitive to the electron SME coefficients. Indeed, closed shells do not contribute [29], and the symmetry of the orbital of the valence electron is spherical since its orbital angular momentum in the state $6^2 S_{1/2}$ is L = 0; this leads a zero value of the momentum quadrupole moment in Eq. (9). Our experiment thus offers a test of LIV sensitive only to nucleons, allowing us to give constraints decorrelated from the electron LIV coefficients. The frequency shift is related to each nucleon SME coefficient through a dimensionless factor γ^{w} via the nucleon momentum quadrupole moment M_{20}^{w} [Eq. (8)] obtained from the nuclear model [Eq. (9)]. The explicit dependence for each nucleon thus requires the choice of a nuclear model, for which there is no simple description for heavy nuclei such as ¹³³Cs. We address this question further in Secs. VI and VII. In the rest of the paper, all references to notations γ^{w} , M_{20}^{w} , and to Eqs. (8) and (9) are meant, as in Eq. (10), with the momentum quadrupole moment expectation value M_{20}^w taken in the $|I, I\rangle$ state.

IV. TIME VARIATION IN THE SUN CENTERED FRAME WITH SECOND ORDER BOOST

As the lab frame rotates and moves around Earth and Sun, periodic modulations of the clock frequency appear when each lab frame SME coefficient \tilde{c}_q^w in Eq. (10) is expressed in terms of the SCF SME coefficients. The latter are supposed constant at the time scale of our experiment, since the SCF has a rectilinear uniform motion with respect to a cosmological frame like the one given by the cosmic microwave background. The SCF celestial frame, defined in Ref. [36], is conventionally used to report SME results and to compare them. If \mathfrak{T} is the Lorentz transformation from the SCF to the lab frame for a covector, the tensor component \bar{c}_{ij} in the lab frame is the following combination of the tensor components in the SCF,

$$\bar{c}_{ij} = \mathfrak{T}_i^{\Pi} \mathfrak{T}_j^{\Gamma} \bar{c}_{\Pi\Gamma}, \qquad (11)$$

where Π , Γ are indices spanning the SCF coordinates (T, X, Y, Z). As described in Ref. [30], \mathfrak{T} is the composition of a Lorentz boost Λ followed by a rotation R. The Lorentz boost Λ involves the Earth's orbital boost which varies with annual frequency Ω and the lab boost due to the Earth's rotation varying at sidereal frequency ω , with respective magnitude $\beta_{\oplus} \sim 10^{-4}$ and $\beta_l \sim 10^{-6}$ (ratio of velocity to speed of light). The rotation is due to Earth's rotation, at sidereal frequency. The generic expressions of Λ and \mathfrak{T} are given respectively in Eqs. (A1) and (A4) in Appendix A.

In the previous analysis [1] (as well as in most of the previous literature, e.g., Refs. [29,30]), the boost matrix Λ was approximated at first order of its Taylor expansion in β and included only the dependence in the Earth's orbital boost β_{\oplus} . This $O(\beta)$ model led to stringent constraints on eight of the nine independent components of $\bar{c}_{\mu\nu}$ of the proton, improving state-of-the-art constraints by up to 13 orders of magnitude. The ninth one, the isotropic

coefficient \bar{c}_{TT} , is suppressed by a factor β^2 and thus did not appear in this first order model.

The main motivation of the present analysis is that the high improvement demonstrated by these first results, based on the intrinsic high sensitivity of cold atom clocks, can also benefit the more suppressed \bar{c}_{TT} terms. Since the suppression arises from the pure timelike nature of the \bar{c}_{TT} coefficient, the constraint is expected to be less stringent, but this coefficient is the less constrained from other nongravitational experiments as well. In this analysis, we developed an improved SME model of our observable, which, using a second order boost expression of Eq. (10) in the SCF, includes the \bar{c}_{TT} coefficient. This approach has also been used previously in spectroscopy in Ref. [32] to constrain electron $\bar{c}_{\mu\nu}$ coefficients. Initially, our model contained all the terms up to $O(\beta^2)$ for the nine independent components of $\bar{c}_{\mu\nu}$, but as they do not provide any valuable contribution to the analysis, they are neglected, except for the \bar{c}_{TT} coefficient. More details on this derivation and a summarized version of the model can be found in Appendix A (Table V).

The Lorentz-violating signal with this $O(\beta^2)$ model includes sinusoidal variations at base frequencies $\{0, \omega, 2\omega\}$ associated with sidebands at annual frequency Ω as for the first order model and new sidebands at 2Ω . It exhibits in total 13 frequency components (25 quadratures), instead of 3 frequency components (5 quadratures) for the previous analysis which did not include the annual frequency nor the second order terms.

SCF $\bar{c}_{\mu\nu}$ components appear as nine observable combinations, which as usually in the SME are given rescaled by the rest mass energy of the particle and will be referred to in the following as [2]

$$\tilde{c}_Q = mc^2(\bar{c}_{XX} + \bar{c}_{YY} - 2\bar{c}_{zz})$$

$$\tilde{c}_- = mc^2(\bar{c}_{XX} - \bar{c}_{YY})$$

$$\tilde{c}_J = mc^2(\bar{c}_{KL} + \bar{c}_{LK})$$

$$\tilde{c}_{TJ} = mc^2(\bar{c}_{TJ} + \bar{c}_{JT})$$

$$\tilde{c}_{TT} = mc^2\bar{c}_{TT}$$
(12)

where J, K, L are indices spanning spatial SCF coordinates (X, Y, Z). The index w referring to the flavor of the particle (proton or neutron) has been omitted here for the mass m and the tensor components.

V. DATA ANALYSIS

The data processing is performed using a weighted leastsquares adjustment² of the data used in Ref. [1] to the $O(\beta^2)$ model. In our observable in Eq. (10), \bar{c}_q^w is expressed in terms of the SCF SME coefficients as described in Sec. IV, and the flavor-dependent scaling factor γ^w value is set from the considered nucleus model, as will be described in Secs. VI and VII. From our measurements of ν_c , we then adjust directly all nine independent SCF combinations given in Eq. (12), without intermediate steps as, e.g., on the Fourier basis. As the data show white noise behavior (see Ref. [1]), the least-squares method provides robust limits on SME coefficients. Our 3 mHz data standard deviation averages over the two data sets down to a resolution of 60 μ Hz on the amplitude of a sinusoidal deviation, which sets the bottom limit of statistical sensitivity of our test as in Ref. [1].

The main systematic effects which are not already corrected in the clock data, as detailed in Ref. [33], are the Zeeman frequency shifts. For the frequency combination in Eq. (10), the second order Zeeman effect, proportional to B^2 with B the magnetic field, adds up to an overall shift of -2 mHz for our data. The variations of this term due to magnetic field fluctuations lie well below our frequency resolution; as in Ref. [1], this shift is therefore considered as constant, and the measured value of ν_c is corrected for this constant offset prior to the SME model adjustment.

The first order Zeeman shift, proportional to *B*, is theoretically rejected in the combined observable ν_c . However, atoms with $m_F = +3$ and $m_F = -3$ follow slightly different trajectories, which in the presence of magnetic field inhomogeneities results in the incomplete cancellation of the first order Zeeman shift in ν_c . The residual shift can be estimated using the time of flight (TOF) of the atoms in the fountain, measured periodically during the clock operation for each data set. As described in Ref. [1], the TOF data exhibit a systematic difference of 158 μ s between the $m_F = +3$ and $m_F = -3$ atomic clouds; a Monte Carlo simulation allows us to constrain the corresponding residual first order Zeeman shift of ν_c to a conservative estimate of 0 ± 25 mHz [1].

As this dominant systematic effect is susceptible to varying with temperature at daily and annual frequency, it could mimic nonzero SME coefficients. To assess this systematic bias, we use the upper limit of the above calibration to convert TOF data to worst-case frequency shift data, which we adjust with the $O(\beta^2)$ model by weighted least squares. We obtain an amplitude for each SME coefficient (noted X_{TOF}^i) with a statistical uncertainty σ_{TOF}^i . The obtained amplitude is an upper bound in absolute value; we therefore estimate the systematic bias at zero and the systematic variance at $(X_{\text{TOF}}^i)^2 + (\sigma_{\text{TOF}}^i)^2$.

To obtain the total variance-covariance matrix of the estimated SME coefficients, we sum the statistical (clock

²Because the data are dominated by white noise (see Ref. [1]), ordinary least-squares fitting is well adapted for our analysis.

³For simplicity, we neglect the cross term $2X_{\text{TOF}}^{i}\sigma_{\text{TOF}}^{i}$ since the systematics fit results show only either highly significant values or highly nonsignificant values.

H. PIHAN-LE BARS et al.

data) and systematic (TOF data) matrix elements, in which the systematic variances are defined as above. The values and uncertainties for SME coefficients depend on the nucleus model considered and will be presented for the Schmidt nuclear model in Sec. VI and using a more realistic nuclear model in Sec. VIII. The detailed discussion is in Sec. IX.

