

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Hassiba Benbouali de Chlef



Faculté des Sciences Exactes & Informatique

Département de Physique



Thèse

Présenté pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT 3^{ème} Cycle (LMD) En : PHYSIQUE

Spécialité : Physique théorique

Par :

BOUTAMI Kenza

Sujet

Single- and double- Λ light hypernuclei

Soutenue publiquement, le 00 / 04/ 2026 devant le jury composé de :

M. Boudjemaa Abdelaali	Professeur/ UHB-Chlef	Président du Jury
M. Belabbas Mohamed	Professeur/ UHB-Chlef	Directeur de thèse
M. Margueron Jérôme	Professeur/ Institut de Physique des 2 Infinis de Lyon-France	Co-directeur de thèse
Mme. Ami Ismahane	Professeur/ Université de Boumerdès	Examinatrice
M. Boukabcha Hocine	Professeur/ UDB-Khemis- Miliana	Examinateur
M. Berbri Abderazzak	MCA/ UHB-Chlef	Examinateur

Année Universitaire 2025-2026

Résumé

L'ajout d'hypérons aux systèmes nucléaires représente une voie précieuse pour explorer l'interaction entre l'étrangeté et la structure nucléaire. Dans ce travail de thèse, nous étudions l'impact d'un et deux hypérons Λ sur les propriétés de cœurs nucléaires déformés paire-paire dans le cadre du modèle déformé Skyrme-Hartree-Fock (SHF)+BCS. Pour ce faire, nous incorporons une approche de fonctionnelle de densité $N\Lambda$ et $\Lambda\Lambda$ ajustée à des calculs microscopiques de Brueckner-Hartree-Fock (BHF), établissant ainsi un lien cohérent entre matière hyperonique et systèmes hypernucléaires finis. Une nouvelle version du code EV8, étendue et adaptée aux hypernoyaux (EV8- Λ), a été développée pour résoudre de manière auto-cohérente les équations HF+BCS sur une grille cartésienne tridimensionnelle tout en incluant explicitement les degrés de liberté hyperoniques, les termes de réarrangement et la correction du centre de masse. Nos calculs portent en particulier sur les hypernoyaux observés ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, tous deux prédits posséder un état fondamental déformé.

Nos résultats montrent que la présence d'un seul hyperon Λ conduit à une modeste augmentation de l'énergie de liaison du Λ et à une légère réduction de la déformation quadrupolaire du cœur. L'ajout d'un second améliore encore la liaison double- Λ et l'énergie de liaison totale, renforçant l'effet de contraction du cœur. Parmi les paramétrisations testées, DF-NSC89 + EmpC apparaît comme l'interaction la plus adéquate pour la description des hypernoyaux légers déformés étudiés. Ces résultats fournissent des informations quantitatives sur les modifications structurelles induites par l'étrangeté dans les hypernoyaux et contribuent à une meilleure compréhension des interactions hyperon-nucléon et hyperon-hyperon dans les systèmes finis. Les limites de l'approche sont également discutées, ainsi que les perspectives pour des travaux futurs : extension aux hypernoyaux multi-étranges, amélioration des contraintes microscopiques, et applications à l'équation d'état hyperonique pertinente pour la physique des étoiles à neutrons.

ملخص

يمثل إدراج الهايبرونات في النواة الذرية مجالاً مهماً لدراسة تأثير الغرابة على بنية النواة. في هذا العمل، ندرس تأثير وجود هايبرون واحد أو اثنين من نوع Λ على خصائص النوى الزوجية-الزوجية المشوهة، وذلك ضمن إطار النموذجين النظريين لسكيرم-هارتري-فوك المشوه (DSHF) و الناقلية القصوي لباردين-كوبر-شريفير (BCS). ولتحقيق ذلك، نعتمد على مقارنة دالة الكثافة التي تصف كل من التفاعلات $N\Lambda$ و $\Lambda\Lambda$ المضبوطة على أساس حسابات ميكروسكوبية من نوع بروكنر-هارتري-فوك (BHF). في هذه الأطروحة قمنا بتطوير نسخة جديدة من برنامج الحساب EV8 و تكيفه على الجمل الهايبرونية (Λ -EV8)، وذلك من خلال حل معادلات HF+BCS على شبكة ثلاثية الأبعاد بشكل ذاتي الاتساق. وقد ركزنا على النواتين الهايبرونيتين المرصودتين ${}^9\text{Be}$ و ${}^{10}\text{Be}$ ، اللتين يُتوقع أن تمتلكا حالات أرضية مشوهة.

تشير نتائجنا إلى أن وجود هايبرون واحد Λ يؤدي إلى زيادة طفيفة في طاقة الارتباط، وإلى انخفاض بسيط في التشوه الرباعي. كما يؤدي إدراج هايبرون ثانٍ إلى تعزيز طاقة الارتباط المزدوجة والرابطة Λ والطاقة الكلية للربط، إضافة إلى زيادة انكماش النواة. ومن بين الدالات المدروسة، تظهر الدالة DF-NSC89C+EmpC باعتبارها الأكثر ملاءمة لوصف النوى الهايبرونية الخفيفة المشوهة. تقدم هذه النتائج فهماً أعمق للتغيرات البنوية التي تحدثها الغرابة في النوى الهايبرونية، وتسهم في تحسين وصف التفاعلات $N\Lambda$ و $\Lambda\Lambda$ في النوى الذرية. كما تمهد الطريق لدراسات مستقبلية تشمل النوى الهايبرونية متعددة الغرابة وتحسين القيود التجريبية، ومعادلات الحالة ذات الصلة بالنجوم النيوترونية.

Abstract

The addition of hyperons to nuclear systems presents a valuable opportunity to explore the interplay between strangeness and nuclear structure. In this doctoral work, we investigate the impact of one and two Λ hyperons on the properties of even-even deformed nuclear cores within the framework of the deformed Skyrme-Hartree-Fock (SHF)+BCS model. To this end, we incorporate a $N\Lambda$ and $\Lambda\Lambda$ density-functional approach constrained by microscopic Brueckner-Hartree-Fock (BHF) calculations, thus linking hyperonic matter with finite hypernuclei in a consistent manner. A new version of the EV8 code, extended and adapted to hypernuclear systems (EV8- Λ), has been developed to self-consistently solve the HF+BCS equations on a three-dimensional Cartesian mesh while explicitly including hyperonic degrees of freedom, rearrangement terms, and center-of-mass corrections. Our calculations focus on the experimentally observed hypernuclei ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ and ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, both predicted to possess deformed ground states.

Our results show that the presence of a single Λ hyperon leads to a modest increase in the one- Λ binding energy and a slight reduction of the quadrupole deformation. The inclusion of a second Λ enhances the double- Λ binding and bond energies and strengthens the shrinkage effect on the nuclear core. Among the considered parameterizations, DF-NSC89 + EmpC emerges as the most favorable interaction to describe the light deformed hypernuclei studied in this work. These findings provide quantitative insight into the structural modifications induced by strangeness in hypernuclei and contribute to a deeper understanding of hyperon-nucleon and hyperon-hyperon interactions in finite systems. The limitations of the present approach are discussed, along with perspectives for future developments, including extensions to multi-strange hypernuclei, improved microscopic constraints, and applications to the hyperonic equation of state relevant for neutron-star physics.

À mon directeur de thèse Mohamed Belabbas.

Remerciements

Ce travail de thèse a été effectué au sein de la Salle de Doctorat de la Faculté des Sciences Exactes et Informatique de l'Université Hassiba Benbouali de Chlef (UHBC).

Je tiens tout particulièrement à exprimer ma profonde gratitude à mon directeur de thèse, Monsieur le Professeur Mohamed Belabbas. Je le remercie sincèrement pour la confiance qu'il m'a témoignée en acceptant d'encadrer ce travail. Sa rigueur scientifique, sa grande culture physique et ses précieux conseils ont été déterminants dans l'aboutissement de cette recherche. Au-delà de l'aspect scientifique, je suis profondément touché par ses qualités humaines, sa disponibilité et son soutien infaillible, notamment durant les moments de doute et de difficulté. J'ai énormément appris à ses côtés et je lui en suis très reconnaissant.

Mes remerciements vont également à mon co-directeur de thèse, Monsieur Margueron Jérôme, Professeur à l'Institut de Physique des 2 Infinis de Lyon (France), pour avoir accepté de co-encadrer ce travail et pour ses éclairages scientifiques précieux.

Je suis très sensible à l'honneur que me font les membres du jury en acceptant d'évaluer ce travail : je remercie respectueusement Monsieur Boudjemaa Abdelaali, Professeur à l'UHB-Chlef, de m'avoir fait l'honneur de présider ce jury. Je remercie vivement Madame Ami Ismahane, Professeur à l'Université de Boumerdès, pour l'intérêt qu'elle a porté à mon travail en acceptant de l'examiner. Je remercie également Monsieur Boukabcha Hocine, Professeur à l'UDB-Khemis-Miliana, pour avoir accepté la tâche d'examinateur. Mes remerciements s'adressent aussi à Monsieur Berbri Abderazzak, Maître de Conférences A à l'UHB-Chlef, pour avoir accepté d'examiner cette thèse.

J'adresse mes remerciements à l'ensemble des responsables de la Faculté et du Département de Physique pour avoir mis à ma disposition les moyens nécessaires au bon déroulement de cette thèse, notamment au sein de la Salle de Doctorat. À ce titre, je n'oublie pas mes collègues doctorants pour l'ambiance de travail chaleureuse, les échanges scientifiques fructueux et l'entraide quotidienne durant ces années.

Enfin, je dédie ce modeste travail à mes parents, et surtout à ma mère pour ses sacrifices inestimables. Une pensée toute particulière va à mon mari, pour sa patience infinie et son soutien indéfectible qui ont été ma force au quotidien. Je remercie également mes deux frères, ma petite sœur et ma belle-famille pour leur présence bienveillante et leurs encouragements constants. Pour clore ces remerciements, je dédie cette thèse à mon futur enfant, dont la présence discrète m'a accompagnée ces derniers mois et m'a donné le courage d'aller jusqu'au bout.

Table des matières

Résumé	i
Abstract	i
Remerciements	iii
Table des matières	iv
Introduction	1
1 Champ Moyen Nucléaire	5
1.1 Introduction	5
1.2 Théories de champ moyen	5
1.2.1 Approximation des particules indépendantes	6
1.2.2 Modèle en couche	8
1.3 Principe variationnel de Ritz	9
1.4 Minimisation Contrainte : la Méthode de Lagrange	11
1.5 Théorie de Hartree–Fock	12
1.5.1 Équations de HF	13
1.5.2 Hamiltonien de HF	16
1.5.3 Forme de Liouville de l'équation HF	19
1.5.4 Énergie HF	20
1.6 Hartree–Fock avec l'interaction de Skyrme	22
1.6.1 Problème du cœur dur et limite de HF avec l'interaction nue	23
1.6.2 Approche de Brueckner	24
1.6.3 Méthode de la Fonctionnelle de la Densité d'Énergie	25
1.6.4 Fonctionnelle de densité d'énergie de Skyrme	25
1.7 Améliorations au-delà de HF : corrélations d'appariement	30
1.7.1 Base canonique et définitions	30

1.7.2	Équations BCS	30
1.7.3	Interaction d'appariement dans le schéma SHF + BCS	31
1.8	Conclusion	32
2	Hypernoyaux et Interactions Baryoniques	33
2.1	Introduction	33
2.2	Généralités sur les hypernoyaux	34
2.2.1	Définition des hypernoyaux et notion d'étrangeté	34
2.2.2	Le baryon Λ	36
2.3	Production et décroissance des hypernoyaux	37
2.3.1	Modes de production	37
2.3.2	Décroissance et durées de vie	38
2.4	Formulation de champ moyen pour les hypernoyaux	38
2.4.1	Hamiltonien effectif du système hypernucléaire	39
2.4.2	Fonctionnelle de densité d'énergie du système hypernucléaire	39
2.4.3	Paramétrisation des interactions $N\Lambda$ et $\Lambda\Lambda$	40
2.5	Approche Skyrme–Hartree–Fock étendue	42
2.5.1	Masses effectives des nucléons et des hypérons	42
2.5.2	Équations de HF pour les hypernoyaux	45
2.5.3	Correction du centre de masse	47
2.6	Conclusion	47
3	Code de calcul	49
3.1	Introduction	49
3.2	Code EV8 : version originale (2005)	50
3.2.1	Présentation et description du code	50
3.2.2	Discrétisation spatiale et symétries	51
3.2.3	Méthode du temps imaginaire	52
3.2.4	Hartree–Fock sous contrainte quadrupolaire	53
3.3	Le code de référence : EV8 (version 2015)	56
3.3.1	Améliorations numériques	56
3.3.2	Améliorations physiques	57
3.4	Adaptation du code EV8 pour les hypernoyaux : le code EV8- Λ (2025)	57
3.4.1	Intégration des structures de données	58
3.4.2	Fonctionnelles et Potentiels couplés	59
3.4.3	Correction du centre de masse	60

3.4.4	Termes spin-orbit et effets spécifiques du Λ	60
3.4.5	Traitement de l'appariement et Observables	60
3.4.6	Algorithme de résolution couplé	61
3.5	Stabilité numérique et convergence	62
3.6	Conclusion	63
4	Résultats pour les Hypernoyaux légers : ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$	65
4.1	Introduction	65
4.2	Choix des interactions effectives	66
4.3	Validation du Modèle	67
4.4	Surfaces d'énergie et déformation du cœur ${}^8\text{Be}$	69
4.5	L'effet de rétrécissement (<i>shrinkage effect</i>)	70
4.6	Structure microscopique : Niveaux d'énergie individuels	72
4.6.1	Spectre des nucléons	72
4.6.2	Spectre des hypérons	74
4.7	Distributions de densité et clusterisation α	76
4.7.1	Densité spatiale et visualisation du ' <i>shrinkage</i> '	76
4.7.2	Cartes de densité dans le plan (r, z)	77
4.7.3	Quantification du rétrécissement (Rayons RMS)	78
4.7.4	Conséquences physiques et discussion	78
4.8	Énergies de liaison et comparaison expérimentale	79
4.8.1	Définitions et conventions	79
4.8.2	Énergie de liaison simple B_{Λ}	80
4.8.3	Énergie de liaison double $B_{\Lambda\Lambda}$ et interaction $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$	80
4.8.4	Discussion : Rôle de la déformation et physique de l'interaction	81
4.9	Conclusion	82
	Conclusion Générale	84
	Bibliographie	85

Introduction

Depuis la découverte du noyau atomique par Rutherford en 1911 [1], la physique nucléaire s'attache à décrire ce système quantique à corps complexe, gouverné par l'interaction forte [2, 3]. La résolution exacte de ce problème étant limitée par le grand nombre de degrés de liberté, divers modèles ont été développés, allant des descriptions macroscopiques [4] et du modèle en couches [5] aux méthodes *ab initio* [6]. Dans ce paysage théorique, les approches de champ moyen auto-cohérentes [7, 8] constituent un compromis optimal entre précision et faisabilité pour explorer les phénomènes nucléaires, notamment la déformation [9, 10]. Cette méthode, fondée sur le formalisme de Hartree–Fock (HF) [11–13] et adaptée au noyau par Vautherin et Brink [14], repose sur l'utilisation d'interactions effectives. Pour définir le potentiel nucléon-nucléon, deux voies existent : l'approche microscopique dérivée de l'interaction nue [15–17] ou l'approche phénoménologique. C'est cette dernière, dans un cadre non relativiste ajusté aux données expérimentales, qui sera privilégiée dans cette thèse.

Si la physique nucléaire classique se focalise sur les interactions entre nucléons, l'introduction de degrés de liberté étranges via les hypérons (Λ , Σ et Ξ) permet d'étendre naturellement la carte nucléaire ordinaire (Fig. 0.0.1). Cette vision unifiée place les hypernoyaux dans une continuité conceptuelle avec les noyaux classiques, où l'étrangeté constitue un nouvel axe d'exploration de la structure baryonique. Dans ces systèmes, la liaison de l'hypéron au coeur est régie par l'interaction forte, tandis que sa désintégration relève de l'interaction faible.

L'histoire expérimentale s'ouvre avec les travaux pionniers de C. F. Powell (1947) [19, 20] sur les émulsions nucléaires, pavant la voie à la découverte du premier hypernoyau par Danysz et Pniewski en 1953 [21, 22]. Si la spectroscopie des hypernoyaux à un seul Λ s'est depuis étoffée, les données sur les hypernoyaux à deux hypérons restent rares. Après les premières observations dans les années 1960, Le premier double- Λ fut découvert à Varsovie en 1962 [23] et le deuxième au Brookhaven National Laboratory en 1966 [24], il a fallu attendre l'événement Nagara en 2001 (${}^6_{\Lambda\Lambda}\text{He}$) [25] pour obtenir une contrainte expérimentale robuste sur l'énergie de liaison Λ - Λ . Malgré des événe-

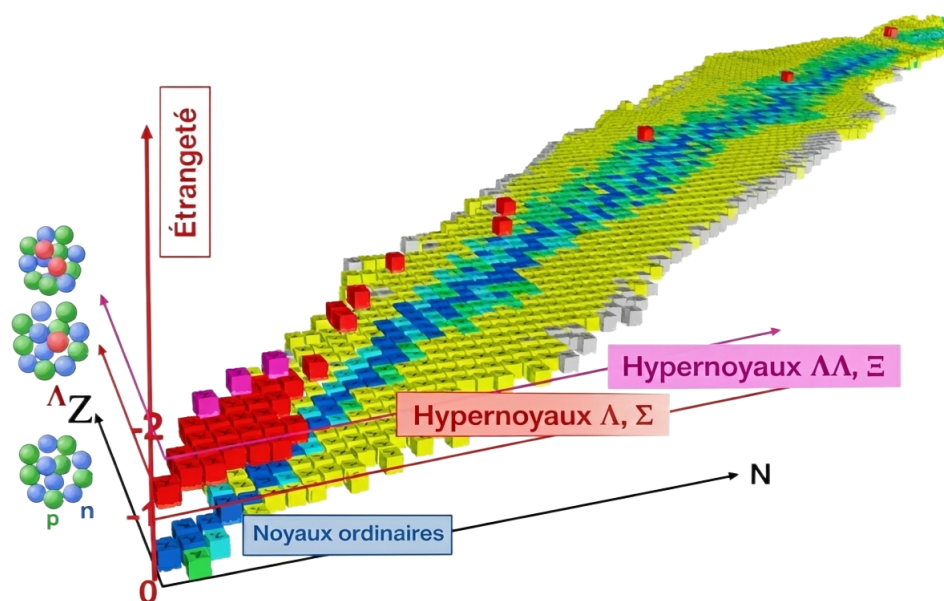


FIGURE 0.0.1 – Carte nucléaire tridimensionnelle en fonction du nombre de protons Z , du nombre de neutrons N et de l'étrangeté S , illustrant la position des noyaux ordinaires et des hypernoyaux à Λ , Σ , Ξ [18].

ments ultérieurs comme Demachi-Yanagi [26], le faible nombre de cas confirmés (tels que ${}_{\Lambda\Lambda}^{10}\text{Be}$ ou ${}_{\Lambda\Lambda}^{13}\text{B}$) limite encore la validation précise des modèles théoriques dans la région de masse $A = 6 - 10$.

L'étude des hypernoyaux est pourtant cruciale car elle offre l'unique accès aux interactions baryon-baryon inaccessibles dans les noyaux ordinaires, spécifiquement les canaux $N-\Lambda$ et $\Lambda-\Lambda$. Comprendre l'interaction $\Lambda-\Lambda$, que les modèles actuels tels que la Chromodynamique Quantique sur réseau (Lattice QCD) ou la Théorie des Champs Effectifs Chirale (Chiral Effective Field Theory - CEFT) décrivent comme faiblement attractive [27, 28], est indispensable pour contraindre l'équation d'état (EoS) de la matière dense, notamment au coeur des étoiles à neutrons [29]. Face aux difficultés techniques des expériences de diffusion directe [30], la physique des hypernoyaux couple approches expérimentales et cadres théoriques variés, allant du modèle en clusters [31–33] et la méthode d'Expansion Gaussienne (Gaussian Expansion Method - GEM) [34] pour les systèmes légers, aux approches de champ moyen tels que Skyrme–Hartree–Fock (SHF), Champ Moyen Relativiste (Relativistic Mean Field - RMF) [35–44] et microscopiques tels que Brueckner–Hartree–Fock (BHF), Matrice G (G-matrix), Monte-Carlo quantique (Quantum Monte Carlo - QMC) [45–47] pour les systèmes plus lourds. La straté-

gie théorique retenue dans ce travail repose sur le couplage entre calculs microscopiques et fonctionnelles de la densité. Concrètement, les propriétés de la matière hyperonique (potentiels, masses effectives) sont extraites de calculs BHF [35,36,48–50] pour calibrer des fonctionnelles effectives utilisables dans des calculs de champ moyen sur noyaux finis [51]. Cependant, un verrou majeur subsiste : la plupart des études sur les hypernoyaux légers postulent une symétrie sphérique. Or, les calculs sphériques tendent à sous-estimer les énergies de liaison par rapport aux expériences [52,53], suggérant que la déformation joue un rôle structural déterminant, particulièrement pour des noyaux clusters comme ceux du Béryllium [54–56]. C’est ici que réside la problématique centrale de cette thèse. Pour résoudre les divergences observées sur les énergies de liaison [57], nous proposons de dépasser l’approximation sphérique en intégrant pleinement la déformation nucléaire. Notre approche utilise une extension du code EV8 [58] (nommée EV8- Λ) pour résoudre les équations Hartree–Fock+Bardeen–Cooper–Schrieffer (HF+BCS) sur un maillage cartésien tridimensionnel [57,59]. Cette méthode permet de traiter de manière auto-cohérente les interactions N - Λ et Λ - Λ sans contrainte de forme a priori.

L’objectif principal de cette thèse est d’approfondir la compréhension de la structure des hypernoyaux légers en quantifiant et en interprétant l’impact de la déformation nucléaire sur leur stabilité, leurs énergies de liaison d’un seul- et double- Λ (B_Λ , $B_{\Lambda\Lambda}$), ainsi que sur l’énergie résiduelle $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$. Pour atteindre cet objectif, nous développons une approche combinée structurée autour de trois axes majeurs : (i) implémentation et adaptation d’un formalisme de champ moyen (SHF + BCS) étendu aux degrés de liberté hyperoniques, permettant de décrire de manière cohérente les interactions $N\Lambda$ et $\Lambda\Lambda$ dans des configurations déformées ; (ii) extension et exploitation du code EV8 dans une version enrichie (dénommée EV8- Λ) pour résoudre les équations HF+BCS sur un maillage tridimensionnel. Cette approche offre une description précise des formes nucléaires non sphériques et permet d’examiner l’impact structural de l’ajout d’un ou de deux hypérons Λ au coeur nucléaire ; (iii) étude détaillée des résultats obtenus, incluant l’effet de l’hypéron sur la déformation du coeur, l’évolution des niveaux d’énergie individuels, la modification des distributions de densité, ainsi que la comparaison systématique des énergies de liaison calculées (d’un seul- et double- Λ) aux données expérimentales disponibles pour contraindre les interactions baryon-baryon effectives [57]. En combinant ces trois axes, cette thèse vise à fournir des prédictions robustes et reproductibles, à clarifier l’origine des écarts entre approches sphériques et déformées dans la description des hypernoyaux légers, et à proposer des recommandations pour l’amélioration future des fonctionnelles hyperoniques. Elle ouvre également la voie à des perspectives pour des études ab-initio et à des applications directes en astrophy-

sique nucléaire, notamment dans la modélisation de la matière hypéronique au sein des étoiles à neutrons.

Le présent manuscrit est structuré en quatre chapitres qui, pris dans leur ensemble, dressent un panorama cohérent de notre étude théorique des hypernoyaux. Les deux premiers chapitres posent le cadre théorique et les fondements conceptuels de notre travail. Le chapitre 1 est une exploration des théories de champ moyen en physique nucléaire, incluant le modèle indépendant des particules, la théorie de HF. Il aborde également le rôle crucial de l'approximation HF+BCS pour le traitement des corrélations d'appariement. Le chapitre 2 se concentre sur les hypernoyaux et les interactions baryoniques, en présentant les hypérons, les hypernoyaux eux-mêmes, ainsi que les différentes interactions baryon-baryon pertinentes pour notre étude. Le chapitre 3, fait le pont entre le formalisme théorique et son implémentation numérique. Il décrit en détail la méthodologie de calcul, le code de champ moyen tridimensionnel EV8, ainsi que son extension originale au secteur étrange, permettant le traitement auto-cohérent des hypernoyaux déformés. Les aspects relatifs à la stabilité numérique et aux critères de convergence y sont également présentés. Le quatrième et dernier chapitre regroupe l'ensemble des résultats originaux de cette thèse [57]. Il expose la stratégie de calcul adoptée, le choix des paramétrisations (interaction nucléonique et fonctionnelles hypéroniques), ainsi que la validation du modèle à partir de noyaux cœurs et d'hypernoyaux sphériques. Ce chapitre présente ensuite les résultats obtenus pour les hypernoyaux légers déformés à un seul Λ et à deux Λ , en particulier ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$. L'analyse porte sur les surfaces d'énergie potentielle en fonction de la déformation, les niveaux d'énergie individuels, les distributions de densité, les effets de polarisation du cœur nucléaire et le phénomène de rétrécissement (contraction). Les résultats sont enfin confrontés aux données expérimentales disponibles.

Chapitre 1

Champ Moyen Nucléaire

1.1 Introduction

Ce chapitre présente le cadre théorique et les outils fondamentaux servant de base à l'ensemble de cette thèse. Après avoir rappelé l'idée centrale des approches de champ moyen ; remplacer le problème à A corps par des particules évoluant dans un champ moyen effectif ; nous exposons successivement les approximations et méthodes variationnelles qui conduisent à la théorie de HF. Le principe variationnel de Ritz et la méthode des multiplicateurs de Lagrange sont rappelés afin de justifier rigoureusement la dérivation des équations HF. Nous détaillons ensuite la mise en œuvre pratique de la théorie HF dans le formalisme des fonctionnelles d'énergie de type Skyrme : expression de la densité d'énergie locale, construction du champ moyen (masse effective, potentiel central, terme spin-orbite) et forme explicite des équations de champ moyen résolues numériquement. Une attention particulière est portée aux limites physiques et numériques de HF : problème du cœur dur de l'interaction nue, rôle de la renormalisation et justification conceptuelle des interactions effectives (Brueckner, EDF). Enfin, nous introduisons les corrections d'appariement indispensables pour décrire les noyaux non doublement magiques. Nous présentons l'approximation BCS utilisée dans ce travail (formulation dans la base canonique, équations du gap, expressions des amplitudes).

1.2 Théories de champ moyen

Les théories de champ moyen ont l'avantage de remplacer un problème à A corps, très rarement possible à résoudre exactement en pratique, en un problème de particules indépendantes sujettes à un champ moyen effectif (Figure 1.2.1).

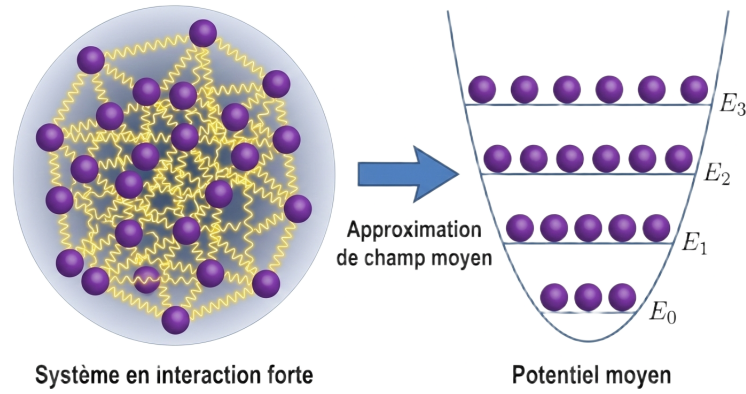


FIGURE 1.2.1 – Illustration de l’approximation de champ moyen : Simplification d’un système en interaction complexe en particules indépendantes dans un champ moyen.

1.2.1 Approximation des particules indépendantes

La description microscopique d’un noyau repose, en principe, sur la résolution de l’équation stationnaire de Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi, \quad (1.2.1)$$

où H est l’hamiltonien complet à N corps, englobant l’ensemble des nucléons du système ainsi que leurs interactions mutuelles. Cependant, ce problème devient rapidement numériquement inabordable dès que le nombre de particules dépasse quelques unités, en raison de la croissance combinatoire des configurations possibles et du caractère fortement corrélé du système nucléaire. Pour rendre le problème accessible, on introduit l’approximation des particules indépendantes, cœur de toutes les théories de champ moyen. L’idée centrale est que les interactions complexes entre nucléons peuvent être remplacées par un potentiel moyen V généré collectivement par tous les autres nucléons. Chaque nucléon évolue alors comme une particule indépendante dans un potentiel effectif, incluant notamment un terme spin-orbite et, pour les protons, un terme coulombien. En se limitant aux interactions à deux corps, l’hamiltonien peut s’écrire sous la forme

$$H = H_0 + H_1 = T + V + H_1, \quad (1.2.2)$$

où H_0 est la partie à un corps (énergie cinétique + potentiel moyen) et H_1 est l’interaction résiduelle, définie par

$$H_1 = \sum_{i < j} v(i, j) - \sum_{i=1}^A V_i. \quad (1.2.3)$$

Ainsi, l'effet direct de l'interaction nucléon-nucléon est absorbé dans $V = \sum_{i=1}^A V_i$, tandis que les corrélations au-delà du champ moyen, développées à la section 1.7.3, sont regroupées dans H_1 .

Cette approximation trouve une justification expérimentale solide dans le cadre du modèle en couches avec, notamment, l'observation des nombres magiques et des structures en niveaux confirme la pertinence d'un potentiel moyen bien défini. De la même façon, le calcul du libre parcours moyen est un second argument pour valider une telle approximation : pour un nucléon ayant une énergie cinétique de ~ 10 Mev le libre parcours moyen vaut environ typiquement ~ 15 fm, soit plusieurs fois les dimensions du noyau ($\lambda \gg R_{\text{noyau}}$) [60, 61]. Un nucléon ne «voit» alors quasiment pas les autres mais «ressent» un potentiel moyen qui tend à le rappeler à l'intérieur du noyau. La validité empirique est un autre argument physique : les spectres, moments et énergies de liaison des noyaux sont bien décrits en première approximation par un modèle de particules indépendantes.