VI. RESULTS BASED ON THE SCHMIDT NUCLEAR MODEL

From the sensitivity in frequency variation of our data set (Sec. V), the corresponding sensitivity on SME coefficients depends on the value of the scaling factors $\gamma^{p,n}$ [Eq. (10)] which are proportional to the momentum quadrupole moment of the nucleons in the extremal state $|I, I\rangle$ from Eq. (8) and Eq. (9). As an exact calculation is typically not feasible, different simplification levels can be used. A simplified description of the nucleus is given by the Schmidt model, which has so far been used in many cases when reporting SME constraints from atomic spectroscopy. It relies on a shell description of the nucleus. With an odd number of protons (55) and an even number of neutrons (78) in the nucleus of ¹³³Cs atoms, a shell model leads to closed neutron shells and to a single valence proton. In the Schmidt description, this nucleon carries the entire magnetic moment of the nucleus which is involved in the hyperfine splitting. The expectation values in Eq. (9), which in principle have to be summed over all nucleons, reduce in this description to the expectation value for this single proton and to an overall zero value from the neutrons [29]: $\gamma^n = 0$. With this nucleus model, the only constraints we can extract from our data are thus on proton coefficients. In the SME article on clocks [30] and in the first data analysis [1], the approximated value of γ^p has been taken as $\gamma^p = -1.1 \times 10^{-3}$, leading to an expected maximum resolution on \tilde{c}^p_{O} of approximately $2\times 10^{-25}~{\rm GeV}$ using the



FIG. 2. Correlation matrix of the $\tilde{c}^{\mu}_{\mu\nu}$ components. The matrix includes the statistic correlations (least-squares fitting of the data) and the systematic correlations (TOF), as described in Sec. V.

PHYSICAL REVIEW D 95, 075026 (2017)

TABLE I. Limits on SME Lorentz-violating parameters $\tilde{c}_{\mu\nu}^p$ for the proton, in GeV, when using the Schmidt model. The measured values and total uncertainties are shown together with the statistical (first bracket) and systematic (second bracket) uncertainties. These limits are obtained using a complete least-squares adjustment of the $O(\beta^2)$ model to the Cs fountain data. Constraints improved compared to state-of-the-art laboratory limits are displayed in bold, with the improvement factor in orders of magnitude in brackets. Note that previous constraints from Ref. [1] did not determine all coefficients independently (cf. Sec. IX B).

| Coefficient | Value and uncertainty | Unit (GeV) | Previous bound (GeV) |) Ref. |
|--|---|--------------------------|--------------------------------------|------------|
| $\tilde{c}^p_{\mathbf{Q}}$ | $-0.3 \pm 2.1 (10^{-2}) (2.1)$ | 10^{-22} | 2210^{-22} | [1] |
| $c_{\underline{r}}^{p}$ \tilde{c}_{X}^{p} | -1.5 ± 5.3 (0.7) (8.9) | 10^{-24} 10^{-24} | $2.8 \ 10^{-25}$ $1.2 \ 10^{-25}$ | [1] |
| \widetilde{c}_{Y}^{p} \widetilde{c}_{Z}^{p} | $\begin{array}{c} 0.8 \pm 1.6 & (0.3) & (1.6) \\ 1.0 \pm 3.9 & (0.8) & (3.9) \end{array}$ | 10^{-24} 10^{-24} | $1.2 10^{-25}$ $2.8 10^{-25}$ | [1] [1] |
| \tilde{c}_{TX}^p | -1.5 ± 5.7 (0.6) (5.7) 1.4 + 5.0 (0.2) (5.0) | 10^{-20} | 3.010^{-21} | [1] |
| c_{TY}^{\prime} \tilde{c}_{TZ}^{p} | -1.1 ± 3.5 (0.2) (3.5) | 10^{-20} 10^{-20} | 3.010^{-21} 2.010^{-21} | [1] |
| \tilde{c}_{TT}^p | $1.6 \pm 6.9 (0.9) (6.9)$ | 10 ⁻¹⁶⁽⁵⁾ | < 10 ⁻¹¹ | [31] |

frequency resolution given in Sec. V and the conversion factor expressed in Sec. III.

Using these $\gamma^{p,n}$ values, our analysis provides the bounds on the $\tilde{c}^{p}_{\mu\nu}$ components presented in Table I. They are all consistent with Lorentz symmetry. The uncertainties show an improvement by 5 orders of magnitude on the \tilde{c}^{p}_{TT} coefficient compared to the state-of-the-art laboratory constraints (Refs. [1,31]), reaching the 10⁻¹⁶ GeV scale. The correlation matrix is displayed on Fig. 2. It contains high values, except for the \tilde{c}^{p}_{Q} coefficient which is almost decorrelated at this sensitivity level. This indicates that the uncertainties contained in Table I are marginalized uncertainties dominated by those correlations and could thus be significantly improved with additional data spread over one year.

In addition to the correlation matrix, we provide confidence intervals on Fig. 3, which allow a synthetic view over significance levels, orders of magnitude, and correlations. We employ an analytical method developed in Ref. [37], which uses the covariance matrix to build confidence ellipses of which the semimajor axes are scaled by a given value of $\sqrt{\Delta \chi^2}$ depending on the required probability.⁴ Some of the ellipses show a strongly diagonal orientation, indicating the presence of correlations between the SME coefficients that are in agreement with the correlations visible in Fig. 2.

In Appendix C, we provide an alternative, but entirely equivalent, description of the results under the form of

⁴Here, $\Delta \chi^2$ is the difference between the χ^2 value at a given point in the parameter plane and the one of the best fit solution.

LORENTZ-SYMMETRY TEST AT PLANCK-SCALE ...



FIG. 3. Confidence ellipses of the $\tilde{c}^{\rho}_{\mu\nu}$ components, when using the Schmidt model. The red, blue, and green confidence ellipses correspond respectively to the 68.3%, 90%, and 95.4% confidence regions. The purple square is the position of the leastsquares solution. Axis labels give the 95.4% confidence intervals in GeV, the respective orders of magnitude of which are given in the upper right box. Horizontal and vertical blue lines at zero value allow us to visualize the absence of significance in the results.

independently constrained linear combinations of coefficients. These combinations are obtained from the singular value decomposition (SVD) of the covariance matrix, meaning that they are the set of orthonormal vectors (in the Euclidean sense) that diagonalize the covariance matrix. Having no correlation between these combinations implies that the uncertainty is not degraded and thus reaches a lower value as can be seen in Table VI, typically decreased by a factor of 2. The linear combinations given in Table VII have dominant coefficients; the corresponding constraints can thus be regarded as the "maximal sensitivity" on this coefficient from our data, in the sense commonly used when reporting SME constraints [2].

VII. SCRMF NUCLEAR MODEL

A. Relativistic mean field formalism

Recent developments in nuclear physics have attracted a renewed interest in the effects of Lorentz violation in atomic and nuclear physics [27,28]. Following this trend, we compute the nuclear matrix elements in the $|I, I\rangle$ state, in particular the ones required for the determination of γ^w [Eqs. (7), (8) and (10)], in a fully microscopic way using a state-of-the-art nuclear structure approach. This allows us

PHYSICAL REVIEW D 95, 075026 (2017)

to go beyond the single nucleon model and to calculate both the neutron and proton contributions to the nuclear matrix elements. The theoretical framework used here is the relativistic energy density functional which is particularly suited to describe nuclear structure properties in great depth [38]. In this approach, the nucleus is described in terms of nucleons considered as pointlike Dirac particles, while the interaction among them is described by an exchange of mesons. Thus, one may construct in a fully covariant way a phenomenological Lagrangian density which conserves the symmetries of the nuclear interaction:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} \left[i \gamma^{\mu} \partial_{\mu} - m - g_{\sigma} \sigma - g_{\omega} \gamma_{\mu} \omega^{\mu} - g_{\rho} \gamma_{\mu} \vec{\rho} \cdot \vec{\tau}^{\mu} \right. \\ \left. - g_{\pi} \gamma_{5} \gamma_{\mu} \partial^{\mu} \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} - e \gamma_{\mu} A^{\mu} \left(\frac{1 - \tau_{3}}{2} \right) \right] \psi \\ \left. + \frac{1}{2} (\partial_{\mu} \sigma \partial^{\mu} \sigma - m_{\sigma}^{2} \sigma^{2}) - \frac{1}{2} (\Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} - m_{\omega}^{2} \omega_{\mu} \omega^{\mu}) \right. \\ \left. - \frac{1}{4} \vec{\mathcal{R}}_{\mu\nu} \vec{\mathcal{R}}^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_{\rho}^{2} \vec{\rho}_{\mu} \cdot \vec{\rho}^{\mu} + \frac{1}{4} \partial_{\mu} \vec{\pi} \partial^{\mu} \vec{\pi} + \frac{1}{2} m_{\pi}^{2} \vec{\pi}^{2} \right. \\ \left. - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \right.$$
(13)

In this section, we use natural units (i.e., c = 1 and $\hbar = 1$) for compactness of the notation. The arrows symbolize vectors of the isospin SU(2) space. ψ is a Dirac 4-spinor describing a nucleon of mass m, while γ_{μ} denotes the usual Dirac matrices, and τ_i denotes the isospin Pauli matrices. In Eq. (13), the nucleons interact by the exchange of { σ, ρ, ω and π } mesons, while the Coulombian interaction is taken into account by the 4-potential A^{μ} . The self-interaction of each mesonic field is expressed using the field strength tensors $\Omega^{\mu\nu}$ and $\mathcal{R}^{\mu\nu}$, while $F^{\mu\nu}$ is the usual electromagnetic field tensor associated with the photon. The coupling constants of (13) are then fitted in order to accurately reproduce the binding energies of a set of benchmarking nuclei [39].