Dans le cadre de l'approximation des particules indépendantes, la résolution de l'équation de Schrödinger (1.2.1) se réduit, dans un premier temps, le potentiel résiduel étant négligé, nous obtenons dans ce cas un système de A équations à un corps indépendantes tel que

$$(t + V_i) \varphi_i = h_i \varphi_i = e_i \varphi_i, \quad i = 1, \dots, A, \quad (1.2.4)$$

Dans cette expression, l'état du nucléon i est décrit par la fonction d'onde φ_i à laquelle nous pouvons associer l'énergie e_i . Si nous considérons maintenant l'équation de Schrödinger donnée par $H_0 \Phi = E_0 \Phi$ telle que $H_0 = \sum_i h_i$. nous avons alors la relation suivante :

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1, \sigma_1, q_1) & \varphi_2(\mathbf{r}_1, \sigma_1, q_1) & \dots & \varphi_A(\mathbf{r}_1, \sigma_1, q_1) \\ \varphi_1(\mathbf{r}_2, \sigma_2, q_2) & \varphi_2(\mathbf{r}_2, \sigma_2, q_2) & \dots & \varphi_A(\mathbf{r}_2, \sigma_2, q_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_1(\mathbf{r}_A, \sigma_A, q_A) & \varphi_2(\mathbf{r}_A, \sigma_A, q_A) & \dots & \varphi_A(\mathbf{r}_A, \sigma_A, q_A) \end{vmatrix}. \quad (1.2.5)$$

La fonction d'onde Φ de l'état d'un noyau de N nucléons s'écrit comme un déterminant de Slater formé à partir de fonctions d'onde individuelles $\varphi_i(\mathbf{r}_i, \sigma_i, q_i)$, où \mathbf{r}_i , σ_i et q_i désignent respectivement les coordonnées spatiales, de spin et d'isospin du i -ème nucléon. L'isospin prend la valeur $q_i = +1/2$ pour un proton et $q_i = -1/2$ pour un neutron.

Dans l'expression (1.2.5), $(\mathbf{r}_i, \sigma_i, q_i)$ représente l'ensemble des variables d'espace, de

spin et d'isospin du nucléon i considéré respectivement, soit $\xi_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i, q_i)$

$$\Phi(\xi_1, \dots, \xi_A) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\xi_1) & \cdots & \varphi_N(\xi_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(\xi_A) & \cdots & \varphi_N(\xi_A) \end{vmatrix}. \quad (1.2.6)$$

Cette structure garantit automatiquement le principe d'exclusion de Pauli : si deux orbitales deviennent identiques, deux colonnes du déterminant se confondent et la fonction d'onde s'annule. L'énergie correspondante est $E_0 = \sum_{i=1}^A e_i$.

L'approximation des particules indépendantes constitue le premier niveau de la description nucléaire. Pour obtenir une solution exacte de l'équation (1.2.1), il faudrait combiner une grande variété de déterminants de Slater, afin d'inclure l'interaction résiduelle H_1 (Eq. 1.2.3).

1.2.2 Modèle en couche

La limite la plus simple de l'approximation des particules indépendantes décrite à la section 1.2.1 est le modèle en couche, dans lequel chaque nucléon évolue dans un potentiel extérieur fixé. Ce modèle fournit une première représentation de la structure en niveaux du noyau et constitue le point de départ des approches microscopiques modernes. Dans sa forme la plus courante, le modèle en couche adopte un potentiel d'oscillateur harmonique tridimensionnel,

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (1.2.7)$$

où m est la masse du nucléon (proton ou neutron), ω est la pulsation du piège harmonique (paramètre réglant l'échelle des énergies), et r est la distance au centre du noyau. Ce potentiel possède l'avantage d'avoir des états propres analytiques et une structure en couches claire.

Les équations à une particule deviennent alors

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi_{nlm}(\mathbf{r}) = e_{nl} \varphi_{nlm}(\mathbf{r}), \quad (1.2.8)$$

pour lequel les états propres φ_{nlm} et les niveaux d'énergie individuels sont connus analytiquement. Les énergies individuelles sont données par

$$e_{nl} = \hbar \omega \left(2n + \ell + \frac{3}{2} \right). \quad (1.2.9)$$

où n est le nombre radial et ℓ le moment angulaire orbital. L'ajout d'un terme spin-orbite, essentiel pour reproduire les nombres magiques $V(r) = v_{ls}\ell \cdot \mathbf{s}$, où v_{ls} désigne l'intensité (ou la force) de l'interaction spin-orbite. Ce terme scinde les niveaux (n, ℓ) en doublets $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ et génère les grands écarts énergétiques observés expérimentalement. Les niveaux se réorganisent et définissent les couches nucléaires usuelles ($1s, 1p, 1d-2s, \dots$).

L'état fondamental du noyau est alors obtenu en remplissant les orbitales $(n\ell j)$ par $2j+1$ nucléons chacune dans l'ordre croissant des énergies à une particule, en respectant le principe de Pauli, jusqu'au niveau de Fermi. L'approximation correspond donc à un déterminant de Slater $|\Phi_0\rangle = \det|\varphi_1\varphi_2 \cdots \varphi_A|$. L'énergie du système dans cette approximation est simplement la somme des énergies à une particule $E_{shell} = \sum_{i=1}^A e_i$ ce qui reflète le caractère purement indépendant du modèle : l'interaction nucléon-nucléon n'apparaît que sous la forme d'un potentiel externe fixé.

Bien qu'extrêmement simple, ce modèle constitue un point de départ fondamental. D'une part, il explique qualitativement l'existence de structures en couches et les nombres magiques. D'autre part, il fournit une base analytique d'états $|\varphi_i\rangle$ dans laquelle toute méthode variationnelle ultérieure peut s'exprimer. C'est précisément cette idée, choisir un espace restreint d'états de particules indépendantes, puis optimiser ou non le potentiel associé, qui prépare naturellement la transition vers le principe variationnel de Ritz présenté dans la section suivante.

1.3 Principe variationnel de Ritz

L'un des outils fondamentaux en mécanique quantique pour estimer l'énergie de l'état fondamental est le principe variationnel de Ritz, nommé d'après le mathématicien Walter Ritz [62]. Il affirme que, pour tout opérateur hamiltonien \hat{H} et pour toute fonction d'essai normalisée $|\Psi\rangle$ du même espace de Hilbert que l'état fondamental, la valeur moyenne de \hat{H} sur $|\Psi\rangle$ est toujours supérieure ou égale à l'énergie de l'état fondamental E_0 :

$$E \equiv \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq E_0. \quad (1.3.1)$$

Pour démontrer cette propriété, on décompose l'hamiltonien sur la base orthonormée de ses états propres $\{|\nu\rangle\}$ qui forme une base de l'espace de Hilbert \mathcal{H} :

$$\hat{H}|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle, \quad \hat{H} = \sum_{\nu} E_\nu |\nu\rangle\langle\nu|, \quad (1.3.2)$$

où, par définition, $E_\nu \geq E_0$ pour tout ν .

Écrivons l'état d'essai $|\Psi\rangle$ dans cette base :

$$|\Psi\rangle = \sum_{\nu} C_{\nu} |\nu\rangle, \quad \text{avec} \quad \sum_{\nu} |C_{\nu}|^2 = 1. \quad (1.3.3)$$

En utilisant (1.3.2) et (1.3.3), on obtient

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{\nu, \mu} C_{\nu}^* C_{\mu} \langle \nu | \hat{H} | \mu \rangle = \sum_{\nu, \mu} C_{\nu}^* C_{\mu} E_{\mu} \langle \nu | \mu \rangle \\ &= \sum_{\nu} |C_{\nu}|^2 E_{\nu} \geq \sum_{\nu} |C_{\nu}|^2 E_0 = E_0 \sum_{\nu} |C_{\nu}|^2 = E_0, \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

ce qui prouve l'inégalité (1.3.1).

L'interprétation et l'utilisation pratique du principe de Ritz sont les suivantes : si l'on considère l'ensemble \mathcal{S} de toutes les fonctions d'essai normalisées alors

$$E_0 = \min_{|\Psi\rangle \in \mathcal{S}} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle. \quad (1.3.5)$$

En revanche, si l'on se restreint à un sous-espace $\mathcal{S}_{\text{trial}} \subset \mathcal{H}$ (par exemple le sous-espace des états de particules indépendantes ou un ensemble de fonctions d'essai paramétrées), la meilleure estimation de E_0 obtenue en minimisant l'espérance $\langle \chi | \hat{H} | \chi \rangle$ sur $|\chi\rangle \in \mathcal{S}_{\text{trial}}$ est donnée par

$$E_{\text{trial}}^{\min} \equiv \min_{|\chi\rangle \in \mathcal{S}_{\text{trial}}} \langle \chi | \hat{H} | \chi \rangle \geq E_0. \quad (1.3.6)$$

Autrement dit, toute minimisation effectuée dans un sous-espace donne une borne supérieure (au mieux égale) à l'énergie fondamentale réelle.

Ce principe est largement utilisé pour obtenir des approximations de la solution de l'équation de Schrödinger lorsque sa résolution exacte est hors de portée. En physique nucléaire, les nucléons sont fortement corrélés et un traitement exact du problème à N corps est, dans la pratique, impossible. Une démarche courante consiste alors à restreindre l'espace variationnel aux états de particules indépendantes, éventuellement en autorisant la rupture de certaines symétries afin de capturer une partie des corrélations. Le point de départ de cette approche est le modèle en couches, où chaque nucléon évolue dans un potentiel moyen fixé (par exemple un potentiel d'oscillateur harmonique). Une amélioration naturelle consiste ensuite à optimiser ce potentiel effectif en utilisant le principe variationnel de Ritz : la minimisation de l'énergie dans le sous-espace des déterminants de Slater conduit alors à la théorie de HF, qui fournit la meilleure

estimation variationnelle possible de E_0 dans ce cadre de particules indépendantes.

1.4 Minimisation Contrainte : la Méthode de Lagrange

Dans de nombreux problèmes de physique théorique et en particulier en physique nucléaire, il est nécessaire de minimiser une fonctionnelle d'énergie ou une fonctionnelle d'action sous certaines contraintes (par exemple la normalisation d'un état, la conservation d'un moment ou d'un nombre de particules). La méthode standard pour traiter de telles minimisations est la méthode des multiplicateurs de Lagrange. Nous en rappelons ici le principe général.

Minimisation libre

Considérons une fonction $F(x_1, \dots, x_N)$. Au point où F atteint un minimum, toute variation infinitésimale δx_i des variables laisse la valeur de F inchangée. La variation de F s'écrit

$$\delta F = \sum_{i=1}^N \frac{\partial F}{\partial x_i} \delta x_i. \quad (1.4.1)$$

Si les variables sont indépendantes, c'est-à-dire si aucune contrainte ne relie les x_i , alors la condition $\delta F = 0$ pour toute variation infinitésimale δx_i implique directement

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = 0, \quad \forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad (1.4.2)$$

qui est la condition classique d'annulation du gradient au minimum.

Minimisation sous contrainte

Supposons maintenant que les variables x_i ne soient plus libres, mais liées par une contrainte de la forme

$$G(x_1, \dots, x_N) = 0. \quad (1.4.3)$$

La condition $\delta F = 0$ n'est alors plus valable pour des variations indépendantes δx_i , car celles-ci doivent respecter la contrainte. Pour contourner cette difficulté, on introduit un multiplicateur de Lagrange λ et l'on considère la fonction modifiée

$$\mathcal{L}(x_1, \dots, x_N, \lambda) \equiv F(x_1, \dots, x_N) - \lambda G(x_1, \dots, x_N). \quad (1.4.4)$$

La minimisation sous contrainte revient alors à imposer $\delta\mathcal{L} = 0$, ce qui conduit aux équations d'Euler-Lagrange associées :

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_i} = 0 \implies \frac{\partial F}{\partial x_i} - \lambda \frac{\partial G}{\partial x_i} = 0, \quad \forall i, \quad (1.4.5)$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\lambda} = 0 \implies G(x_1, \dots, x_N) = 0. \quad (1.4.6)$$

Le multiplicateur λ est déterminé de telle sorte que la contrainte soit satisfaite au point où la fonction F est stationnaire sous cette contrainte.

Plusieurs contraintes

Si plusieurs contraintes sont présentes,

$$G_k(x_1, \dots, x_N) = 0, \quad k = 1, \dots, M, \quad (1.4.7)$$

on introduit un multiplicateur λ_k par contrainte et l'on définit $\mathcal{L} = F - \sum_{k=1}^M \lambda_k G_k$.

La condition $\delta\mathcal{L} = 0$ conduit au système

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^M \lambda_k \frac{\partial G_k}{\partial x_i} = 0, \quad G_k(x_1, \dots, x_N) = 0. \quad (1.4.8)$$

Ces équations permettent d'imposer simultanément toutes les contraintes lors de la minimisation.

La méthode de Lagrange joue un rôle essentiel en physique nucléaire, notamment dans les méthodes variationnelles appliquées à la théorie de HF, où les contraintes garantissent, par exemple, la normalisation des orbitales, le nombre de particules ou la conservation de certaines symétries du système.

1.5 Théorie de Hartree–Fock

La théorie de HF fournit un cadre variationnel microscopique permettant de traiter le problème nucléaire à N corps en le ramenant à une description auto-cohérente à particules indépendantes. Elle constitue le fondement théorique des approches de champ moyen, l'essence de cette théorie est donnée dans cette section.

1.5.1 Équations de HF

Les équations de HF résultent de l'application du principe variationnel de Ritz au sein d'un espace restreint d'états à particules indépendantes, c'est-à-dire l'ensemble des déterminants de Slater $\{|\Phi\rangle\}$. L'idée centrale est que l'état fondamental approché du noyau est obtenu en cherchant, parmi tous les déterminants possibles, celui qui minimise l'énergie totale. La condition variationnelle s'écrit $\delta E = 0$, où $E \equiv E[\rho]$ est l'énergie du système, exprimée comme une fonctionnelle de la matrice densité à un corps ρ , pour un déterminant de Slater, toute l'information physique à un corps est contenue dans la matrice densité. En effet, on a :

$$\rho(\xi, \xi') = \sum_{i=1}^N \varphi_i(\xi) \varphi_i^*(\xi'). \quad (1.5.1)$$

Les variables variationnelles sont donc les orbitales individuelles $\varphi_i(\xi)$. Pour appliquer correctement le principe variationnel, on autorise des variations indépendantes de $\varphi_i(\xi)$ et $\varphi_i^*(\xi)$, avant d'imposer à la fin qu'il s'agit bien de complexes conjugués.

Pour obtenir les équations HF, on applique le principe variationnel, sous la contrainte d'orthonormalisation des orbitales individuelles des nucléons :

$$\int d\xi \varphi_i^*(\xi) \varphi_j(\xi) = \delta_{ij}. \quad (1.5.2)$$

ce qui impose N^2 contraintes (une pour chaque paire i, j). On les introduit grâce à des multiplicateurs de Lagrange λ_{ij} .

La méthode décrite dans la section 1.4 s'applique en remplaçant F par $E[\rho]$ et $G = 0$ par $\int d\xi \varphi_i^*(\xi) \varphi_j(\xi) - \delta_{ij} = 0$. On a donc :

$$\delta \left[E[\rho] - \sum_{ij=1}^N \lambda_{ij} \left(\int d\xi \varphi_i^*(\xi) \varphi_j(\xi) - \delta_{ij} \right) \right] = 0, \quad (1.5.3)$$

qui est équivalent au jeu de $2N$ équations

$$\left(\frac{\delta}{\delta \varphi_i^*(\xi)} \left[E[\rho] - \sum \dots \right] = 0 \quad , \quad \frac{\delta}{\delta \varphi_i(\xi)} \left[E[\rho] - \sum \dots \right] = 0 \right)_{i=1 \dots N}. \quad (1.5.4)$$

Variation par rapport à φ^*

Commençons par la variation par rapport à φ^* , ce qui constitue la première moitié du système variationnel. Comme E dépend d'une infinité de variables $\rho(\xi, \xi')$, la

variation de E s'écrit comme une somme (continue) des dérivées de E par rapport à chacune de ces variables :

$$\delta E[\rho] = \int d\xi d\xi' \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\xi, \xi')} \delta \rho(\xi, \xi'). \quad (1.5.5)$$

Pour calculer la variation de E par rapport à $\varphi_i^*(\xi)$, on applique la règle de dérivation en chaîne :

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \varphi_i^*(\xi)} = \int d\xi' d\xi'' \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\xi', \xi'')} \frac{\delta \rho(\xi', \xi'')}{\delta \varphi_i^*(\xi)}. \quad (1.5.6)$$

Définissons la quantité

$$h(\xi, \xi') = \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\xi', \xi)}, \quad (1.5.7)$$

dont on verra le sens physique plus tard. D'autre part, On dérive l'expression (1.5.1) par rapport à $\varphi_i^*(\xi)$:

$$\frac{\delta \rho(\xi', \xi'')}{\delta \varphi_i^*(\xi)} = \frac{\delta}{\delta \varphi_i^*(\xi)} \sum_{j=1}^N \varphi_j(\xi') \varphi_j^*(\xi'') = \sum_{j=1}^N \frac{\delta \varphi_j^*(\xi'')}{\delta \varphi_i^*(\xi)} \varphi_j(\xi'). \quad (1.5.8)$$

En effet, φ et φ^* étant considérées comme indépendantes, on a $\delta \varphi_j(\xi') / \delta \varphi_i^*(\xi) = 0$. De plus, si $i = j$ et $\xi = \xi''$, alors $\varphi_j^*(\xi'')$ et $\varphi_i^*(\xi)$ sont la même variable, ce qui se traduit par $\frac{\delta \varphi_j^*(\xi'')}{\delta \varphi_i^*(\xi)} = \delta(\xi - \xi'') \delta_{ij}$.

En insérant les expressions précédentes dans (1.5.6), on obtient :

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \varphi_i^*(\xi)} = \int d\xi' h(\xi, \xi') \varphi_i(\xi'). \quad (1.5.9)$$

La variation de la contrainte (1.5.2) par rapport à $\varphi_i^*(\xi)$ donne quant à elle

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \varphi_i^*(\xi)} \sum_{j,k=1}^N \lambda_{jk} \left(\int d\xi' \varphi_j^*(\xi') \varphi_k(\xi') - \delta_{jk} \right) &= \sum_{j,k=1}^N \lambda_{jk} \int d\xi' \frac{\delta \varphi_j^*(\xi')}{\delta \varphi_i^*(\xi)} \varphi_k(\xi') \\ &= \sum_{k=1}^N \lambda_{ik} \varphi_k(\xi). \end{aligned} \quad (1.5.10)$$

En réunissant la variation de l'énergie (1.5.9) et celle des contraintes (1.5.10), on

obtient les équations

$$\int d\xi' h(\xi, \xi') \varphi_i(\xi') - \sum_{j=1}^N \lambda_{ij} \varphi_j(\xi) = 0. \quad (1.5.11)$$

Variation par rapport à φ

La variation sur $\varphi_i(\xi)$ donne, de manière équivalente,

$$\int d\xi' \varphi_i^*(\xi') h(\xi', \xi) - \sum_{j=1}^N \varphi_j^*(\xi) \lambda_{ji} = 0. \quad (1.5.12)$$

Cependant, cette équation a été obtenue en considérant φ et φ^* comme des variables indépendantes. Or, physiquement, les orbitales doivent vérifier φ_i^* est le complexe conjuguée de φ_i . Cette propriété assure notamment l'hermiticité de ρ , c'est-à-dire $\rho(\xi, \xi') = \rho^*(\xi', \xi)$. Elle assure aussi que l'énergie E doit être réelle et que l'opérateur h doit être hermitien. Pour restaurer ces propriétés physiques, on prend le complexe conjugué de l'équation (1.5.12), on obtient

$$\int d\xi' h(\xi, \xi') \varphi_i(\xi') - \sum_{j=1}^N \lambda_{ji}^* \varphi_j(\xi) = 0, \quad (1.5.13)$$

Cette équation devient identique à l'équation obtenue précédemment pour la variation sur φ_i^* (1.5.11), à condition d'imposer que la matrice des multiplicateurs de Lagrange soit hermitienne, c'est-à-dire $\lambda_{ij} = \lambda_{ji}^*$. Avec cette condition, les N équations obtenues à partir de la variation sur φ_i^* (1.5.11) constituent un système fermé et suffisant : il n'est plus nécessaire d'utiliser (1.5.12). En effet, λ ne couple pas les états φ occupés aux états inoccupés.

Réduction des multiplicateurs de Lagrange

Toutes les combinaisons linéaires des orbitales φ_i qui conduisent à la même matrice densité à un corps (et qui décrivent donc le même état physique, puisque toute l'information d'un état de particules indépendantes est contenue dans ρ) sont solutions des équations HF (1.5.11). Autrement dit, les fonctions φ_i ne sont pas définies de manière unique : toute transformation unitaire $\varphi_i \rightarrow \sum_j U_{ij} \varphi_j$, préserve la matrice densité (1.5.1) dès lors que U est unitaire. Cette liberté permet un choix particulièrement utile : la diagonalisation de la matrice des multiplicateurs de Lagrange λ . On peut en effet

toujours choisir une base d'orbitales HF telle que

$$\lambda_{ij} = \varepsilon_i \delta_{ij}, \quad (1.5.14)$$

où les ε_i sont réels, ce qui garantit l'hermiticité de λ . Dans cette base, les équations obtenues précédemment se simplifient pour donner les équations de HF :

$$\int d\xi' h(\xi, \xi') \varphi_i(\xi') = \varepsilon_i \varphi_i(\xi), \quad (1.5.15)$$

ou, sous une forme plus compacte (matricielle),

$$h \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i. \quad (1.5.16)$$

Ces équations ressemblent formellement à un problème aux valeurs propres, même si, en pratique, elles doivent être résolues de manière auto-consistante puisque l'opérateur h dépend lui-même des orbitales via la densité ρ . L'opérateur h est appelé hamiltonien effectif à une particule de HF. Les quantités ε_i sont les énergies des orbitales HF. Elles constituent des indicateurs précieux, mais ne correspondent pas directement aux niveaux d'énergie nucléaires observables ; cette distinction sera discutée dans la section consacrée à l'interprétation physique du champ-moyen, voir section 1.5.2.

1.5.2 Hamiltonien de HF

Valeur moyenne de \hat{H}

Dans la théorie HF originale, on est supposé connaître l'hamiltonien \hat{H} du système et on calcule h à partir de l'équation (1.5.7) en prenant $E[\rho] = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$. C'est notamment comme cela qu'on résout le problème HF en physique atomique. Cet hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad (1.5.17)$$

où l'opérateur d'énergie cinétique est donné par :

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^A \hat{t}(i), \quad \hat{t} = \frac{\hat{p}^2}{2m_{q_i}} = -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_{q_i}}, \quad (1.5.18)$$

d'où

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^A \frac{\nabla_i^2}{m_{q_i}}$$

et où l'interaction à deux corps $\hat{v}(i, j)$ est composée de l'interaction effective nucléon-nucléon \hat{v}_{ij}^{NN} et de l'interaction de Coulomb $\hat{v}_{ij}^{\text{Coul}}$:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \hat{v}(i, j) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (\hat{v}_{ij}^{NN} + \hat{v}_{ij}^{\text{Coul}}). \quad (1.5.19)$$

Les valeurs moyennes de \hat{T} et \hat{V} sur l'état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$ s'obtiennent en utilisant ces expressions générales. En particulier, la valeur moyenne d'un opérateur à un corps s'écrit sous la forme

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = \int d\xi d\xi' f(\xi, \xi') \rho(\xi', \xi) = Tr\{f \hat{\rho}\} = Tr\{\hat{\rho} f\}, \quad (1.5.20)$$

l'opérateur à deux corps possède la structure générale

$$\hat{F} = \sum_{i, j=1}^N \hat{f}(i, j), \quad (1.5.21)$$

et sa valeur moyenne est donnée par

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = \int d\xi_1 d\xi_2 d\xi'_1 d\xi'_2 \rho^{(2)}(\xi_1 \xi_2 \xi'_1 \xi'_2) f(\xi'_1 \xi'_2 \xi_1 \xi_2) = Tr_{12}\{\rho(1, 2)f(1, 2)\}. \quad (1.5.22)$$

Ces trois formules permettent d'évaluer rigoureusement les contributions cinétique et d'interaction dans la théorie de HF. On prendra en particulier garde au facteur $\frac{1}{2}$ présent dans la définition de l'opérateur d'interaction à deux corps, contrairement à l'expression (1.5.21).

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle_{\Phi} &= Tr_1\{\rho(1)t(1)\} \\ &= \int d\xi d\xi' \rho(\xi \xi') t(\xi' \xi), \end{aligned} \quad (1.5.23)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle_{\Phi} &= \frac{1}{2} Tr_{12}\{\rho(1, 2)v(1, 2)\} \\ &= \frac{1}{2} Tr_{12}\{\rho(1)\rho(2)(1 - P_{12})v(1, 2)\} \\ &= \frac{1}{2} Tr_{12}\{\rho(1)\rho(2)\bar{v}(1, 2)\} \\ &= \frac{1}{2} \int d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 d\xi_4 \rho(\xi_1 \xi_2) \rho(\xi_3 \xi_4) \bar{v}(\xi_2 \xi_4 \xi_1 \xi_3), \end{aligned} \quad (1.5.24)$$

où l'on a introduit l'interaction antisymétrisée définie par $\bar{v}(\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4) = v(\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4) - v(\xi_1 \xi_2 \xi_4 \xi_3)$, qui incorpore automatiquement l'échange des degrés de liberté des deux

particules, comme exigé pour un système de fermions. De plus, dans le cas particulier d'un état de particules indépendantes représenté par un déterminant de Slater, nous avons utilisé l'expression simplifiée de la matrice densité à deux corps, $\rho^{(2)} \equiv \rho^{(1,2)} = \rho^{(1)}\rho^{(2)}(1 - P_{12})$, laquelle résulte directement de l'application des propriétés d'antisymétrie des déterminants. Cette relation permet d'exprimer la valeur moyenne de l'interaction à deux corps \hat{V} en fonction uniquement de la densité à un corps et de la partie antisymétrisée de l'interaction, ce qui constitue un résultat central pour la formulation de la théorie de HF.

Champ moyen

On a vu que la dérivée fonctionnelle de l'énergie donne l'hamiltonien à une particule de HF :

$$h(\xi, \xi') = \frac{\delta E}{\delta \rho(\xi', \xi)} = \frac{\delta \langle \hat{H} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi', \xi)} = \frac{\delta \langle \hat{T} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi', \xi)} + \frac{\delta \langle \hat{V} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi', \xi)}. \quad (1.5.25)$$

En utilisant les valeurs moyennes de \hat{T} et \hat{V} sur un état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$ (équations (1.5.23) et (1.5.24)), on obtient on obtient :

$$\frac{\delta \langle \hat{T} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi', \xi)} = t(\xi, \xi'), \quad (1.5.26)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta \langle \hat{V} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi', \xi)} &= \frac{1}{2} \left[\int d\xi_3 d\xi_4 \rho(\xi_3 \xi_4) \bar{v}(\xi \xi_4 \xi' \xi_3) + \int d\xi_1 d\xi_2 \rho(\xi_1 \xi_2) \bar{v}(\xi_2 \xi \xi_1 \xi') \right] \\ &= \int d\xi_1 d\xi_2 \rho(\xi_1 \xi_2) \bar{v}(\xi \xi_2 \xi' \xi_1) \\ &= U(\xi \xi'). \end{aligned} \quad (1.5.27)$$

où on a utilisé $\bar{v}(\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4) = \bar{v}(\xi_2 \xi_1 \xi_4 \xi_3)$. La matrice U est un potentiel à une particule appelé champ moyen HF. On peut aussi l'écrire :

$$U(1) = \text{Tr}_2\{\rho^{(2)} \bar{v}(1, 2)\}, \quad (1.5.28)$$

où la trace est une trace partielle (sur les degrés de liberté associés à la particule 2 uniquement).

On constate que le champ moyen HF dépend explicitement de la densité du système. On dit alors qu'il est auto-cohérent. Ce champ moyen représente le « milieu effectif » dans lequel évoluent les nucléons : il agit comme un potentiel extérieur pour chaque nucléon, mais résume en réalité l'effet moyen de toutes les interactions avec les autres particules. Il peut être démontré que le champ moyen HF constitue le meilleur

champ moyen possible dans l'espace variationnel des états de particules indépendantes. À l'inverse, si l'on remplace ce potentiel auto-cohérent par un potentiel imposé, par exemple un potentiel d'oscillateur harmonique, on perd cette auto-cohérence et l'on revient alors au modèle en couches dans lequel les orbitales ne sont plus déterminées de façon variationnelle mais imposées par la forme du potentiel choisi (Comme nous l'avons discuté dans le paragraphe 1.2.2).

L'équation de HF n'est pas, à proprement parler, une équation aux valeurs propres pour l'opérateur h , dans la mesure où celui-ci dépend explicitement de la matrice densité ρ , laquelle dépend elle-même des orbitales que l'on cherche à déterminer ($h \equiv h[\rho]$). Cette dépendance implique que l'équation HF est intrinsèquement non linéaire, à la différence de l'équation de Schrödinger. Une telle non-linéarité complique la résolution pratique du problème HF, mais constitue le prix à payer pour pouvoir décrire le système nucléaire à l'aide d'un état de particules indépendantes.

1.5.3 Forme de Liouville de l'équation HF

L'hamiltonien à une particule de HF, noté h , peut être représenté comme une matrice dans une base de degrés de liberté à une particule, par exemple la base $\{rsq\}$. Cette matrice correspond à un opérateur \hat{h} agissant dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}^{(1)}$ et défini par

$$h(\xi, \xi') = \langle \xi | \hat{h} | \xi' \rangle. \quad (1.5.29)$$

On peut alors reconstruire l'opérateur à partir de ses éléments de matrice sous la forme

$$\hat{h} = \int d\xi d\xi' h(\xi, \xi') |\xi\rangle \langle \xi'|. \quad (1.5.30)$$

Dans cet espace à une particule, les équations de HF obtenues précédemment s'écrivent

$$\hat{h} |\varphi_i\rangle = e_i |\varphi_i\rangle, \quad (1.5.31)$$

où $i = 1, \dots, N$, chaque $|\varphi_i\rangle$ représentant une orbitale occupée, et où e_i est le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte d'orthonormalité. Bien que Eq. (1.5.31) ait formellement la structure d'une équation aux valeurs propres, il ne s'agit pas d'un véritable problème spectral puisque \hat{h} dépend de la matrice densité ρ , elle-même fonction des φ_i : il faut donc résoudre (1.5.31) de manière auto-cohérente.

On multiplie (1.5.31) à droite par $\langle \varphi_i |$ puis on somme sur les états occupés. En

utilisant la définition de la matrice densité à un corps, $\hat{\rho} = \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$, on obtient

$$\hat{h}\hat{\rho} = \sum_{i=1}^N e_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|. \quad (1.5.32)$$

On procède ensuite de manière symétrique à partir de l'équation hermitienne conjuguée de (1.5.31),

$$\langle\varphi_i|\hat{h} = e_i \langle\varphi_i|, \quad (1.5.33)$$

que l'on multiplie cette fois-ci à gauche par $|\varphi_i\rangle$ avant de sommer sur les états occupés. On obtient ainsi

$$\hat{\rho}\hat{h} = \sum_{i=1}^N e_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|. \quad (1.5.34)$$

Puisque l'opérateur \hat{h} est hermitien ($\hat{h}^\dagger = \hat{h}$), les seconds membres de (1.5.32) et (1.5.34) sont identiques. En soustrayant ces deux équations, on en déduit immédiatement

$$[\hat{h}, \hat{\rho}] = \hat{h}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{h} = 0, \quad (1.5.35)$$

qui constitue la forme de Liouville des équations de HF. Cette relation exprime que la matrice densité $\hat{\rho}$ commute avec l'hamiltonien HF. Elle implique que \hat{h} et $\hat{\rho}$ peuvent être diagonalisés simultanément et que les orbitales HF sont des états propres de \hat{h} : il s'agit d'une propriété fondamentale de la théorie de HF.