Performing a Legendre transform of (13) yields the Hamiltonian of the problem

$$\mathcal{H} = \int d^3 x \,\bar{\psi} [i\nabla + m] \psi + \frac{1}{2} \int d^3 x \,\bar{\psi} \left[g_\sigma \sigma + g_\omega \gamma_\mu \omega^\mu + g_\rho \gamma_\mu \vec{\rho} \cdot \vec{\tau}^\mu + g_\pi \gamma_5 \gamma_\mu \partial^\mu \vec{\pi} \cdot \vec{\tau} + e \gamma_\mu A^\mu \left(\frac{1 - \tau_3}{2} \right) \right] \psi.$$
(14)

The relativistic energy density functional is computed by taking the expectation value of (14) on the vacuum state $|\Phi_0\rangle$,

$$\mathcal{E}[\rho] = \langle \Phi_0 | \mathcal{H} | \Phi_0 \rangle, \tag{15}$$

while the density operator of the system is defined as

H. PIHAN-LE BARS et al.



FIG. 4. Nucleonic density of ¹³³Cs in fm⁻³, in the intrinsic frame. Left: 3D representation. Right: 2D projection.

$$\rho_{ij} = \frac{\langle \Phi_0 | c_j^{\dagger} c_i | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} \tag{16}$$

with c_i^{\dagger}/c_i being the nucleonic creation/annihilation operators. To compute the ground state energy, the variational principle is applied to (15). Neglecting the Fock exchange term leads to the relativistic Hartree-Bogoliubov (RHB) equations, solved in a self-consistent way in an axially deformed harmonic oscillator basis [39]. For a given nucleus, this model allows us to obtain its nuclear density in the nucleus intrinsic frame, as pictured on Fig. 4 for ¹³³Cs.

B. Nuclear quadrupole moments

The solutions of the RHB equations give access to the density of the system. The moments of the multipolar expansion of the density describe the shape of the nucleus. For instance a non-null quadrupole moment in configuration space excludes spherical symmetry but may conserve an axial symmetry. The quadrupole moment in momentum space M_{20}^{ψ} can be directly related to the γ^{ψ} parameters by Eq. (8).

In the intrinsic frame of the nucleus, the usual quadrupolar distribution is expressed in configuration space as

$$\tilde{Q}_{20}^{w} = \langle \Phi_0 | (3z^2 - r^2) | \Phi_0 \rangle = \text{Tr}[\rho(3z^2 - r^2)], \quad (17)$$

while in momentum space

$$\tilde{M}_{20}^{w} = \langle \Phi_0 | (3p_z^2 - \vec{p} \cdot \vec{p}) | \Phi_0 \rangle.$$
(18)

In a final step, we project the quadrupole moments into the laboratory frame using

$$Q_{20}^{w} = \frac{3K^2 - I(I+1)}{(I+1)(2I+3)}\tilde{Q}_{20}^{w},$$
(19)

where I is the nuclear spin of the considered nucleus and K is its projection onto the quantization axis. Note that (19) gives only an approximate value in the laboratory frame.

TABLE II. Quadrupolar moments in configuration (fm²) and momentum representation $(\hbar/fm)^2$ for ¹³³Cs.

| Functional | Q_{20}^{n} | Q_{20}^p | M_{20}^{n} | M_{20}^{p} | E (MeV) |
|------------|--------------|------------|--------------|--------------|---------|
| DD-PC1 | -2.6576 | -0.3578 | 0.0047 | 0.1135 | -1118.6 |
| DD-ME2 | -2.8083 | -0.3538 | 0.0024 | 0.1129 | -1117.7 |

For better accuracy, the complete projection of the RHB solutions on the correct total angular momentum needs to be performed, in the laboratory frame. This is out of the scope of the present paper but will be investigated in upcoming work using the generator coordinate method [40].

When comparing our results to the recently published ones in Ref. [28], which use a self-consistent mean field technique (SCMF), we note a good agreement (within a factor ~1.3) for M_{20}^p but very large discrepancies (up to a factor ~60) for Q_{20}^n and M_{20}^n . We ascribe this to the method used in Ref. [28] which is tailored for the proton contribution as it is based on the experimental value of Q_{20}^p and is thus likely to be only very approximate for the neutron quadrupole moments.

When carrying out our calculations for the atoms also studied in Ref. [27], we find a very good agreement for ²¹Ne (for the protons $Q_{\text{SCRMF}}^p = 9.5 \text{ fm}^2$ when $Q_{\text{SCMF}}^p = 9.7 \text{ fm}^2$, while the results are the same for neutron contribution) and results of the same order of magnitude for ¹³¹Xe and ²⁰¹Hg. The remaining differences are mainly due to the different methods used to constrain the computations.

In the case of ¹³³Cs, the number of protons (Z = 55) is odd; thus, the spin parity of the ground state is given by the valence proton. In the framework of the energy density functional, we use the usual half-filling approximation [41], enforcing the correct spin parity of the state, here I = $K^{\pi} = \frac{7}{2}^+$. The comparison of the experimental energy of the ground state ($E_{exp} = -1118.5$ MeV) to the RHB predictions is given in Table II, showing the good accuracy of the present approach. The quadrupolar moments in the laboratory frame for ¹³³Cs are given in Table II for two different parametrizations of the relativistic functional (15): DD-PC1 is a point-coupling interaction, while DD-ME2 takes into account the full finite range meson exchange and is more realistic.

A more detailed presentation and discussion of these calculations for different nuclei as well as comparisons between different methods will be the subject of a future publication.

VIII. RESULTS BASED ON THE SCRMF NUCLEAR MODEL

From the two nucleon interaction models considered in Sec. VII, we use the results of the DD-ME2 functional which are expected to be more realistic. From Eq. (8) and Table II, we obtain $\gamma^p = 8.32 \times 10^{-4}$ and LORENTZ-SYMMETRY TEST AT PLANCK-SCALE ...

 $\gamma^n = 1.76 \times 10^{-5}$. In this nuclear model, the neutron contribution is not neglected, unlike in the Schmidt model, so our experiment allows us to constrain also neutron LIV, but with a sensitivity scaled by γ^n about 2 orders of magnitude lower than for the proton. We cannot distinguish the relative nucleon contributions and are sensitive to the linear combinations $\tilde{c}^{p}_{\mu\nu} + 0.021 \tilde{c}^{n}_{\mu\nu}$. The limits on these SME coefficients combinations, given in Table III, are obtained by a straightforward rescaling of Table I from the Schmidt model, and consequently the correlation matrix stays the same as in Fig. 2 with the proton coefficients replaced by the above combinations. Since the individual constraints from proton and neutron cannot be disentangled, results for each nucleon can be expressed in terms of maximal sensitivity as defined in Ref. [2]. As shown in Table III, improvements on proton coefficients are equivalent to the ones presented for the Schmidt model. For the neutron coefficients, our results improve by 12 to 13 orders of magnitude over state of the art for the \tilde{c}_{TI} coefficients, 7 orders of magnitude for the \tilde{c}_Q coefficient, and 2 orders of magnitude for the \tilde{c}_{TT} coefficient, respectively down to 10⁻¹⁷, 10⁻²⁰, and 10⁻¹³ GeV.

IX. DISCUSSION

A. Comparison to previous works

Our results show large improvements on the isotropic coefficient \tilde{c}_{TT} for the proton with both nuclear models, as well as for several neutron coefficients for the relativistic nuclear model. With this model, by improving on the previous weakest limits, our analysis brings all $\tilde{c}_{\mu\nu}$ constraints for the proton and neutron below or much nearer to

TABLE III. Limits (1 sigma) on SME Lorentz-violating parameters $\tilde{c}^w_{\mu\nu}$ for the proton and neutron, in GeV, when using the SCRMF nuclear model. The last two columns show the corresponding maximal sensitivities on each nucleon as defined in Ref. [2] (2 sigma limits logarithmically rounded). In bold are the values which improve over the state-of-the-art laboratory limits published in the 2017 version of Ref. [2] and obtained with other experiments, with the improvement in orders of magnitude in brackets.

| Coefficient | Value and uncertainty | Unit (GeV) | \tilde{c}_{\max}^{p} (GeV) | \tilde{c}_{\max}^n (GeV) |
|---|-----------------------|---------------|------------------------------|----------------------------|
| $\tilde{c}^p_O + 0.021 \tilde{c}^n_O$ | 0.4 ± 2.8 | 10-22 | 10-21 | 10 ⁻²⁰⁽⁷⁾ |
| $\tilde{c}_{-}^{\tilde{p}} + 0.021 \tilde{c}_{-}^{\tilde{n}}$ | -0.2 ± 1.2 | 10^{-23} | 10^{-23} | 10^{-21} |
| $\tilde{c}_X^p + 0.021 \tilde{c}_X^n$ | 2.0 ± 7.0 | 10^{-24} | 10^{-23} | 10^{-21} |
| $\tilde{c}_Y^p + 0.021 \tilde{c}_Y^n$ | -1.1 ± 2.2 | 10^{-24} | 10^{-23} | 10^{-22} |
| $\tilde{c}_Z^p + 0.021 \tilde{c}_Z^n$ | -1.3 ± 5.2 | 10^{-24} | 10^{-23} | 10^{-21} |
| $\tilde{c}_{TX}^p + 0.021 \tilde{c}_{TX}^n$ | 2.0 ± 7.6 | 10^{-20} | 10^{-19} | $10^{-17(12)}$ |
| $\tilde{c}_{TY}^p + 0.021 \tilde{c}_{TY}^n$ | -1.8 ± 7.8 | 10^{-20} | 10^{-19} | $10^{-17(12)}$ |
| $\tilde{c}_{TZ}^p + 0.021 \tilde{c}_{TZ}^n$ | 1.4 ± 4.6 | 10^{-21} | 10^{-19} | $10^{-18(13)}$ |
| $\tilde{c}_{TT}^p + 0.021 \tilde{c}_{TT}^n$ | -2.2 ± 9.1 | 10^{-16} | $10^{-15(4)}$ | $10^{-13(2)}$ |

(for \tilde{c}_{TT}) Planck-scale suppression. All results presented in this paper are still consistent with Lorentz symmetry.