1.5.4 Énergie HF

Partons de l'expression de la valeur moyenne du hamiltonien complet \hat{H} dans un état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$. D'après les formules établies dans la section 1.5.2, on peut écrire

$$\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle = Tr_1\{\rho(1)t(1)\} + \frac{1}{2}Tr_1\{\rho(1)\rho(2)\bar{v}(1,2)\}, \quad (1.5.36)$$

La contribution d'interaction peut être réécrite en introduisant le champ moyen HF défini par 1.5.2, on obtient alors

$$\begin{aligned} Tr_{12}\{\rho(1)\rho(2)\bar{v}(1,2)\} &= Tr_1\{\rho(1)Tr_2[\rho(2)\bar{v}(1,2)]\} \\ &= Tr_1\{\rho(1)U(1)\}. \end{aligned} \quad (1.5.37)$$

L'énergie HF peut donc s'exprimer uniquement en termes d'opérateurs à un corps :

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_{\Phi} &= Tr_1 \{ \rho(1) t(1) \} + \frac{1}{2} Tr_1 \{ \rho(1) U(1) \} \\ &= \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i | \left(\hat{t} + \frac{1}{2} \hat{U} \right) | \varphi_i \rangle, \end{aligned} \quad (1.5.38)$$

où $\hat{U} = \int d\xi d\xi' U(\xi, \xi') |\xi\rangle \langle \xi'|$ l'opérateur de champ moyen HF, représenté par U , et agissant dans $\mathcal{H}^{(1)}$.

D'autre part, les états à une particule $|\varphi_i\rangle$ sont états propres de \hat{h} (cf. Eq. (1.5.31))

$$\hat{h} |\varphi_i\rangle = e_i |\varphi_i\rangle, \quad \hat{h} = \hat{t} + \hat{U}, \quad (1.5.39)$$

ce qui implique

$$\langle \varphi_i | \hat{t} + \hat{U} | \varphi_i \rangle = e_i. \quad (1.5.40)$$

On en déduit donc l'expression de l'énergie HF en fonction des énergies à une particule e_i :

$$\langle \hat{H} \rangle_{\Phi} = \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i | \left(\hat{t} + \hat{U} - \frac{1}{2} \hat{U} \right) | \varphi_i \rangle = \sum_{i=1}^N e_i - \frac{1}{2} \left\langle \sum_{i=1}^N \hat{U}(i) \right\rangle_{\Phi}, \quad (1.5.41)$$

d'où finalement

$$E_{\text{HF}} = \sum_{i=1}^N e_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i | \hat{U} | \varphi_i \rangle. \quad (1.5.42)$$

Nous avons remplacé le problème initial à N corps par un problème plus simple : la recherche des valeurs propres de l'énergie pour chaque particule prise individuellement. Les particules occupent ensuite les états de plus basse énergie disponibles (conformément au schéma 1.5.1) afin de minimiser l'énergie totale du système. On remarque que l'énergie HF n'est pas simplement la somme des énergies e_i des orbitales à une particule, contrairement à ce que donnerait un véritable modèle de particules indépendantes. Cette différence provient de l'auto-cohérence du champ moyen $U \equiv U[\rho]$: le potentiel dans lequel se déplacent les nucléons dépend lui-même de la densité, donc des orbitales que l'on cherche à déterminer. Les équations HF sont ainsi non linéaires, et cette non-linéarité reflète le fait que la théorie HF n'est pas un modèle strictement indépendant, même si l'état est représenté par un déterminant de Slater. Une partie des corrélations entre nucléons est effectivement intégrée dans cette auto-cohérence du champ moyen, ce qui distingue HF d'un simple modèle en couche basé sur un potentiel

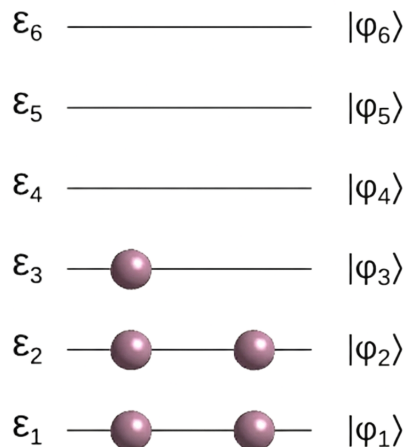


FIGURE 1.5.1 – Schéma d’occupation des. Les particules occupent les états de plus basse énergie afin de minimiser l’énergie totale du système.

extérieur imposé.

Ainsi, le modèle en couche décrit les nucléons comme des particules indépendantes évoluant dans un potentiel extérieur fixé. Ce champ moyen n’est pas déterminé par les nucléons et ne tient pas compte de leur effet réciproque sur le potentiel. Il constitue donc une approximation plus restrictive que HF. La démarche HF consiste au contraire à optimiser le champ moyen en appliquant le principe variationnel à l’espace des déterminants de Slater, $\delta E[\rho] = 0$ (on a déjà vu dans le paragraphe 1.3) ce qui permet de déterminer auto-consistamment le potentiel dans lequel les nucléons se meuvent. Cette optimisation, absente du modèle en couche, conduit naturellement aux équations auto-cohérentes de HF, qui définissent le meilleur champ moyen compatible avec la structure d’un déterminant de Slater.

1.6 Hartree–Fock avec l’interaction de Skyrme

L’application pratique de la méthode de HF en physique nucléaire nécessite l’emploi d’interactions effectives adaptées au milieu nucléaire, en raison des limitations fondamentales de l’interaction nucléon-nucléon nue. Cette section introduit le cadre conceptuel menant aux interactions effectives de type Skyrme, qui permettent une description auto-cohérente et numériquement efficace des noyaux finis.

1.6.1 Problème du cœur dur et limite de HF avec l'interaction nue

Jusqu'ici, nous n'avons pas précisé la forme explicite de l'interaction entre les nucléons. L'étude détaillée de cette interaction constitue en elle-même un domaine de recherche considérable ; souvent l'objet d'une thèse entière ; et dépasse le cadre du présent travail. L'interaction nucléon-nucléon nue présente une caractéristique essentielle : une forte répulsion à très courte distance, appelée cœur dur, qui rend le potentiel pratiquement infini dès que deux nucléons s'approchent à moins de $r_c \simeq 0.5$ fm. Cette propriété distingue nettement l'interaction nucléaire de l'interaction coulombienne entre électrons et induit des corrélations à très courte portée dans l'état exact d'un noyau.

Dans la théorie HF, le champ moyen s'écrit sous la forme

$$U(\mathbf{r}) = \int \rho(\mathbf{r}') v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d^3r'. \quad (1.6.1)$$

Si l'on insère l'interaction nue contenant un cœur dur, le potentiel $v(r)$ devient infini pour $r < r_c$. Or, dans un état de particules indépendantes (déterminant de Slater), la densité $\rho(\mathbf{r})$ est non nulle partout dans le volume nucléaire, y compris dans la région $r < r_c$. Par conséquent,

$$U(\mathbf{r}) \sim \int_0^{r_c} \rho(\mathbf{r}') \infty d^3r' = \infty, \quad (1.6.2)$$

et le champ moyen diverge. Cette divergence montre que la méthode HF standard est inapplicable avec l'interaction nue, qui génère une énergie potentielle infinie pour un état non corrélé. En réalité, l'état exact du noyau présente des corrélations de courte portée : la probabilité de trouver deux nucléons à une distance inférieure au cœur dur est pratiquement nulle. Ainsi, $\langle \Psi | \hat{V} | \Psi \rangle$ reste fini, contrairement à $\langle \Phi | \hat{V} | \Phi \rangle$ pour un état indépendant de type Slater. Les corrélations induites par le cœur dur ne peuvent donc pas être générées par une simple brisure de symétrie ni par le schéma HF lui-même.

Dans un noyau, la distance moyenne entre deux nucléons voisins est d'environ 2.2 fm, bien supérieure à r_c . Cette séparation est imposée principalement par le principe de Pauli, si bien que les nucléons rencontrent rarement le cœur dur. Cependant, lorsque ces rencontres surviennent, elles sont suffisamment violentes pour imposer l'existence de corrélations à courte portée qu'un modèle HF ne peut reproduire.

Ces considérations justifient l'usage, en physique nucléaire, d'une autre approche. La divergence du champ moyen HF en présence de l'interaction nue met en évidence un point essentiel : les corrélations induites par le cœur dur ne peuvent pas être décrites à partir d'un simple état de particules indépendantes. Il devient alors nécessaire

de modifier la manière dont cette interaction est traitée. Plutôt que d'abandonner le schéma de particules indépendantes, une alternative consiste à renormaliser l'interaction elle-même de façon à incorporer explicitement les corrélations à courte portée tout en préservant la structure du formalisme HF. C'est précisément l'idée développée par Brueckner, présentée dans la section suivante.

1.6.2 Approche de Brueckner

L'interaction nucléon-nucléon nue ne peut pas être utilisée dans le schéma HF en raison de la présence d'un cœur dur, qui rend l'énergie potentielle infinie pour un état non corrélé. Pour remédier à cette difficulté, Brueckner propose d'incorporer les corrélations à courte portée directement dans l'interaction plutôt que dans l'état. L'idée consiste à définir une interaction effective \hat{G} telle que son action sur un état indépendant $|\Phi\rangle$ reproduise l'effet de l'interaction nue \hat{V} sur l'état corrélé $|\Psi\rangle$:

$$\hat{V}|\Psi\rangle = \hat{G}|\Phi\rangle. \quad (1.6.3)$$

L'opérateur \hat{G} , obtenu à partir de la théorie de Brueckner, représente la somme des interactions à deux corps renormalisées dans le milieu. Il inclut les effets des collisions répétées entre nucléons ainsi que les contraintes du principe de Pauli. Il dépend de l'état $|\Phi\rangle$ sur lequel il agit, et donc de la densité du système.

L'énergie totale de l'état fondamental corrélé peut alors s'écrire sous une forme analogue à celle du schéma HF (l'Eq. (1.5.36)) :

$$E = \text{Tr}\{\rho t\} + \frac{1}{2} \text{Tr}\{\rho \rho \bar{g}\}, \quad (1.6.4)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= \langle \Phi | \hat{T} | \Phi \rangle + \langle \Phi | \hat{G} | \Phi \rangle \\ &= \text{Tr}_1\{\rho(1)t(1)\} + \frac{1}{2} \text{Tr}_{12}\{\rho(1)\rho(2)\bar{g}(1,2)\} \end{aligned} \quad (1.6.5)$$

où \bar{g} désigne l'interaction effective antisymétrisée. Cette expression montre que le calcul du champ moyen doit être effectué non pas avec l'interaction nue, qui diverge, mais avec l'interaction effective g intégrant les corrélations à courte portée.

Cette approche définit la théorie BHF, dont l'objectif est de déterminer simultanément l'état indépendant $|\Phi\rangle$ et l'interaction effective \hat{G} . En pratique, l'application de cette théorie aux noyaux finis est extrêmement lourde en raison de son caractère auto-cohérent complexe, où la densité varie spatialement. Cette approche est essentiellement appliquée à la matière nucléaire infinie homogène. Dans notre étude, qui concerne un

noyau fini, on utilise plutôt des interactions effectives inspirées conceptuellement de Brueckner mais adaptées aux systèmes finis.

1.6.3 Méthode de la Fonctionnelle de la Densité d'Énergie

Les interactions effectives phénoménologiques constituent une alternative pratique à l'approche de Brueckner. Inspirées de la forme de l'interaction effective G , elles sont construites de manière à incorporer explicitement les effets de milieu, notamment la dépendance en densité et les corrélations de courte portée, tout en évitant la présence d'un cœur dur. Elles permettent ainsi d'appliquer de façon stable et précise la théorie de HF à des systèmes nucléaires finis (noyaux réels).

Ces interactions effectives sont au cœur de la méthode de la Fonctionnelle de la Densité d'Énergie (Energy Density Functional - EDF), une approche conceptuellement proche de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (Density Functional Theory - DFT) utilisée en matière condensée, bien que son développement en physique nucléaire repose plus directement sur l'idée d'interaction effective que sur un théorème fondamental analogue à celui de Hohenberg-Kohn [63]. L'objectif des théories EDF est d'exprimer l'énergie d'un système nucléaire en fonction de la densité à un corps et de la densité anormale lorsque l'appariement est inclus (voir section 1.7.3) à l'aide d'une fonctionnelle dont les paramètres sont ajustés directement aux données expérimentales. En pratique, la fonctionnelle est obtenue en partant d'interactions effectives dans différents canaux et en appliquant un schéma proche de HF.

Deux formes principales existent : l'interaction de Skyrme [64], de portée nulle et localisée, et l'interaction de Gogny [7], à portée finie. Ces interactions sont ajustées de façon phénoménologique pour reproduire les propriétés globales de la matière nucléaire, telles que la densité de saturation et l'énergie de liaison par nucléon. Elles fournissent une description réaliste et efficace des noyaux, depuis les systèmes légers jusqu'aux noyaux super-lourds, et sont largement utilisées dans les calculs de structure nucléaire modernes.

1.6.4 Fonctionnelle de densité d'énergie de Skyrme

Les interactions effectives employées en physique nucléaire se répartissent généralement en deux catégories : les interactions de portée finie, telles que celles de Gogny, et les interactions de portée nulle, représentées par les interactions de Skyrme. Ces dernières présentent l'avantage d'être beaucoup moins coûteuses du point de vue numérique, ce qui motive leur utilisation dans nos calculs. Dans ce travail, nous adoptons

TABLE 1.1 – Paramétrisations des forces de Skyrme.

Paramètre	Sly4 [65]	SIII [66]	SGII [67]	SkM* [68]
$t_0(\text{MeV}\cdot\text{fm}^3)$	-2488.91	-1128.75	-2645.00	-2645.00
$t_1(\text{MeV}\cdot\text{fm}^5)$	486.82	395.00	340.00	410.00
$t_2(\text{MeV}\cdot\text{fm}^5)$	-546.39	-95.00	-41.90	-135.00
$t_3(\text{MeV}\cdot\text{fm}^{3(1+\alpha)})$	13777.0	14000.0	15595.0	15595.0
x_0	0.834	0.450	0.090	0.090
x_1	-0.344	0.000	0.000	0.000
x_2	-1.000	0.000	1.425	0.000
x_3	1.354	1.000	0.06044	0.000
$W_0(\text{MeV}\cdot\text{fm}^5)$	123.0	120.0	105.0	130.0
α	1/6	1	1/6	1/6

la paramétrisation standard suivante de l'interaction effective nucléon-nucléon (NN) de type Skyrme, telle qu'utilisée notamment dans Réf. [64] :

$$\begin{aligned}
 V_{Sky} = v_{ij}^{NN} = & t_0 (1 + x_0 P_{ij}^\sigma) \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \\
 & + \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_{ij}^\sigma) \left[\overleftarrow{k}_{ij}^2 \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \overrightarrow{k}_{ij}^2 \right] \\
 & + t_2 (1 + x_2 P_{ij}^\sigma) \overleftarrow{k}_{ij} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \overrightarrow{k}_{ij} \\
 & + \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_{ij}^\sigma) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j}{2} \right) \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \\
 & + iW_0 \overleftarrow{k}_{ij} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) (\overrightarrow{\sigma}_1 + \overrightarrow{\sigma}_2) \times \overrightarrow{k}_{ij},
 \end{aligned} \tag{1.6.6}$$

où $P_{ij}^\sigma = 1/2(1 + \overrightarrow{\sigma}_i \cdot \overrightarrow{\sigma}_j)$ désigne l'opérateur d'échange de spin et t_i , x_i , α et W_0 sont les paramètres de l'interaction de Skyrme. Les opérateurs d'impulsion $\overrightarrow{k}_{ij} = -\frac{i}{2} (\overrightarrow{\nabla}_i - \overrightarrow{\nabla}_j)$ et $\overleftarrow{k}_{ij} = \frac{i}{2} (\overleftarrow{\nabla}_i - \overleftarrow{\nabla}_j)$ agissent respectivement vers la droite et vers la gauche, tandis que σ représente les opérateurs de spin de Pauli.

Les paramètres de l'interaction de Skyrme sont déterminés en ajustant les résultats HF aux données expérimentales disponibles. Les valeurs des différents paramètres des fonctionnelles de Skyrme sont données pour SLy4 [65], SIII [66], SGII [67] et SkM* [68] (voir tableau 1.1).

L'énergie totale est donnée par :

$$\begin{aligned}
 E = \langle \Phi | H | \Phi \rangle & = \left\langle \Phi \left| T + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (v_{ij}^{NN} + v_{ij}^{\text{Coul}}) \right| \Phi \right\rangle \\
 & = \int [\mathcal{K}(r) + \mathcal{H}_{\text{Skyrme}}(r) + \mathcal{H}_{\text{Coul}}(r)] d^3\mathbf{r} = \int \mathcal{H}(r) d^3\mathbf{r}.
 \end{aligned} \tag{1.6.7}$$

La densité d'énergie cinétique est donnée par

$$\mathcal{K}(r) = \frac{\hbar^2}{2m_p} \tau_p(r) + \frac{\hbar^2}{2m_n} \tau_n(r). \quad (1.6.8)$$

L'expression de la densité locale d'énergie de Skyrme, dérivée en détail dans [14], est

$$\mathcal{H}_{\text{Skyrme}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_{\text{eff}} + \mathcal{H}_{\text{fin}} + \mathcal{H}_{\text{so}} + \mathcal{H}_{\text{sg}}, \quad (1.6.9)$$

où \mathcal{H}_0 est le terme de portée nulle ; \mathcal{H}_3 terme dépendant de la densité ; \mathcal{H}_{eff} terme de masse effective ; \mathcal{H}_{fin} terme de portée finie ; \mathcal{H}_{so} terme spin-orbite ; \mathcal{H}_{sg} terme couplant spin et gradient. Pour l'interaction définie par (1.6.6), on obtient :

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{4} t_0 [(2 + x_0) \rho^2 - (2x_0 + 1)(\rho_p^2 + \rho_n^2)], \quad (1.6.10)$$

$$\mathcal{H}_3 = \frac{1}{24} t_3 \rho^\alpha [(2 + x_3) \rho^2 - (2x_3 + 1)(\rho_p^2 + \rho_n^2)], \quad (1.6.11)$$

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{1}{8} [t_1(2 + x_1) + t_2(2 + x_2)] \tau \rho + \frac{1}{8} [t_2(2x_2 + 1) - t_1(2x_1 + 1)] (\tau_p \rho_p + \tau_n \rho_n), \quad (1.6.12)$$

$$\mathcal{H}_{\text{fin}} = \frac{1}{32} [3t_1(2 + x_1) - t_2(2 + x_2)] (\vec{\nabla} \rho)^2 - \frac{1}{32} [3t_1(2x_1 + 1) + t_2(2x_2 + 1)] [(\vec{\nabla} \rho_p)^2 + (\vec{\nabla} \rho_n)^2], \quad (1.6.13)$$

$$\mathcal{H}_{\text{so}} = \frac{W_0}{2} (\mathbf{J} \cdot \vec{\nabla} \rho + \mathbf{J}_p \cdot \vec{\nabla} \rho_p + \mathbf{J}_n \cdot \vec{\nabla} \rho_n), \quad (1.6.14)$$

$$\mathcal{H}_{\text{sg}} = -\frac{1}{16} (t_1 x_1 + t_2 x_2) \mathbf{J}^2 + \frac{1}{16} (t_1 - t_2) (\mathbf{J}_p^2 + \mathbf{J}_n^2). \quad (1.6.15)$$

Les densités de matière $\rho_q(\mathbf{r})$, cinétique $\tau_q(\mathbf{r})$, et de courant de spin $\mathbf{J}_q(\mathbf{r})$ s'expriment à partir des fonctions d'onde des états occupés $\varphi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)$:

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \sum_{i\sigma} \varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma, q), \quad \rho(\mathbf{r}) = \sum_q \rho_q(\mathbf{r}), \quad (1.6.16)$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_{i\sigma} \vec{\nabla} \varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) \vec{\nabla} \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma, q), \quad \tau(\mathbf{r}) = \sum_q \tau_q(\mathbf{r}), \quad (1.6.17)$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = -i \sum_{i\sigma\sigma'} \varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) \left[\vec{\nabla} \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \times \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma' \rangle \right], \quad \mathbf{J}(\mathbf{r}) = \sum_q \mathbf{J}_q(\mathbf{r}). \quad (1.6.18)$$

La densité d'énergie totale devient alors :

$$\mathcal{H}(r) = \frac{\hbar^2}{2m_p} \tau_p(r) + \frac{\hbar^2}{2m_n} \tau_n(r) + \mathcal{H}_{\text{Skyrme}}(r) + \mathcal{H}_{\text{Coulomb}}(r). \quad (1.6.19)$$

Les équations de HF pour l'interaction de Skyrme sont obtenues à partir du fait que l'énergie totale est stationnaire par rapport à la fonction d'onde individuelle normalisée $\varphi_i(\mathbf{r})$. On a

$$\delta E[\rho] = \sum_{\sigma,q} \int \left[\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \delta \tau_{\sigma q}(\mathbf{r}) + U_q(\mathbf{r}) \delta \rho_{\sigma q}(\mathbf{r}) + W_q(\mathbf{r}) \delta \mathbf{J}_{\sigma q}(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r}, \quad (1.6.20)$$

où $\delta \tau_{\sigma q}(\mathbf{r})$, $\delta \rho_{\sigma q}(\mathbf{r})$ et $\delta \mathbf{J}_{\sigma q}(\mathbf{r})$ sont les variations des densités d'énergie cinétique spin-isospin, de matière, et de courant de spin. La masse effective $m_q^*(\mathbf{r})$, le potentiel central $U_q(\mathbf{r})$, et le potentiel spin-orbite $W_q(\mathbf{r})$ sont exprimés en termes des paramètres de Skyrme, de la densité de matière, de la densité de charge et de la densité de courant comme :

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} = \frac{\hbar^2}{2m_q} + \frac{1}{4} \left[t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) + t_2 \left(1 + \frac{x_2}{2} \right) \right] \rho(\mathbf{r}) - \frac{1}{4} \left[t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) - t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \right] \rho_q(\mathbf{r}), \quad (1.6.21)$$

$$\begin{aligned} U_q(\mathbf{r}) = & t_0 \left(1 + \frac{x_0}{2} \right) \rho(\mathbf{r}) - t_0 \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) \rho_q(\mathbf{r}) + \frac{1}{4} \left[t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) + t_2 \left(1 + \frac{x_2}{2} \right) \right] \tau(\mathbf{r}) \\ & - \frac{1}{4} \left[t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) + t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \right] \tau_q(\mathbf{r}) + \frac{\alpha + 2}{12} t_3 \left(1 + \frac{x_3}{2} \right) \rho^{\alpha+1}(\mathbf{r}) \\ & - \frac{\alpha}{12} t_3 \left(\frac{1}{2} + x_3 \right) \rho^{\alpha-1}(\mathbf{r}) [\rho_p^2(\mathbf{r}) + \rho_n^2(\mathbf{r})] - \frac{1}{6} t_3 \left(\frac{1}{2} + x_3 \right) \rho^\alpha(\mathbf{r}) \rho_q(\mathbf{r}) \\ & - \frac{1}{8} \left[3t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) - t_2 \left(1 + \frac{x_2}{2} \right) \right] \nabla^2 \rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{8} \left[3t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) + t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \right] \nabla^2 \rho_q(\mathbf{r}) \\ & - \frac{1}{2} W_0 \left[\vec{\nabla} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{J}_q(\mathbf{r}) \right] + \delta_{q,1} \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho_{ch}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (1.6.22)$$

$$\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} W_0 \left[\vec{\nabla} \rho(\mathbf{r}) + \vec{\nabla} \rho_q(\mathbf{r}) \right] + \frac{1}{8} (t_1 - t_2) \mathbf{J}_q(\mathbf{r}) - \frac{1}{8} (t_1 x_1 + t_2 x_2) \mathbf{J}(\mathbf{r}). \quad (1.6.23)$$

En raison de l'invariance par renversement du temps, les variations $\delta \tau_{\sigma q}(\mathbf{r})$, $\delta \rho_{\sigma q}(\mathbf{r})$, et $\delta \mathbf{J}_{\sigma q}(\mathbf{r})$ s'écrivent :

$$\delta \tau_{\sigma q}(\mathbf{r}) = \delta \sum_i \vec{\nabla} \varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) \cdot \vec{\nabla} \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma, q) = \sum_{i, \sigma'} \vec{\nabla} \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \cdot \vec{\nabla} \delta \varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma', q), \quad (1.6.24)$$

$$\begin{aligned}
 \delta\rho_{\sigma q}(\mathbf{r}) &= \sum_i [\delta\varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma, q) + \varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) \delta\varphi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)] \\
 &= \sum_i [\delta\varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma, q) + \varphi_i(\mathbf{r}, -\sigma, q) \delta\varphi_i^*(\mathbf{r}, -\sigma, q)] \\
 &= \sum_{i, \sigma'} \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \delta\varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma', q),
 \end{aligned} \tag{1.6.25}$$

$$\delta\tau_{\sigma q}(\mathbf{r}) = \delta \sum_i \vec{\nabla} \varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) \cdot \vec{\nabla} \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma, q) = \sum_{i, \sigma'} \vec{\nabla} \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \cdot \vec{\nabla} \delta\varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma', q). \tag{1.6.26}$$

En substituant toutes les variations dans l'équation (1.6.20), nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 \sum_{i, \sigma'} \int d\mathbf{r} \delta\varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma', q) \left[\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \vec{\nabla} + U_q(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \right. \\
 \left. - iW_q(\mathbf{r}) \sum_{\sigma''} (\vec{\nabla} \times \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma'' \rangle) \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma'', q) - e_i \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \right] = 0.
 \end{aligned} \tag{1.6.27}$$

Comme tous les coefficients de la variation $\delta\varphi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q)$ s'annulent, nous avons pour chaque état i :

$$\begin{aligned}
 \sum_{i, \sigma'} \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \vec{\nabla} + U_q(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \right. \\
 \left. - iW_q(\mathbf{r}) \sum_{\sigma''} (\vec{\nabla} \times \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma'' \rangle) \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma'', q) - e_i \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \right] = 0.
 \end{aligned} \tag{1.6.28}$$

En intégrant par parties, on obtient finalement les équations :

$$\left[-\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \vec{\nabla} + U_q(\mathbf{r}) - iW_q(\mathbf{r}) (\vec{\nabla} \times \vec{\sigma}) \right] \varphi_i(\mathbf{r}, q) = e_i \varphi_i(\mathbf{r}, q). \tag{1.6.29}$$

Ces équations sont connues sous le nom d'équations de HF. En les résolvant, nous pouvons obtenir les fonctions d'onde individuelles $\varphi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)$ ainsi que les énergies à une particule e_i . À partir de là, nous pouvons construire la fonction d'onde totale et déterminer les propriétés de l'état fondamental du noyau.

Malgré l'introduction d'interactions effectives réalistes, le formalisme de HF reste incomplet pour décrire certains effets collectifs, en particulier les corrélations d'appa-

riement présentes dans la plupart des noyaux.

1.7 Améliorations au-delà de HF : corrélations d'appariement

Dans les noyaux non doublement magiques, l'interaction résiduelle génère des corrélations d'appariement entre nucléons proches du niveau de Fermi. Ces corrélations se traduisent par une superposition de configurations de paires et ne sont pas correctement décrites par un seul déterminant de Slater. Les approches Hartree–Fock–Bogoliubov (HFB) et BCS étendent la théorie HF pour inclure ces corrélations. Dans le cadre de notre thèse, nous restons dans le formalisme de champ moyen et adoptons la variante SHF + BCS : le champ moyen particule-trou est obtenu à partir d'une fonctionnelle de Skyrme comme exposé en section 1.6.4, et l'appariement particule-particule est traité par l'approximation BCS, numériquement moins coûteuse et largement utilisée pour les noyaux liés.

1.7.1 Base canonique et définitions

On travaille dans la base d'orbitales simples $\{\varphi_i(\mathbf{r})\}$ fournies par une solution Hartree-Fock ou choisies comme base canonique. Les quantités d'intérêt sont la densité normale ρ et la densité anormale κ . Dans la base canonique (approximée par les orbitales HF), ces matrices prennent la forme diagonale (indices α pour états canoniques) :

$$\rho_{\alpha\beta} = n_{\alpha} \delta_{\alpha\beta}, \quad \kappa_{\alpha\beta} = \kappa_{\alpha} \delta_{\alpha\beta}, \quad (1.7.1)$$

avec la relation standard entre amplitudes BCS u_{α}, v_{α} et densités :

$$n_{\alpha} = v_{\alpha}^2, \quad \kappa_{\alpha} = u_{\alpha}v_{\alpha}, \quad u_{\alpha}^2 + v_{\alpha}^2 = 1. \quad (1.7.2)$$

Les énergies à une particule e_{α} sont les valeurs diagonales de l'opérateur de champ moyen \hat{h} (cf. section 1.5.4) :

$$e_{\alpha} = \langle \varphi_{\alpha} | \hat{h} | \varphi_{\alpha} \rangle.$$

1.7.2 Équations BCS

Dans l'approximation BCS, le couplage d'appariement relie essentiellement des états conjugués dans la base canonique. On définit le gap local dans l'espace des états cano-

niques par

$$\Delta_\alpha = - \sum_{\beta>0} V_{\alpha\beta}^{\text{pair}} u_\beta v_\beta = - \sum_{\beta>0} V_{\alpha\beta}^{\text{pair}} \kappa_\beta, \quad (1.7.3)$$

où $V_{\alpha\beta}^{\text{pair}}$ sont les éléments de matrice du champ d'appariement (canal pp) exprimés dans la base canonique. La contrainte sur l'orthogonalisation des orbitales s'impose via le multiplicateur (λ). Les énergies quasi-particule BCS sont données par

$$E_\alpha = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}, \quad \tilde{\varepsilon}_\alpha \equiv \varepsilon_\alpha - \lambda. \quad (1.7.4)$$

Les amplitudes u_α et v_α s'obtiennent directement :

$$v_\alpha^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_\alpha}{E_\alpha} \right), \quad u_\alpha^2 = 1 - v_\alpha^2. \quad (1.7.5)$$

Les équations (1.7.3)–(1.7.5) forment le système BCS auto-cohérent à résoudre.

Les définitions introduites dans la base canonique permettent alors d'établir les équations auto-cohérentes décrivant les corrélations d'appariement.