For the proton, results are equivalent with both considered nuclear models. Our improved LIV model including annual modulations and terms at order $O(\beta^2)$ in boost leads to a high sensitivity to \tilde{c}_{TT} that was not constrained by the previous analysis of our data.

The improvement on neutron coefficients comes from our new nuclear model that, unlike the Schmidt model, accounts for the sensitivity of our measurement to the neutron SME coefficients. The resulting limits on neutron coefficients are much less stringent than the ones from comagnetometers [42]. However, comagnetometer limits so far do not address the boost-dependent parts \tilde{c}_{TJ} and \tilde{c}_{TT} nor the spatial part \tilde{c}_Q , and this is where we provide large improvements. The previous \tilde{c}_Q limit was set recently from acoustic waves in quartz [22].

In Secs. VI and VIII, we compared our results on \tilde{c}_{TT} with those obtained through the SME Weak Equivalence Principle (WEP) test interpretation of torsion balance experiments [31]. This analysis, however, did not disentangle the isotropic component \tilde{c}_{TT} from the spatial component \tilde{c}_Q ; disentanglement has been done in Ref. [31] and weakens this upper bound by 3 orders of magnitude. So in this respect, the improvement factors of 10^4 and 10^2 displayed in Table III are conservative, since when comparing to this disentangled limit we rather improve by 7 orders of magnitude the constraint on \tilde{c}_{TT} for the proton and by 5 orders of magnitude that for the neutron.

The bounds for the proton and neutron shown in Secs. VI and VIII are compared with the best existing laboratory limits, despite the existence of stronger astrophysical constraints (Refs. [43–45]). The latter bring in particular a better double sided limit on \tilde{c}_{TT}^{p} than the one obtained with our analysis. However, these bounds involve model-dependent assumptions about distant astrophysical processes.

B. Role of the complete vs piecemeal analysis

In our approach (which we refer to hereafter as the "complete" analysis), the nine $\tilde{c}_{\mu\nu}$ coefficients are fitted simultaneously. Fitting over a data set with sufficient resolution for a sidereal period combined with a spread over half a year can enable us to discriminate all coefficients in a single fit, thanks to their contrasted spectral signatures. The uncertainty related to annual variation could, however, be strongly degraded by uncontrolled systematics. In our case, the robustness of the long term behavior of clocks, which are built to provide absolute frequency references, gives us access to annual variation with controlled systematic uncertainty.

This simultaneous fit is in contrast to the most common approach, referred to hereafter as a "piecemeal" analysis. In this approach, used, e.g., in Refs. [1] and [32], the SME model adjustment is made successively on separate subsets

H. PIHAN-LE BARS et al.

of parameters, assuming that they are independent and assigning in turn a zero expectation value for those not fitted. The drawbacks of this method are that it requires assumptions on the expectation values and that, by neglecting the correlation between parameters belonging to different subsets, it leads to an artificial decrease in the marginalized uncertainties and thereby to an underestimation of the individual parameter uncertainties. To illustrate this limit of the piecemeal analysis, we compared the results shown in Ref. [1], obtained using such an analysis with two subsets of parameters, and the results obtained with a complete and direct fitting of the same first order $O(\beta)$ model to the data. For both, the Schmidt model was used.

The results presented in Table IV show that, except for the \tilde{c}_Q^p coefficient of which the sensitivity is dominated by the systematics, the piecemeal analysis led to an underestimation of the uncertainties by a factor 6 to 20 in the previous analysis. That is why the constraints on the $\tilde{c}_{\mu\nu}^p$ coefficients presented in Table I show degraded uncertainties in comparison with Ref. [1], except for \tilde{c}_Q^p , the uncertainty of which remains the same, and for \tilde{c}_{TT}^p , which was not constrained in Ref. [1].

In Table IV, we have used the Schmidt nuclear model to allow easier comparison with previous work. But our conclusions are general; in particular, the factors C/P are independent of the nuclear model used.

C. Discussion of the improved nuclear model

Recently, new nuclear models beyond the Schmidt model were published for several atoms used in LIV experiments [27,28]. We present here a different model of the nucleus, as described in Sec. VII. The model presently used is a state-of-the art application of the density functional theory, known for a successful description of various nuclear states over the nuclear chart. As such, the

TABLE IV. Comparison between piecemeal (P) and complete (C) analysis for the $O(\beta)$ model used in Ref. [1]. In the complete analysis, we fit directly for the SME coefficient values. For the piecemeal results, we report the results obtained in Ref. [1] using as subsets the \tilde{c}_{TJ}^p on the one hand and all the purely spatial combinations on the other hand. The underestimation factor of the uncertainty in the piecemeal analysis is denoted C/P.

| Coefficient | Uncertainty (GeV) (P) [1] | Uncertainty (GeV) (C) | C/P |
|------------------------------------|------------------------------|--------------------------|------|
| \tilde{c}^p_O | 2.2 10 ⁻²² | 2.1 10 ⁻²² | 0.95 |
| $\tilde{c}^{\frac{\omega}{p}}_{-}$ | $2.8 \ 10^{-25}$ | $5.2 \ 10^{-24}$ | 19 |
| \tilde{c}_{x}^{p} | 1.2 10 ⁻²⁵ | 1.2 10 ⁻²⁴ | 10 |
| $\tilde{c}_{V}^{\hat{p}}$ | 1.2 10 ⁻²⁵ | 7.5 10 ⁻²⁵ | 6.3 |
| \tilde{c}_{7}^{p} | $2.8 \ 10^{-25}$ | $2.8 \ 10^{-24}$ | 10 |
| $\tilde{c}_{TY}^{\tilde{p}}$ | 3.0 10 ⁻²¹ | 2.3 10 ⁻²⁰ | 7.7 |
| \tilde{c}_{TY}^{p} | 3.0 10 ⁻²¹ | 5.9 10 ⁻²⁰ | 20 |
| \tilde{c}_{TZ}^{p} | $2.0\ 10^{-21}$ | 3.3 10 ⁻²⁰ | 16.5 |

degrees of freedom of this model are the physical nucleons, treated in the most general way. The present model is therefore more universal than the Schmidt model and more relevant than Ref. [28] to take into account nuclear structure effects. As discussed in Sec. VII, the results of our calculation significantly differ from the results for ¹³³Cs presented in Ref. [28]. It should be noted that results of the present method on several nuclei are in agreement with the nonrelativistic energy density functional calculations of Ref. [27]. In the case of the ¹³³Cs atom, the present results are in qualitative agreement with those of the Schmidt model, given that γ^n remains a factor 45 smaller than γ^p , meaning that sensitivity to proton coefficients is much larger than to neutron ones, as expected.

Our results with the SCRMF nuclear model (Table III) set limits on the linear combinations $\tilde{c}^{p}_{\mu\nu} + 0.021 \tilde{c}^{n}_{\mu\nu}$ of SME coefficients. For other atoms, e.g., those used in comagnetometers [42], the corresponding linear combinations are different. This opens the possibility of combining different results in order to derive independent constraints on proton and neutron parameters in global analyses. This will be addressed in more detail in future work.

X. CONCLUSION AND PERSPECTIVES

We have presented new constraints on coefficients parametrizing Lorentz violations for nucleons in the minimal Standard Model extension, by monitoring the frequency shifts of hyperfine transitions in a cold atom fountain on Earth. Within the fermion sector, our observable is by construction only sensitive to the $\bar{c}_{\mu\nu}$ coefficients (Sec. III). This test relies on the anisotropy of the kinetic energy in the wave functions of the nucleons, characterized by their nonzero momentum quadrupole moment of which the value is highly nuclear model dependent. We first use the Schmidt model, which has so far been mostly used (Sec. VI), and extend the analysis to a more advanced SCRMF nuclear model (Secs. VII and VIII).

We have reanalysed data taken by the dual cold atom fountain FO2 at Paris Observatory in the ¹³³Cs spinpolarized mode on the $|3, m_F\rangle \leftrightarrow |4, m_F\rangle$ hyperfine transitions, as first reported in Ref. [1]. Our analysis features the use of a new SME model that includes terms of order $O(\beta^2)$ (Sec. IV). This allows us access to the isotropic coefficient \tilde{c}_{TT} , not constrained by the previous analysis. Using a direct and simultaneous fitting of all parameters, we provide a complete analysis including individual limits on all $\tilde{c}_{\mu\nu}$ coefficients, the associated correlation matrix, and confidence intervals (Sec. V). We also present a description of the results in terms of independently constrained linear combinations, obtained through a singular value decomposition of the covariance matrix (Appendix C).

To allow for direct comparisons with previous works, we have presented both results, based respectively on the Schmidt nuclear model (Table I) and on our advanced
LORENTZ-SYMMETRY TEST AT PLANCK-SCALE ...

nuclear model (Table III). The present best limit on the \tilde{c}_{TT}^p coefficient is improved by 5 orders of magnitude with respect to previous laboratory limits, down to the 10^{-16} GeV scale (Sec. VI). The advanced nuclear model allows us to place limits on a linear combination of proton and neutron coefficients, in contrast to the Schmidt model used in Ref. [1], which accounts only for the proton sector sensitivity. This leads to improvements on the limits of the \tilde{c}_Q^n , \tilde{c}_{TJ}^n , and \tilde{c}_{TT}^n neutron coefficients, by up to 13 orders of magnitude.

All our results are compatible with the absence of Lorentz violation. As mentioned in the Introduction, if the relevant scale unit for suppressions is the electroweakto-Planck energy ratio $(E_{ew}/E_P \sim 10^{-17})$, it is particularly interesting to constrain the dimensionless LIV tensors $\tilde{c}_{\mu\nu}/(mc^2)$ below this Planck suppressed scale. With this study, we bring the limits at or below that level for the first time for all proton and neutron coefficients (with $mc^2 \sim$ 1 GeV for protons and neutrons), except for \bar{c}_{TT}^n and \bar{c}_{TT}^p of which the limits are respectively weaker by 3 and 1 orders of magnitude. Nonetheless, our results give an experimental benchmark indicating that the minimal suppression compatible with our data for the operators associated with $\bar{c}_{\mu\nu}$ is at least one Planck scale. These dimension-4 Lorentzviolating terms could be expected to be of order 1 from quantum field theory, and the experimental observations thus require that an additional suppression mechanism comes into play, such as that proposed in Refs. [5,25,46].

Our $\tilde{c}_{\mu\nu}$ coefficients estimations are still significantly correlated (see Fig. 2), mostly because our two data sets do not span a sufficient portion of the year to allow their full decorrelation from the annual sidebands (Appendix A). Thus, we expect that an additional data set would reduce the marginalized uncertainties and lead to an improvement by one extra order of magnitude of all limits, in particular bringing the limit on \tilde{c}_{TT}^{p} down to 10^{-17} GeV. Based on synthetic data simulations, the best period for a third data set would be July or January.

The ¹³³Cs fountain data could also be analyzed in an extended framework: the nonminimal SME framework, which takes into account higher order Lorentz-violating operators. A nonminimal model, up to order 5 or 6, would contain additional sidereal harmonics, allowing for additional parameters to be determined and possibly for better decorrelation of the minimal ones (Ref. [47]).

Previous experiments realized with other setups and atoms could be reanalyzed with our new nuclear model. Analyzing SME spectroscopy experiments with more accurate models of the nucleus is a current effort of several groups (Refs. [27,28]) and will be the subject of future work centered on the nuclear calculation method used here and its application to other atoms and SME tests.

In conclusion, our work brings significant improvement in constraining possible low-energy signatures of new high-energy physics, using a set of improved models and analysis that could also benefit to other experimental tests.

ACKNOWLEDGMENTS

H. P. L. B. is grateful for the financial support of the Labex First-TF and the Centre National d'Études Spatiales. C. G., Q. G. B., and P. W. acknowledge support from the Idex Sorbonne Universités in the frame of the Investissements d'Avenir program, under Grant No. SU-15-R-EMR-07. Q. G. B. was supported during the preparation of this work by the National Science Foundation under Grant No. PHY-1402890. C. G. would like to acknowledge useful discussions with A. Roura.

APPENDIX A: SECOND ORDER MODEL

The direction and amplitude of the lab velocity with respect to the SCF are respectively denoted **n** and $\beta = \frac{v}{c}$. The Lorentz boost matrix Λ of the lab with respect to SCF is

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & \gamma \beta \mathbf{n}^T \\ \gamma \beta \mathbf{n} & \mathbb{I}_3 + (\gamma - 1) \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T \end{pmatrix}.$$
(A1)

Expanding $\gamma = 1/(\sqrt{1-\beta^2})$ to the second order in β gives

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{2}\beta^2 & \beta \mathbf{n}^T \\ \beta \mathbf{n} & \mathbb{I}_3 + \frac{1}{2}\beta^2 \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T \end{pmatrix}$$
(A2)

$$=\underbrace{\begin{pmatrix}1 & \beta \mathbf{n}^{T}\\\beta \mathbf{n} & \mathbb{I}_{3}\end{pmatrix}}_{\Lambda^{(1)}} + \underbrace{\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\beta^{2} & 0\\0 & \frac{1}{2}\beta^{2}\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}^{T}\end{pmatrix}}_{\Lambda^{(2)}}, \quad (A3)$$

where $\Lambda^{(1)}$ is the first order boost and $\Lambda^{(2)}$ is the second order boost.

Following Ref. [30], the transformation matrix \mathfrak{T} from the SCF to the lab frame is given by the product

$$\mathfrak{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & & R & \\ 0 & & & \end{pmatrix} \cdot \Lambda,$$
 (A4)

where *R* is the rotation matrix describing the orientation of the lab frame's axes directions in the SCF.

The total boost is the sum of the orbital boost of Earth and the boost of the lab relative to the Earth, with amplitudes β_{\oplus} and β_l respectively. As eccentricity of Earth's orbit gives rise to a maximal deviation of 2% of its mean value, it leads to subleading order corrections in our model and can be neglected as shown in Ref. [30]. Earth's orbit is thus taken as circular.

As already mentioned, the second order boost is only necessary for terms involving \tilde{c}_{TT} , as all other components

H. PIHAN-LE BARS et al.

PHYSICAL REVIEW D 95, 075026 (2017)

TABLE V. Composition of the complete $O(\beta^2)$ model applied to \tilde{c}_q in Eq. (10). The expression of the signal associated to each SCF coefficient is detailed in terms of frequency, phase, and boost suppression. The only information not reported here is prefactors of order 1 from two angles, the lab colatitude, and the inclination of the Earth's orbit. ω (respectively Ω) denotes the angular frequency of the Earth's rotation (respectively of the Earth's orbit). The column on the left is the main harmonic, and the column next to it is the sideband frequency. The spectral components included in the shortened model fitted to the data are in bold type.

| Freq | uency | | \tilde{c}_Q | ĩ | \tilde{c}_X | \tilde{c}_Y | \tilde{c}_Z | \tilde{c}_{TX} | \tilde{c}_{TY} | \tilde{c}_{TZ} | \tilde{c}_{TT} |
|------|------------|------------|---|--|--|--|--|---|---|---|--|
| 0 | 0 | | $\frac{1}{\beta_{\oplus}^2}$ β_l^2 | β_{\oplus}^2 | β_{\oplus}^2 | | | | | | $egin{array}{c} eta_\oplus^2\ eta_l^2 \end{array} \ eta_l^2 \end{array}$ |
| | Ω | cos sin | | | $egin{array}{l} eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \end{array}$ | $eta_{\oplus}eta_l \ eta_{\oplus}eta_l$ | | $egin{array}{c} eta_\oplus\ eta_\oplus\ eta_\oplus \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus \ eta_\oplus \ eta_\oplus \end{array} \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus\ eta_\oplus\ eta_\oplus \end{array} \end{array}$ | |
| | 2Ω | cos sin | $\begin{array}{c} \beta_{\oplus}^2 \\ \beta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2\ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | | | | $egin{array}{c} eta^2_\oplus\ eta^2_\oplus \end{array} \ eta^2_\oplus \end{array}$ |
| ω | -2Ω | cos sin | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2\ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | | | | $egin{array}{c} eta_\oplus^2\ eta_\oplus^2\ eta_\oplus^2 \end{array}$ |
| | -Ω | cos sin | $\begin{array}{c} \beta_{\oplus}\beta_l\\ \beta_{\oplus}\beta_l \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \end{array}$ | $egin{array}{l} eta_\opluseta_l\ eta_\opluseta_l\ eta_ox\opluseta_l \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus\ eta_\oplus\ eta_\oplus \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus \ eta_\oplus \ eta_\oplus \end{array} \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus \ eta_\oplus \ eta_\oplus \end{array} \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\opluseta_l\ eta_\opluseta_l\ eta_\opluseta_l \end{array}$ |
| | 0 | cos sin | eta_\oplus^2 | eta_\oplus^2 | 1 β_{\oplus}^2 | $1 \beta_{\oplus}^2$ | β_{\oplus}^2 | β_l | βι | | β_\oplus^2 |
| | $+\Omega$ | cos sin | $ \begin{array}{c} \beta_{\oplus}\beta_l \\ \beta_{\oplus}\beta_l \end{array} $ | $egin{array}{l} eta_\opluseta_l\ eta_oldsymbol{eta}_oldsymbol{eta}_l\ eta_oldsymbol{eta}_oldsymbol{eta}_l \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus\ eta_\oplus\ eta_\oplus \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus \ eta_\oplus \ eta_\oplus \end{array} \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus \ eta_\oplus \ eta_\oplus \end{array} \end{array}$ | $\begin{array}{c} \beta_{\oplus}\beta_l\\ \beta_{\oplus}\beta_l \end{array}$ |
| | $+2\Omega$ | cos sin | $\begin{array}{c} \beta_{\oplus}^2 \\ \beta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array} \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | | | | $egin{array}{c} eta_\oplus^2\ eta_\oplus^2\ eta_\oplus^2 \end{array}$ |
| | -2Ω | cos sin | $\begin{array}{c} \beta_{\oplus}^2 \\ \beta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2\ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \ eta_{\oplus}^2 \end{array}$ | | | | $egin{array}{c} eta_\oplus^2\ eta_\oplus^2\ eta_\oplus^2 \end{array}$ |
| | -Ω | cos sin | | $egin{array}{l} eta_\opluseta_l\ eta_\opluseta_l\ eta_ox\opluseta_l \end{array}$ | $egin{array}{l} eta_\opluseta_l\ eta_\opluseta_l\ eta_ox\opluseta_l \end{array}$ | $egin{array}{l} eta_\opluseta_l\ eta_\opluseta_l\ eta_eta_eta_l \end{array}$ | $egin{array}{l} eta_\opluseta_l\ eta_\opluseta_l\ eta_oxtimeseta_l \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus\ eta_\oplus\ eta_\oplus \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus\ eta_\oplus\ eta_\oplus \end{array}$ | | |
| 2ω | 0 | cos | β_{\oplus}^2 | $\frac{1}{\beta_{\oplus}^2}$ β_l^2 | β_{\oplus}^2 | eta_\oplus^2 | $\frac{1}{\beta_{\oplus}^2} \\ \beta_l^2$ | | | | β_\oplus^2 |
| | $+\Omega$ | cos sin | | $egin{array}{l} eta_\opluseta_l\ eta_oldsymbol{eta}_oldsymbol{eta}_l\ eta_oldsymbol{eta}_oldsymbol{eta}_l \end{array}$ | $egin{array}{l} eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \end{array}$ | $eta_\opluseta_l\ eta_\opluseta_l$ | $egin{array}{l} eta_\opluseta_l\ eta_oldsymbol{eta}_oldsymbol{eta}_l\ eta_oldsymbol{eta}_oldsymbol{eta}_l \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus\ eta_\oplus\ eta_\oplus \end{array}$ | $egin{array}{c} eta_\oplus\ eta_\oplus\ eta_\oplus \end{array}$ | | |
| | $+2\Omega$ | cos sin | $\begin{array}{c} \beta_{\oplus}^2 \\ \beta_{\oplus}^2 \end{array}$ | $egin{array}{c} eta^2_\oplus \ eta^2_\oplus \ eta^2_\oplus \end{array}$ | $\frac{\beta_{\oplus}^2}{\beta_{\oplus}^2}$ | $egin{array}{c} eta^2_\oplus \ eta^2_\oplus \ eta^2_\oplus \end{array}$ | $egin{array}{c} eta^2_\oplus \ eta^2_\oplus \ eta^2_\oplus \end{array}$ | | | | $egin{array}{c} eta^2_\oplus \ eta^2_\oplus \ eta^2_\oplus \end{array}$ |
| 3ω | -Ω | cos sin | | $egin{aligned} η_\opluseta_l\ η_\opluseta_l \end{aligned} \ η_\opluseta_l \end{aligned}$ | | | $egin{array}{l} eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \ eta_\oplus eta_l \end{array}$ | | | | |
| | $+\Omega$ | cos sin | | $\frac{\beta_{\oplus}\beta_l}{\beta_{\oplus}\beta_l}$ | | | $\frac{\beta_{\oplus}\beta_l}{\beta_{\oplus}\beta_l}$ | | | | |