1.7.3 Interaction d'appariement dans le schéma SHF + BCS

Dans un cadre strictement auto-cohérent, l'interaction responsable des corrélations d'appariement devrait, en principe, être identique à celle utilisée pour le champ moyen particule-trou. Toutefois, dans les approches basées sur la méthode de l'EDF, et en particulier dans le schéma SHF + BCS adopté dans ce travail, il est d'usage d'introduire une interaction effective spécifique dans le canal particule-particule. Cette séparation permet une description réaliste de l'appariement tout en conservant une complexité numérique modérée. Dans notre étude, les corrélations d'appariement nucléaires sont traitées dans le cadre de la théorie de BCS. L'interaction d'appariement est choisie sous la forme standard d'une interaction attractive de portée nulle, dépendante de la densité. Elle s'écrit sous la forme :

$$V_{\text{pair}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -g \frac{1 - \hat{P}^\sigma}{2} \left[1 - \frac{\rho(\mathbf{R})}{\rho_0} \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad (1.7.6)$$

l'opérateur \hat{P}^σ est l'opérateur d'échange de spin. Le paramètre ρ_0 correspond à la densité de saturation nucléaire, prise égale à 0.16 fm^{-3} . Cette interaction d'appariement dépend explicitement de la densité locale, ce qui permet de moduler l'intensité de l'appariement à l'intérieur du noyau et d'éviter une surestimation des corrélations dans

les régions de forte densité. Elle est appliquée séparément aux protons et aux neutrons : seules les corrélations proton-proton et neutron-neutron sont prises en compte, tandis que l'appariement neutron-proton est négligé. Pour les noyaux légers étudiés dans ce travail, la constante de couplage de l'interaction d'appariement est fixée à une valeur identique pour les protons et les neutrons, $g = 410 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^3$. Ce choix, largement utilisé dans la littérature [69–71], permet de reproduire correctement les effets globaux de l'appariement observés expérimentalement, tout en assurant la stabilité numérique des calculs SHF + BCS.

1.8 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons posé les fondements du formalisme de champ moyen utilisé tout au long de ce travail. Nous avons montré comment, à partir du principe variationnel de Ritz et de la contrainte d'orthonormalité, on obtient les équations de HF et la forme de Liouville $[\hat{h}, \hat{\rho}] = 0$ qui garantit la cohérence interne du formalisme. La construction explicite de la fonctionnelle de Skyrme et des densités locales (matière, cinétique, courant de spin) a permis de définir le champ moyen self-consistent utilisé dans nos calculs pratiques. Nous avons également discuté des limitations physiques de HF avec l'interaction nue et motivé l'usage d'interactions effectives et de la théorie de l'énergie fonctionnelle. Enfin, nous avons introduit la prise en compte des corrélations d'appariement via l'approximation BCS ; cadre adopté dans cette thèse ; en présentant la base canonique, les équations du gap et la formulation pratique de l'interaction d'appariement utilisée (dépendance en densité, valeur du couplage pour les noyaux légers). Le choix Skyrme–HF+BCS répond à un compromis entre réalisme physique et coût numérique et prépare les implémentations présentées dans la suite.

Dans la Partie II nous passerons à la méthodologie numérique : description et validation du code de calcul (Chapitre 3) puis mise en œuvre algorithmique du schéma SHF + BCS. Le Chapitre 2, qui suit immédiatement, introduit le sujet physique d'application de cette méthode ; les hypernoyaux et les interactions baryoniques ; et fournit les éléments spécifiques nécessaires à leur traitement au sein du formalisme exposé ici.

Chapitre 2

Hypernoyaux et Interactions Baryoniques

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous introduisons le cadre physique spécifique dans lequel le formalisme de champ moyen présenté au Chap. 1 sera appliqué : celui des hypernoyaux et des interactions baryoniques impliquant l'étrangeté. Les hypernoyaux constituent une extension naturelle des noyaux ordinaires par l'introduction d'hypérons, et offrent un laboratoire privilégié pour étudier les interactions baryon-baryon au-delà du secteur nucléon-nucléon, en particulier l'interaction nucléon- Λ .

Nous commençons par rappeler les généralités essentielles sur les hypernoyaux : définition, notion d'étrangeté et classification des systèmes d'un seul- et multi-hypéroniques. Une attention particulière est portée au baryon Λ , dont les propriétés quantiques, la stabilité relative et l'interaction globalement attractive avec les nucléons expliquent son rôle central dans la physique hypernucléaire. Nous présentons également les mécanismes expérimentaux de production et de décroissance des hypernoyaux, afin de situer les observables théoriques étudiées dans un contexte expérimental réaliste. La seconde partie du chapitre est consacrée à la formulation théorique de la description des hypernoyaux dans le cadre du champ moyen non relativiste. Nous introduisons l'hamiltonien effectif du système hypernucléaire et la fonctionnelle de densité d'énergie correspondante, incluant de manière cohérente les contributions NN , $N\Lambda$ et $\Lambda\Lambda$. Les interactions hypéroniques sont paramétrées à partir de calculs microscopiques de type BHF, permettant de relier les propriétés de la matière hypernucléaire uniforme à celles des hypernoyaux finis. Enfin, nous présentons l'extension du formalisme SHF aux

systèmes hypernucléaires. L'introduction des masses effectives des nucléons et des hypérons permet de prendre en compte la dépendance en impulsion des interactions, tandis que la minimisation variationnelle de la fonctionnelle d'énergie conduit aux équations de HF couplées pour les nucléons et les Λ . Les effets d'appariement et la correction du centre de masse sont également discutés. Ce cadre théorique constitue la base des calculs numériques et des analyses présentées dans la suite de la thèse.

2.2 Généralités sur les hypernoyaux

Les hypernoyaux constituent une extension naturelle des noyaux ordinaires par l'introduction de degrés de liberté étranges, offrant ainsi un cadre privilégié pour étudier les interactions baryoniques au-delà du secteur nucléon-nucléon. Leur description nécessite la prise en compte des propriétés spécifiques des hypérons, en particulier du baryon Λ , ainsi que de leurs effets sur la structure nucléaire.

2.2.1 Définition des hypernoyaux et notion d'étrangeté

Un hypernoyau est un noyau ordinaire contenant un ou plusieurs baryons étranges appelés hypérons (Y) comme illustré dans la figure 2.2.1. L'introduction de ces degrés de liberté est associée à un nouveau nombre quantique, l'étrangeté S , avec $S = -1$ pour le Λ , Σ^+ , Σ^- et $S = -2$ pour les Ξ^- , Ξ^0 . Dans ce travail, nous nous concentrons exclusivement sur les hypernoyaux à Λ , qui sont les plus abondants expérimentalement et les mieux contraints du point de vue théorique. Les hypernoyaux peuvent contenir un seul hypéron (hypernoyaux simples- Λ) ou plusieurs hypérons (hypernoyaux multi-étrange). Les hypernoyaux à un seul Λ constituent les systèmes les plus étudiés expérimentalement et fournissent des informations directes sur l'interaction ΛN à basse densité. Les systèmes à double Λ présentent également un intérêt particulier, car ils offrent, en principe, un accès direct à l'interaction $\Lambda\Lambda$, encore très mal contrainte expérimentalement. Dans le cas des hypernoyaux simples- Λ , seule l'interaction ΛN intervient effectivement.

Le Λ est le plus léger des hypérons et interagit de manière globalement attractive avec les nucléons à l'intérieur du noyau. Cette propriété explique pourquoi les hypernoyaux simples sont liés et peuvent être décrits dans un cadre de champ moyen. Les données expérimentales disponibles sur les hypernoyaux simples, allant de ${}^5_{\Lambda}\text{He}$ à ${}^{208}_{\Lambda}\text{Pb}$, permettent de contraindre les énergies de séparation B_{Λ} et la structure à une particule du Λ .

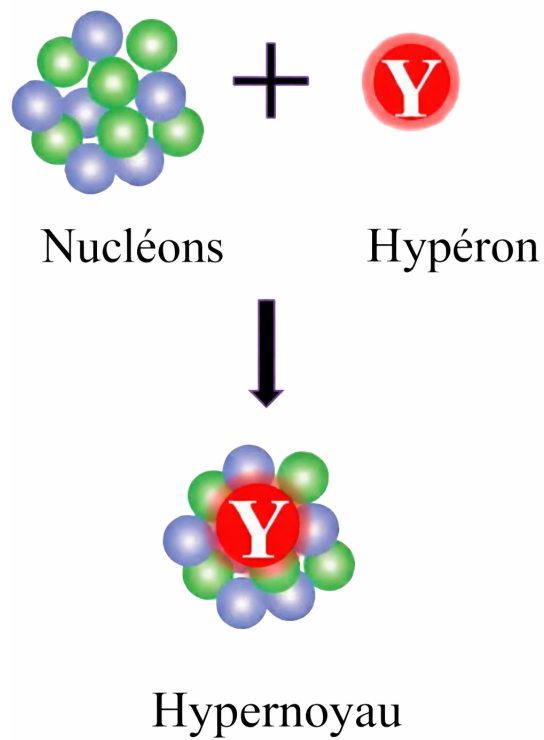
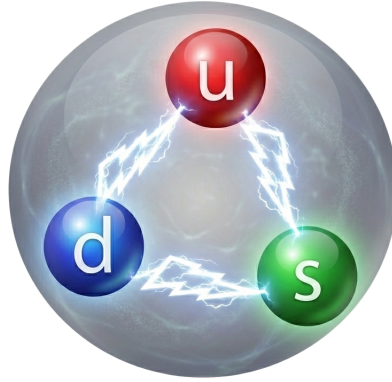


FIGURE 2.2.1 – Illustration de la constitution d'un hypernoyau par l'ajout d'un hypéron à un ensemble de nucléons.

FIGURE 2.2.2 – Structure de la particule Λ .

2.2.2 Le baryon Λ

Le baryon Λ est le plus léger des hyperons et joue un rôle central dans l'étude des hypernoyaux. Il a été observé pour la première fois en 1947 lors de l'étude des interactions des rayons cosmiques [72], découverte qui a conduit à l'introduction du nombre quantique d'étrangeté et, plus tard, à l'identification du quark étrange. Le Λ est un baryon composé de trois quarks : un quark *haut* (*up*), un quark *bas* (*down*) et un quark *étrange* (*strange*) (Figure 2.2.2).

D'un point de vue quantique, le Λ se caractérise par un isospin nul, un spin $1/2$ et une parité positive. Il est électriquement neutre et possède un nombre d'étrangeté $S = -1$. Sa masse au repos est d'environ $1115.7 \text{ MeV}/c^2$, ce qui est la plus faible par rapport aux autres hyperons ($m_{\Sigma^+} = 1189.370 \pm 0.070 \text{ MeV}/c^2$, $m_{\Sigma^0} = 1192.642 \pm 0.024 \text{ MeV}/c^2$, $m_{\Sigma^-} = 1197.449 \pm 0.030 \text{ MeV}/c^2$, $m_{\Xi^-} = 1321.710 \pm 0.070 \text{ MeV}/c^2$, $m_{\Xi^0} = 1314.860 \pm 0.200 \text{ MeV}/c^2$) [73], et sa durée de vie moyenne, de l'ordre de $2.6 \times 10^{-10} \text{ s}$, est typique d'un processus de désintégration faible. Cette durée de vie relativement longue, comparée aux échelles de temps de l'interaction forte, permet au Λ de rester lié à un noyau avant sa désintégration.

Le Λ se désintègre essentiellement par interaction faible en un nucléon accompagné d'un pion, selon des canaux dominants $\Lambda \rightarrow p + \pi^-$ et $\Lambda \rightarrow n + \pi^0$. Lors de ces processus, le nombre d'étrangeté n'est pas conservé, ce qui constitue une signature claire de la nature faible de la désintégration. Le Λ peut également participer à des réactions faibles non mésiques à l'intérieur du noyau, telles que $\Lambda + n \rightarrow n + n$ ou $\Lambda + p \rightarrow n + p$, qui jouent un rôle important dans la dynamique de désintégration des hypernoyaux

lourds. En raison de l'impossibilité de disposer de faisceaux ou de cibles de Λ stables, les expériences de diffusion Λ - N directe sont extrêmement limitées. Les informations disponibles sur l'interaction hypéron-nucléon proviennent principalement de données indirectes, telles que la diffusion Λp , caractérisée par une longueur de diffusion négative et une portée effective relativement grande, indiquant une interaction globalement attractive à basse énergie. Cette attractivité est à l'origine de la possibilité de lier un Λ à un noyau ordinaire. Ainsi, l'étude du Λ lié dans un noyau constitue l'un des moyens les plus efficaces pour sonder l'interaction hypéron-nucléon dans un cadre à plusieurs corps, en utilisant les outils théoriques de la physique nucléaire.

2.3 Production et décroissance des hypernoyaux

La compréhension des mécanismes de formation et de désintégration des hypernoyaux est indissociable de l'accès expérimental aux interactions baryoniques impliquant l'étrangeté, et constitue un lien essentiel entre les observables mesurées et leur interprétation théorique.

2.3.1 Modes de production

Les hypernoyaux ne pouvant être produits par des faisceaux directs d'hypérons, en raison de la très courte durée de vie de ces particules, leur formation repose sur des réactions induites dans des noyaux ordinaires, au cours desquelles un ou plusieurs nucléons sont convertis en hypérons. Les réactions induites par kaons constituent l'un des mécanismes les plus efficaces de production des hypernoyaux. Dans les réactions de type (K^-, π^-) ou (K^-, π^0) , un kaon incident interagit avec un nucléon du noyau cible, conduisant à la création d'un hypéron Λ qui peut être capturé dans un état lié du noyau résiduel. Ces réactions permettent un bon contrôle de l'impulsion transférée et favorisent la population d'états hypernucléaires bien définis.

Les réactions induites par pions, telles que (π^+, K^+) , constituent une alternative complémentaire. Elles permettent également l'introduction d'un hypéron Λ dans le noyau, bien que les sections efficaces soient généralement plus faibles que dans le cas des réactions kaoniques. Ces réactions sont particulièrement adaptées à l'étude des niveaux excités des hypernoyaux. Les collisions d'ions lourds à haute énergie représentent un autre mécanisme de production, notamment pour les hypernoyaux multi-étranges. Dans ces collisions, les conditions extrêmes de densité et d'énergie favorisent la création de quarks étranges et la formation d'hypérons, qui peuvent ensuite être capturés par des

fragments nucléaires.

Un rôle central est enfin joué par les réactions d'échange d'étrangeté, au cours desquelles l'étrangeté est transférée au noyau sans destruction complète de celui-ci. Ces réactions constituent un outil privilégié pour produire des hypernoyaux liés et sonder leurs propriétés structurelles.

2.3.2 Décroissance et durées de vie

Les hypernoyaux sont des systèmes métastables dont la décroissance est dominée par l'interaction faible, en raison de la non-conservation du nombre de l'étrangeté dans ce type de processus. Les modes de décroissance sont ainsi nettement plus lents que ceux gouvernés par l'interaction forte. La décroissance la plus courante est la désintégration faible mésonique, au cours de laquelle l'hypéron Λ se désintègre en un nucléon et un pion. Ce mode est dominant dans les hypernoyaux légers, pour lesquels l'énergie de liaison du Λ permet l'émission du pion. Dans les hypernoyaux plus lourds, les désintégrations faibles non mésoniques deviennent prépondérantes. Elles impliquent une interaction directe du Λ avec un nucléon du noyau, conduisant à l'émission de deux nucléons. Ces processus sont sensibles à l'environnement nucléaire et fournissent des informations importantes sur les interactions faibles baryoniques en milieu nucléaire. Les durées de vie des hypernoyaux sont typiquement de l'ordre de 10^{-10} s, proches de celle du Λ libre, bien que des effets de milieu puissent induire de légères modifications. D'un point de vue expérimental, ces temps de vie relativement longs permettent l'identification des hypernoyaux à partir des produits de décroissance et la mesure d'observables telles que les énergies de séparation.