LORENTZ-SYMMETRY TEST AT PLANCK-SCALE ...

of $\tilde{c}_{\mu\nu}$ are dominated by zero or first order terms in β . However, it turns out (see Appendix B) that for the \tilde{c}_{TT} component all $O(\beta^2)$ terms are obtained from solely the first part of (A3), the second part giving rise to only $O(\beta^4)$ terms. Note also that consequently any other second order effects (e.g., geodetic precession [48]) can be neglected.

The transformation matrix \mathfrak{T} we obtain is then used in (11) to relate the lab frame parameters to the SCF ones. Applying it to \tilde{c}_q of Eq. (10) leads to a time-varying signal in case any of the SCF $\tilde{c}_{\mu\nu}$ coefficients is different from zero. The full explicit model is not given here because of its length, but it is available on request. We summarize its spectral structure in Table V with associated boost suppression factors for each SME coefficient. Restricting to the relevant terms used in the final adjustment, the shortened model is composed of an offset plus 12 frequency components, which amounts to a total of 25 quadratures.

APPENDIX B: LAB FRAME \bar{c}_q IN TERMS OF \bar{c}_{TT} TO SECOND ORDER IN BOOST

The (instantaneous) Lorentz transformation of covector components from the SCF to the laboratory frame is written

$$u_{\mu} = \mathfrak{T}_{\mu}^{\Xi} u_{\Xi}, \tag{B1}$$

where capital greek letters denote components with respect to the SCF. For the $\bar{c}_{\mu\nu}$ coefficients in the lab frame, the transformation is

$$\bar{c}_{\mu\nu} = \mathfrak{T}_{\mu} \mathfrak{T}_{\nu} \bar{c}_{\Xi\Pi}. \tag{B2}$$

We now adopt the special case of isotropic SCF coefficients $\bar{c}_{\Xi\Pi}$, in matrix form (recall that $\bar{c}_{\Xi\Pi}$ is traceless),

$$\begin{pmatrix} \bar{c}_{TT} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{3}\bar{c}_{TT} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{3}\bar{c}_{TT} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3}\bar{c}_{TT} \end{pmatrix},$$
 (B3)

and we focus on the quadrupole set of coefficients in the lab frame $\bar{c}_q = \bar{c}_{xx} + \bar{c}_{yy} - 2\bar{c}_{zz}$. Using the Lorentz transformation and Eq. (B3), the lab frame coefficients can be written as

$$\bar{c}_{q} = [\mathfrak{T}_{x}\mathfrak{T}_{x}^{T} + \mathfrak{T}_{y}\mathfrak{T}_{y}^{T} - 2\mathfrak{T}_{z}\mathfrak{T}_{z}^{T}]\bar{c}_{TT} + [\mathfrak{T}_{x}\mathfrak{T}_{x}^{J}]_{x} + \mathfrak{T}_{y}\mathfrak{T}_{y}^{T} - 2\mathfrak{T}_{z}\mathfrak{T}_{z}^{J}]\frac{1}{3}\bar{c}_{TT}.$$
(B4)

Thus, we would need to know the spatial part of the Lorentz transformation to second order in the boost velocity to get the desired expression. However, there is a quicker method.

We use the defining property of Lorentz transformations and the flat space-time metric: PHYSICAL REVIEW D 95, 075026 (2017)

$$\eta_{\mu\nu} = \mathfrak{T}_{\mu}^{\Xi} \mathfrak{T}_{\nu}^{\Pi} \eta_{\Xi\Pi}. \tag{B5}$$

From this equation, we can reexpress the terms involving \mathfrak{T}_{j}^{J} using only the \mathfrak{T}_{j}^{T} terms. For instance, if we pick $\mu = \nu = x$, then we have from (B5),

$$1 = \mathfrak{T}_{x}^{\Xi} \mathfrak{T}_{x}^{\Pi} \eta_{\Xi\Pi}$$
$$= -\mathfrak{T}_{x}^{T} \mathfrak{T}_{x}^{T} + \mathfrak{T}_{x}^{J} \mathfrak{T}_{x}^{J}, \qquad (B6)$$

thus implying

$$\mathfrak{T}_{x}\mathfrak{T}_{x}=1+[\mathfrak{T}_{x}]^{2} \tag{B7}$$

with similar identities holding for the other terms in the last line of (B4). Using identities like (B7), in Eq. (B4), we arrive at the expression

$$\bar{c}_q = \frac{4}{3}\bar{c}_{TT}[\mathfrak{T}_x\mathfrak{T}_x^T + \mathfrak{T}_y\mathfrak{T}_y^T - 2\mathfrak{T}_z\mathfrak{T}_z^T], \quad (B8)$$

from which it should be clear that only the first order boost in Λ is needed to find the time dependence of \bar{c}_q in terms of \bar{c}_{TT} . A similar method was used in Ref. [49].

APPENDIX C: INDEPENDENT BOUNDS ON LINEAR COMBINATIONS OF SME COEFFICIENTS USING SINGULAR VALUE DECOMPOSITION

One can use a singular value decomposition of the covariance matrix [50] to set constraints on linear combinations of SME coefficients. This decomposition is equivalent to a diagonalization of the covariance matrix C, which allows the determination of independently constrained linear combinations of parameters. These combinations are orthonormal to each other in the Euclidean sense. We write the covariance matrix C as

$$C = V \cdot S \cdot V^T, \tag{C1}$$

TABLE VI. Limits on linear combinations of SME Lorentzviolating parameters $\tilde{c}^{p}_{\mu\nu}$ for the proton using the Schmidt model, in GeV. These combinations have been obtained using a singular value decomposition of the total covariance matrix.

| Linear combination | Value and uncertainty | Unit (GeV) |
|-----------------------|-----------------------|-------------------|
| <i>c</i> ₁ | (-0.2 ± 2.1) | 10 ⁻²² |
| <i>c</i> ₂ | (-2.0 ± 3.6) | 10^{-24} |
| <i>c</i> ₃ | (0.6 ± 1.6) | 10^{-24} |
| c_4 | (-4.0 ± 7.0) | 10^{-25} |
| <i>c</i> ₅ | (-0.3 ± 1.3) | 10^{-24} |
| <i>c</i> ₆ | (0.7 ± 2.4) | 10^{-20} |
| <i>c</i> ₇ | (-1.7 ± 6.8) | 10^{-20} |
| <i>c</i> ₈ | (0.1 ± 1.4) | 10^{-20} |
| <i>C</i> ₉ | (1.6 ± 6.9) | 10^{-16} |

| TABLE VII. | Composition of the | e linear combination | is of $\tilde{c}^{p}_{\mu\nu}$ | , coefficients | obtained | using a S | VD of the | covariance | matrix. | Boldface |
|-------------|------------------------|------------------------|--------------------------------|----------------|----------|-----------|-----------|------------|---------|----------|
| numbers ind | icate the leading term | ns, for better visibil | ity. | | | | | | | |

| | \tilde{c}_Q^p | \tilde{c}^{p}_{-} | \tilde{c}_X^p | \tilde{c}_Y^p | \tilde{c}_Z^p | \tilde{c}^{p}_{TX} | \tilde{c}^{p}_{TY} | \tilde{c}^{p}_{TZ} | \tilde{c}_{TT}^{p} |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------|----------------------|-----------------------|----------------------|-----------------------|----------------------|
| $\overline{c_1}$ | 1.0 | -5.3 10 ⁻⁵ | 3.5 10 ⁻⁵ | $-4.9 10^{-6}$ | $-7.7 10^{-6}$ | -4.6 10 ⁻⁵ | 1.3 10 ⁻⁴ | -1.7 10 ⁻⁵ | 2.8 10 ⁻⁹ |
| c_2 | $5.7 10^{-5}$ | 0.99 | -0.01 | 0.02 | 0.05 | 9.9 10 ⁻⁵ | $-8.1 10^{-5}$ | 4.210^{-5} | -3.210^{-9} |
| c_3 | $2.7 \ 10^{-5}$ | -0.11 | -0.8 | 0.06 | 0.59 | $7.1\ 10^{-5}$ | 2.3 10 ⁻⁵ | 6.1 10 ⁻⁶ | $-1.7 \ 10^{-9}$ |
| c_4 | $-1.2\ 10^{-6}$ | 0.02 | -0.09 | -0.99 | -0.02 | $-1.7 10^{-5}$ | $6.4 \ 10^{-8}$ | $-1.4 10^{-6}$ | $1.1 \ 10^{-10}$ |
| c_5 | $1.3 10^{-5}$ | -0.02 | -0.57 | 0.06 | -0.81 | $4.0\ 10^{-6}$ | $-1.8\ 10^{-5}$ | 3.7 10 ⁻⁶ | -4.210^{-10} |
| <i>c</i> ₆ | $-6.3 \ 10^{-5}$ | 1.110^{-4} | $-6.7 \ 10^{-5}$ | $2.3 10^{-5}$ | 3.910^{-5} | -0.96 | 0.11 | -0.26 | $-7.1\ 10^{-5}$ |
| <i>c</i> ₇ | $1.1\ 10^{-4}$ | -7.010^{-5} | $-9.8\ 10^{-6}$ | 2.210^{-6} | $2.9 \ 10^{-5}$ | -0.22 | -0.86 | 0.47 | $-2.1\ 10^{-5}$ |
| c_8 | $-6.1 \ 10^{-5}$ | 2.310^{-5} | $-2.3\ 10^{-6}$ | 2.510^{-6} | $-7.0\ 10^{-6}$ | -0.17 | 0.51 | 0.84 | 8.6 10 ⁻⁷ |
| <i>c</i> ₉ | -4.8 10 ⁻⁹ | 9.0 10 ⁻⁹ | -6.8 10 ⁻⁹ | 2.0 10-9 | 4.2 10 ⁻⁹ | -7.210^{-5} | $-1.1\ 10^{-5}$ | -9.3 10 ⁻⁶ | 1.0 |

where the matrix V contains the eigenvectors of C and the diagonal S matrix contains its eigenvalues. These two matrices and the parameter vector **a** are then used to define the linear-independent combinations vector, denoted **c**, and their associated uncertainties σ_i^c :

$$\mathbf{c} = V^T \cdot \mathbf{a} \tag{C2}$$

$$\sigma_i^c = \sqrt{S_{ii}}.\tag{C3}$$

The detailed composition of those combinations is presented in Table VII, and their values and uncertainties are



FIG. 5. Confidence ellipses of the linear combinations (SVD). The red, blue, and green confidence ellipses correspond respectively to the 68.3%, 90%, and 95.4% confidence regions. The purple square is the position of the least-squares solution. Axis labels give the 95.4% confidence intervals in GeV, the respective orders of magnitude of which are given in the upper right box. Horizontal and vertical blue lines at zero value allow us to visualize the absence of significance in the results.

shown in Table VI. We also provide the analytical confidence ellipses of these linear combinations in Fig. 5. As expected, the ellipses are not tilted, meaning that the linear combinations have a diagonal covariance matrix. The results have been given for the Schmidt model. For the alternative nuclear model used here, results in Table VI and Fig. 5 would be rescaled as was done in Sec. VIII for Table III, and in their composition given in Table VII, proton coefficients would be replaced by $\tilde{c}^{P}_{\mu\nu} + 0.021\tilde{c}^{n}_{\mu\nu}$.

APPENDIX D: EXPECTATION VALUE OF THE NONLOCAL p^2 OPERATOR

Considering a generic one-body operator

$$\hat{\mathcal{O}} = \sum_{i,j} \langle i | \mathcal{O} | j \rangle c_i^{\dagger} c_j, \qquad (D1)$$

one can show using the Wick theorem that the expectation value on an Hartree-Fock-Bogoliubov vacuum of this squared operator can be written

$$\frac{\langle \Phi_0 | \hat{\mathcal{O}}^2 | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} = [\mathrm{Tr}(\mathcal{O}\rho)]^2 + \mathrm{Tr}(\mathcal{O}^2\rho) - \mathrm{Tr}(\mathcal{O}\rho\mathcal{O}\rho) - \mathrm{Tr}[\mathcal{O}\kappa(\mathcal{O}\kappa)^*], \qquad (D2)$$

with the normal density defined as

$$\rho_{ij} = \frac{\langle \Phi_0 | c_j^{\dagger} c_i | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} \tag{D3}$$

and the pairing tensor

$$\kappa_{ij} = \frac{\langle \Phi_0 | c_j c_i | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle}.$$
 (D4)

In the case of (18), the matrix elements of the momentum operator can be expressed in the deformed harmonicoscillator basis as

$$\langle i|\vec{p}|j\rangle = -i\hbar \int d^3r_i d^3r_j \phi_i^*(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi_j(\vec{r}).$$
(D5)

Thus, one may directly use (D2) to compute (18).

LORENTZ-SYMMETRY TEST AT PLANCK-SCALE ...

- P. Wolf, F. Chapelet, S. Bize, and A. Clairon, Phys. Rev. Lett. 96, 060801 (2006).
- [2] V. A. Kostelecký and N. Russell, Rev. Mod. Phys. 83, 11 (2011); arXiv:0801.0287v10.
- [3] D. Mattingly, Living Rev. Relativ. 8, 5 (2005).
- [4] G. Amelino-Camelia, Living Rev. Relativ. 16, 5 (2013).
- [5] S. Liberati, Classical Quantum Gravity **30**, 133001 (2013).
- [6] C. M. Will, Living Rev. Relativ. 17, 4 (2014).
- [7] J. D. Tasson, Rep. Prog. Phys. 77, 062901 (2014).
- [8] G. Luders, Kong. Dan. Vid. Sel. Mat. Fys. Med. 28, 1 (1954).
- [9] W. Pauli, L. Rosenfeld, and V. Weisskopf, Brit. J. Philos. Sci. 7, 357 (1957).
- [10] O. W. Greenberg, Phys. Rev. Lett. 89, 231602 (2002).
- [11] V. A. Kostelecký and S. Samuel, Phys. Rev. D 39, 683 (1989).
- [12] V. A. Kostelecký and R. Potting, Nucl. Phys. B359, 545 (1991).
- [13] D. Colladay and V. A. Kostelecký, Phys. Rev. D 55, 6760 (1997).
- [14] D. Colladay and V. A. Kostelecký, Phys. Rev. D 58, 116002 (1998).
- [15] V.A. Kostelecký, Phys. Rev. D 69, 105009 (2004).
- [16] T. Damour and A. Polyakov, Nucl. Phys. B423, 532 (1994).
- [17] V. A. Kostelecký, R. Lehnert, and M. J. Perry, Phys. Rev. D 68, 123511 (2003).
- [18] T. Damour and J. F. Donoghue, Phys. Rev. D 82, 084033 (2010).
- [19] A. Hees, J. Guéna, M. Abgrall, S. Bize, and P. Wolf, Phys. Rev. Lett. **117**, 061301 (2016).
- [20] V. A. Kostelecký and R. Potting, Phys. Rev. D 51, 3923 (1995).
- [21] V. A. Kostelecký and R. Lehnert, Phys. Rev. D 63, 065008 (2001).
- [22] A. Lo, P. Haslinger, E. Mizrachi, L. Anderegg, H. Müller, M. Hohensee, M. Goryachev, and M. E. Tobar, Phys. Rev. X 6, 011018 (2016).
- [23] J. Collins, A. Perez, D. Sudarsky, L. Urrutia, and H. Vucetich, Phys. Rev. Lett. 93, 191301 (2004).
- [24] D. Mattingly, arXiv:0802.1561.
- [25] M. Pospelov and Y. Shang, Phys. Rev. D 85, 105001 (2012).
- [26] J. Alexandre and J. Leite, Classical Quantum Gravity 33, 195005 (2016).
- [27] B. Brown, G. Bertsch, L. Robledo, M. Romalis, and V. Zelevinsky, arXiv:1604.08187.
- [28] V. V. Flambaum, Phys. Rev. Lett. 117, 072501 (2016).
- [29] V. A. Kostelecký and C. D. Lane, Phys. Rev. D 60, 116010 (1999).
- [30] R. Bluhm, V. A. Kostelecký, C. D. Lane, and N. Russell, Phys. Rev. D 68, 125008 (2003).

- [31] V. A. Kostelecký and J. D. Tasson, Phys. Rev. D 83, 016013 (2011).
- [32] M. A. Hohensee, N. Leefer, D. Budker, C. Harabati, V. A. Dzuba, and V. V. Flambaum, Phys. Rev. Lett. 111, 050401 (2013).
- [33] J. Guéna, M. Abgrall, D. Rovera, P. Laurent, B. Chupin, M. Lours, G. Santarelli, P. Rosenbusch, M. Tobar, R. Li, K. Gibble, A. Clairon, and S. Bize, IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control 59, 391 (2012).
- [34] J. Guéna, M. Abgrall, A. Clairon, and S. Bize, Metrologia 51, 108 (2014).
- [35] S. Bize, P. Laurent, M. Abgrall, H. Marion, I. Maksimovic, L. Cacciapuoti, J. Grünert, C. Vian, F. Pereira dos Santos, P. Rosenbusch, P. Lemonde, G. Santarelli, P. Wolf, A. Clairon, A. Luiten, M. Tobar, and C. Salomon, J. Phys. B 38, S449 (2005).
- [36] V. A. Kostelecký and M. Mewes, Phys. Rev. D 66, 056005 (2002).
- [37] R. C. Brinker and R. Minnick, *The Surveying Handbook*, 2nd ed. (Springer, New York, 1995), Chap. 16, p. 411.
- [38] D. Vretenar, A. V. Afanasjev, G. A. Lalazissis, and P. Ring, Phys. Rep. 409, 101 (2005).
- [39] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, and P. Ring, Comput. Phys. Commun. 185, 1808 (2014).
- [40] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer Science and Business Media, 2004).
- [41] S. Perez-Martin and L. M. Robledo, Phys. Rev. C 78, 014304 (2008).
- [42] M. Smiciklas, J. M. Brown, L. W. Cheuk, S. J. Smullin, and M. V. Romalis, Phys. Rev. Lett. **107**, 171604 (2011).
- [43] V. A. Kostelecký and M. Mewes, Phys. Rev. D 88, 096006 (2013).
- [44] F. R. Klinkhamer and M. Schreck, Phys. Rev. D 78, 085026 (2008).
- [45] B. Altschul, Phys. Rev. D 78, 085018 (2008).
- [46] A. Belenchia, A. Gambassi, and S. Liberati, J. High Energy Phys. 06 (2016) 49.
- [47] V. A. Kostelecký and A. J. Vargas, Phys. Rev. D 92, 056002 (2015).
- [48] M. Soffel, S. A. Klioner, G. Petit, P. Wolf, S. M. Kopeikin, P. Bretagnon, V. A. Brumberg, N. Capitaine, T. Damour, T. Fukushima, B. Guinot, T.-Y. Huang, L. Lindegren, C. Ma, K. Nordtvedt, J. C. Ries, P. K. Seidelmann, D. Vokrouhlický, C. M. Will, and C. Xu, Astron. J. 126, 2687 (2003).
- [49] V. A. Kostelecký, A. Melissinos, and M. Mewes, Phys. Lett. B 761, 1 (2016).
- [50] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes C*, 2nd ed. (Cambridge University Press, New York, 1992), Chap. 2.6, p. 59.



Title : Spatial distribution of strongly correlated fermions in strong interaction : Formalism, methods and phenomenology applied to nuclear structure.

ÉCOLE DOCTORALE

PHENIICS

Keywords : Nuclear structure, Many body system, Relativistic field theory, Theoretical physics, Clusters in nuclei

Abstract :

The atomic nucleus is intrinsically a complex system, composed of strongly correlated non-elementary fermions, sensitive to strong and electroweak interaction. The description of its internal structure is a major challenge of modern physics. In fact the complexity of the nucleon-nucleon interaction generates correlations which are responsible of the diversity of shapes that the nuclei can adopt. Indeed the nuclei can adopt either quasi-homogeneous shapes when nucleons are delocalized or shapes where spatially localized structure can emerge, namely nuclear clusters. This work is an extension of relativistic mean-fields approach (RMF), which allows an universal treatment of nuclear phenomenology. In a first time we will present the necessary formalism to construct such an approach starting with the fundamental interactions underlying nucleons dynamics within the nucleus. However this approach doesn't allow an accurate reproduction of experimental properties : a purely mean-field approach neglects to many correlations. Existing methods to treat both particle-hole (deformation), particle-particle (pairing) correlations will be discussed. First we will propose a new diagrammatic method, which take correlation into account in a perturbative way, the implementation of this approach using combinatory theory will be discussed. Then we will get back to a phenomenological treatment of particle-hole correlations, to focus on the impact of particle-particle. Formation of nucleonic pair will be discussed in the language of graph theory, allowing several formal simplifications and shed a different light on pairing. Pairing correlations will be at first treated using a relativistic Hartree-Bogolioubov approach. Nevertheless this formalism doesn't conserve particle number, and thus we will present a projective approach to restore it. The effect of this restoration will also be studied. Then to describe general nuclear deformation, several implementations and optimizations developed during this PhD will be presented. With this tools, clusterisation will be investigated as phenomenon emerging for certain class of correlations. Localization measure will be derived allowing a clearer understanding of cluster physics. The analysis of theses quantities makes possible a first unified description of cluster formation both for light nuclei (Neon) or for heavy alpha emitters (Polonium). Cluster emergence will be described as a quantum phase transition, an order parameter will be displayed and this formation will be characterized as a Mott transition. The influence of pairing correlations on cluster formation is studied and a detailed study of pairs spatial properties is performed for nuclei from several mass regions. Lastly a method allowing treatment of 4-body correlations (quarteting) is proposed to explain cluster emergence as alpha particle preformation.

Title : Distribution spatiale de fermions fortement corrélés en interaction forte : formalisme, méthodes et phénoménologie en structure nucléaire.

Keywords : Structure nucléaire, Système à N-corps, Théories relativiste des champs, Physique théorique, Agrégation nucléaire

Résumé :

Le noyau est par essence un système complexe, composé de fermions composites fortement corrélés, soumis à la fois aux interactions forte, faible et électromagnétique. La description de sa structure interne est un enjeu important de la physique moderne. Ainsi la manière qu'ont les nucléons de s'organiser au sein des noyaux atomiques est le reflet des corrélations auxquelles ils sont soumis. On comprend alors que la complexité des interactions inter-nucléoniques se traduit par une grande richesse de schémas selon lesquels les nucléons se distribuent dans les systèmes nucléaires. Le noyau révèle une structure délocalisée où les nucléons se répartissent de façon quasihomogène dans le volume nucléaire. Mais il peut également présenter des sous-structures localisées, appelées clusters ou agrégats nucléaires. Ces travaux s'inscrivent dans le cadre des approches de type champ-moyen relativiste (RMF), permettant un traitement universel de la phénoménologie nucléaire. Dans un premier temps, nous exposerons les éléments de formalisme permettant la construction d'une telle approche en partant des interactions fondamentales qui sous-tendent la dynamique nucléonique au sein des noyaux. Néanmoins ce formalisme ne permet pas de rendre compte des propriétés expérimentales des observables nucléaires : une stricte approche de type champ-moyen, néglige de trop nombreuses classes de corrélations. Nous discuterons alors des méthodes existantes pour prendre en compte ces corrélations, de type particuletrou (déformation) ainsi que de type particules-particules (appariement). Dans un premier temps, une nouvelle méthode diagrammatique, permettant une approche perturbative des corrélations est proposée ainsi qu'une implémentation automatisée associée basée sur une théorie combinatoire. Ensuite. nous reviendrons à un traitement phénoménologique des corrélations particules-trous, pour nous focaliser sur l'impact des corrélations particules-particules. En premier lieu nous discuterons le phénomène de formation de paires nucléoniques en utilisant le langage de la théorie des graphes, langage permettant plusieurs simplifications formelles ainsi qu'une compréhension différentes de l'appariement. Les corrélations d'appariement seront tout d'abord prise en compte par une approche de type Hartree-Bogolioubov relativiste. Toutefois ce formalisme ne conservant pas le nombre de particules, nous présenterons une approche projective permettant de le restaurer. L'effet de cette restauration sur le système sera également étudié. Seront ensuite présentés les différentes implémentations et optimisations numériques, développées pendant cette thèse, pour un traitement général des déformations nucléaires. Munis de ces outils, nous reviendrons sur la formation d'agrégats nucléaires, les clusters, comme phénomène émergent issu de la prise en compte de certaines classes de corrélations. Tout d'abord des mesures de localisations et paramètres quantifiant la dispersion des fonctions d'ondes nucléoniques sont proposées, permettant d'analyser le noyau pour localiser et comprendre l'origine de l'agrégation. L'analyse de ces quantités est présentée et permet la première description unifiée de la formation de clusters aussi bien dans les noyaux légers (Néon, Magnésium) que dans les noyaux lourds émetteurs alpha (Polonium). L'émergence des clusters est ensuite décrite au travers du prisme des transitions de phases quantiques. Un paramètre d'ordre est exhibé ainsi que la caractérisation de ce phénomène en tant que transition de Mott. L'influence des corrélations d'appariement sur la formation de clusters est analysée et une étude précise des propriétés spatiales des paires de nucléons est menée pour plusieurs novaux dans différentes régions de masses. Enfin une méthode de prise en compte de corrélations à 4-corps, dite de quartet est proposée pour tenter d'expliquer l'émergence des clusters en tant que préformation de particules alpha.