Les mécanismes de production et de décroissance des hypernoyaux fournissent les bases expérimentales nécessaires à l'exploration de leurs propriétés structurelles. L'interprétation quantitative de ces observables requiert toutefois un cadre théorique capable de décrire de manière auto-cohérente les effets des interactions baryoniques en milieu nucléaire, ce qui motive l'introduction d'une formulation de champ moyen adaptée aux systèmes hypernucléaires.

2.4 Formulation de champ moyen pour les hypernoyaux

La description microscopique des hypernoyaux repose sur l'extension des approches de champ moyen, qui permettent d'intégrer de manière cohérente les interactions baryoniques en présence de degrés de liberté étranges tout en conservant une description

auto-cohérente de la structure nucléaire.

2.4.1 Hamiltonien effectif du système hypernucléaire

La description théorique des hypernoyaux dans ce travail repose sur le formalisme de la théorie du champ moyen non relativiste, étendue au secteur de l'étrangeté. Cette approche s'est révélée particulièrement efficace pour l'étude des propriétés structurales des noyaux ordinaires et des hypernoyaux simples et doubles.

On considère un système composé de nucléons $N = (p, n)$ et d'un ou plusieurs hypérons Λ . Dans l'approximation de champ moyen, l'hamiltonien total effectif peut être écrit sous la forme :

$$\hat{H} = \hat{T}_N + \hat{H}_{NN} + \hat{T}_\Lambda + \hat{H}_{N\Lambda} + \hat{H}_{\Lambda\Lambda}, \quad (2.4.1)$$

où \hat{T}_N et \hat{T}_Λ désignent respectivement les opérateurs d'énergie cinétique des nucléons et des hypérons, \hat{H}_{NN} représente l'interaction nucléon-nucléon, $\hat{H}_{N\Lambda}$ décrit l'interaction hypéron-nucléon, $\hat{H}_{\Lambda\Lambda}$ correspond à l'interaction hypéron-hypéron.

Dans le cas des hypernoyaux simples- Λ , un seul hypéron est présent dans le système et l'interaction $\Lambda\Lambda$ ne contribue pas explicitement à l'énergie totale. Néanmoins, afin de conserver un cadre théorique unifié valable pour les hypernoyaux simples et doubles, le terme $\hat{H}_{\Lambda\Lambda}$ est maintenu dans l'expression générale du hamiltonien. Dans ce formalisme, l'état fondamental du système est approché par un produit tensoriel d'un déterminant de Slater de nucléons et d'un déterminant de Slater d'états hypéroniques $|\Psi_N\rangle \otimes |\Psi_\Lambda\rangle$. Cette hypothèse permet de ramener le problème à plusieurs corps à un ensemble d'équations monoparticulaires auto-cohérentes, tout en conservant l'essentiel des effets moyens des interactions baryoniques.

2.4.2 Fonctionnelle de densité d'énergie du système hypernucléaire

Dans le cadre de la théorie du champ moyen, l'énergie totale du système hypernucléaire est exprimée comme l'intégrale d'une densité d'énergie locale $\varepsilon(\mathbf{r})$:

$$E = \int \varepsilon(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (2.4.2)$$

La densité d'énergie totale est construite comme une fonctionnelle de la densité nucléonique totale ρ_N (définie par la somme des densités de neutrons et de protons,

$\rho_N = \rho_n + \rho_p$), de la densité hyperonique ρ_Λ et des densités cinétiques associées τ_N et τ_Λ [35, 36] :

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m_N} \tau_N + \frac{\hbar^2}{2m_\Lambda} \tau_\Lambda + \varepsilon_{NN}(\rho_N) + \varepsilon_{N\Lambda}(\rho_N, \rho_\Lambda) + \varepsilon_{\Lambda\Lambda}(\rho_\Lambda). \quad (2.4.3)$$

Les deux premiers termes représentent les contributions cinétiques des nucléons et des hyperons. Les trois derniers termes correspondent aux interactions baryoniques et sont définis comme suit : ε_{NN} décrit l'interaction nucléon-nucléon et est prise sous la forme d'une fonctionnelle de Skyrme standard, utilisée pour la description des noyaux ordinaires (qu'on a traité largement dans la section 1.6.4) ; $\varepsilon_{N\Lambda}$ représente l'interaction hyperon-nucléon. Elle est ajustée aux résultats des calculs BHF en matière uniforme et dépend à la fois des densités nucléonique et hyperonique [35, 36] ; $\varepsilon_{\Lambda\Lambda}$ décrit l'interaction hyperon-hyperon et ne dépend que de la densité hyperonique [36, 39].

Dans le cas des hypernoyaux simples- Λ , la densité hyperonique ρ_Λ étant associée à un seul hyperon, le terme $\varepsilon_{\Lambda\Lambda}$ ne contribue pas numériquement à l'énergie totale. Cependant, ce terme est conservé dans l'expression générale afin de garantir une formulation cohérente applicable aux hypernoyaux simples et doubles [35]. La forme explicite des fonctionnelles $\varepsilon_{N\Lambda}$ et $\varepsilon_{\Lambda\Lambda}$ sera introduite dans la section suivante, où les dépendances en densité seront précisées à l'aide de paramétrisations polynomiales adaptées aux calculs de champ moyen étendu.

2.4.3 Paramétrisation des interactions $N\Lambda$ et $\Lambda\Lambda$

Dans l'approche de la fonctionnelle de densité étendue aux hypernoyaux, les interactions hyperon-nucléon et hyperon-hyperon sont introduites sous la forme de fonctionnelles locales ajustées aux calculs de BHF en matière uniforme. Ces contributions sont écrites en fonction des densités baryoniques et traduisent les effets moyens des interactions microscopiques dans un cadre de champ moyen.

La contribution de l'interaction $N\Lambda$ à la densité d'énergie est donnée par [35, 36] :

$$\varepsilon_{N\Lambda}(\rho_N, \rho_\Lambda) = -f_1(\rho_N) \rho_N \rho_\Lambda + f_2(\rho_N) \rho_N \rho_\Lambda^{5/3}, \quad (2.4.4)$$

où le premier terme correspond à la partie attractive de l'interaction hyperon-nucléon, tandis que le second terme représente une contribution répulsive induite par la dépendance en impulsion du potentiel effectif, traitée dans l'approximation quadratique à basse impulsion.

L'interaction hyperon-hyperon est décrite par une fonctionnelle ne dépendant que

de la densité hypéronique [36] :

$$\varepsilon_{\Lambda\Lambda}(\rho_\Lambda) = -f_3(\rho_\Lambda) \rho_\Lambda^2. \quad (2.4.5)$$

Dans le cas des hypernoyaux simples- Λ , ce terme ne contribue pas à l'énergie totale, puisqu'un seul hypéron est présent dans le système. Il est néanmoins conservé dans la formulation générale afin de garantir une description cohérente des hypernoyaux simples et doubles.

Les fonctions f_i intervenant dans les équations (2.4.4) et (2.4.5) sont paramétrées sous la forme de polynômes en densité, conformément aux prescriptions usuelles de la DFT [35, 36, 53] :

$$f_1(\rho_N) = \alpha_1 - \alpha_2 \rho_N + \alpha_3 \rho_N^2, \quad (2.4.6)$$

$$f_2(\rho_N) = \alpha_4 - \alpha_5 \rho_N + \alpha_6 \rho_N^2, \quad (2.4.7)$$

$$f_3(\rho_\Lambda) = \alpha_7 - \alpha_8 \rho_\Lambda + \alpha_9 \rho_\Lambda^2. \quad (2.4.8)$$

En principe, les fonctions f_1 et f_2 dépendent à la fois des densités nucléonique ρ_N et hypéronique ρ_Λ , associées aux charges conservées dans le milieu. Néanmoins, les nucléons constituant l'espèce dominante du système, y compris en présence d'hypérons Λ , la dépendance explicite en ρ_Λ est négligée dans ces fonctions. En revanche, la fonction f_3 ne dépend que de manière triviale de la densité ρ_Λ , dans la mesure où elle intervient exclusivement dans la partie de la fonctionnelle décrivant la matière composée uniquement d'hypérons Λ .

Différents potentiels $N\Lambda$ ont été proposés et paramétrés dans la littérature, et reproduisent de manière satisfaisante les rares données disponibles sur les déphasages $N\Lambda$; on pourra consulter, par exemple, la discussion et les références rassemblées dans la réf. [74]. La présente étude s'appuie sur trois de ces interactions, pour lesquelles une fonctionnelle de la densité a été construite à partir des prédictions issues des calculs BHF [75, 76], à savoir les fonctionnelles DF-NSC89, DF-NSC97a et DF-NSC97f.

Les paramètres $\alpha_i (i = 1-7)$ sont déterminés à partir des calculs BHF et dépendent du choix de l'interaction nucléon-hypéron considérée. Leurs valeurs numériques pour les fonctionnelles DF-NSC89 [35], DF-NSC97a [35] et DF-NSC97f [36] sont regroupées dans le tableau 2.1. Le paramètre α_7 relève toutefois de l'approche empirique EmpC [53], utilisée pour la description de la composante $\Lambda\Lambda$. Dans ce cadre empirique, les paramètres α_8 et α_9 sont fixés à zéro en raison du manque d'informations disponibles ; absence de contraintes expérimentales ; concernant le comportement à haute densité

TABLE 2.1 – Paramètres α_i des fonctions f_i pour les fonctionnelles DF–NSC89, DF–NSC97a et DF–NSC97f avec la prescription EmpC pour α_7 [35, 36, 53].

Force	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7
DF-NSC89+EmpC	327	1159	1163	335	1102	1660	22.81
DF-NSC97a+EmpC	423	1899	3795	577	4017	1102	21.12
DF-NSC97f+EmpC	384	1473	1933	635	1829	4100	33.25

de l’interaction hypéron-hypéron (voir la réf. [53] pour plus de détails). Il convient en particulier de souligner qu’aucune donnée expérimentale n’est actuellement disponible sur la diffusion $\Lambda - \Lambda$, ce qui implique que les interactions phénoménologiques nues dans le canal $\Lambda\Lambda$ restent entièrement non contraintes.

Ces paramétrisations permettent de relier de manière cohérente les propriétés de la matière hypernucléaire uniforme aux propriétés structurales des hypernoyaux finis, tout en restant compatibles avec les contraintes microscopiques issues des calculs BHF.

La formulation générale du champ moyen hypernucléaire permet ainsi d’exprimer l’énergie du système comme une fonctionnelle des densités baryoniques. Pour une application aux noyaux finis, cette description doit être complétée par une prise en compte explicite de la dépendance en impulsion des interactions, qui joue un rôle central dans la structure des niveaux d’énergie individuels.

2.5 Approche Skyrme–Hartree–Fock étendue

L’approche SHF étendue constitue un cadre naturel pour relier les interactions baryoniques effectives aux observables structurales des hypernoyaux, en intégrant de manière auto-cohérente les effets de milieu et la dépendance en impulsion des interactions dans une description de champ moyen non relativiste.

2.5.1 Masses effectives des nucléons et des hypérons

Dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité appliquée aux hypernoyaux, les effets liés à la dépendance en impulsion des interactions baryoniques sont pris en compte par l’introduction de masses effectives pour les nucléons et les hypérons, en particulier les particules Λ . Ces masses effectives traduisent, dans une description de champ moyen, les corrélations induites par le milieu nucléaire et résultent directement de la dépendance en impulsion de l’interaction. Pour la description des noyaux et hypernoyaux finis, il est alors nécessaire de séparer la contribution du potentiel dé-

pendante de l'impulsion ; interprétée comme une correction aux masses ; de la partie indépendante de l'impulsion, désignée comme la partie locale de l'interaction. L'introduction explicite des masses effectives permet ainsi de dissocier de manière rigoureuse les termes cinétiques et locaux de la fonctionnelle d'énergie, ce qui constitue un élément essentiel pour une description cohérente et réaliste des hypernoyaux finis dans le cadre du formalisme SHF étendu [35, 52]. La densité d'énergie locale est définie par :

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{2m_N}\tau_N + \varepsilon_{NN}(\rho_N) &= \frac{\hbar^2}{2m_N^*(\rho_N)}\tau_N + \varepsilon_{NN}^{\text{loc}}(\rho_N), \\ \frac{\hbar^2}{2m_\Lambda}\tau_\Lambda + \varepsilon_{N\Lambda}(\rho_N, \rho_\Lambda) &= \frac{\hbar^2}{2m_\Lambda^*(\rho_N)}\tau_\Lambda + \varepsilon_{N\Lambda}^{\text{loc}}(\rho_N, \rho_\Lambda),\end{aligned}\tag{2.5.1}$$

qui peuvent être reformulées comme :

$$\varepsilon_{NN}^{\text{loc}} = \varepsilon_{NN} - \frac{3\rho_N\hbar^2}{10} \left(\frac{6\pi^2\rho_N}{g_N} \right)^{2/3} \left(\frac{1}{m_N^*} - \frac{1}{m_N} \right),\tag{2.5.2}$$

$$\varepsilon_{N\Lambda}^{\text{loc}} = \varepsilon_{N\Lambda} - \frac{3\rho_\Lambda\hbar^2}{10} \left(\frac{6\pi^2\rho_\Lambda}{g_\Lambda} \right)^{2/3} \left(\frac{1}{m_\Lambda^*} - \frac{1}{m_\Lambda} \right),\tag{2.5.3}$$

Les densités locales des nucléons et des hyperons sont désignées par ρ_N et ρ_Λ , tandis que g_N et g_Λ correspondent aux facteurs de dégénérescence liés au spin de chaque particule. Les masses dans le vide des nucléons et des Λ sont notées m_N et m_Λ , et les masses effectives dans le milieu, qui tiennent compte des effets de la dépendance en impulsion des interactions, sont désignées par m_N^* et m_Λ^* . Les termes soustractifs représentent ainsi la correction cinétique due à la masse effective, permettant de séparer explicitement la partie locale du potentiel de la contribution dépendante de l'impulsion.

Dans ces expressions, ε_{NN} et $\varepsilon_{N\Lambda}$ représentent les énergies totales des interactions nucléon-nucléon et nucléon- Λ , incluant les effets de la dépendance en impulsion, où ε_{NN} est issu de la fonctionnelle de Skyrme, tandis que $\varepsilon_{N\Lambda}$ est défini par l'Eq. (2.4.4). Comme discuté précédemment, la contribution des nucléons à l'interaction avec le Λ domine largement celle provenant de l'interaction $\Lambda\Lambda$. En conséquence, le terme de potentiel $\varepsilon_{N\Lambda}$ est significativement plus important que $\varepsilon_{\Lambda\Lambda}$. La contribution de l'interaction $\Lambda\Lambda$ à la masse effective du Λ peut ainsi être considérée comme une correction mineure et a été négligée [77]. On peut donc écrire :

$$\varepsilon_{\Lambda\Lambda}^{\text{loc}}(\rho_\Lambda) = \varepsilon_{\Lambda\Lambda}.\tag{2.5.4}$$

Dans les Eqs. (2.5.2) et (2.5.3), la partie locale de la densité d'énergie nécessite la

TABLE 2.2 – Paramètres μ_i de la masse effective du Λ définie par l'équation (2.5.5) pour les différentes fonctionnelles considérées dans cette thèse.

Fonctionnelle	μ_1	μ_2	μ_3	μ_4
DF–NSC89	1.00	1.83	5.33	6.07
DF–NSC97a	1.72	0.98	3.18	0.00
DF–NSC97f	0.93	2.19	3.89	0.00

connaissance des masses effectives m_N^* et m_Λ^* . La masse effective du nucléon m_N^* est entièrement déterminée par la fonctionnelle de Skyrme utilisée pour le secteur nucléonique. Son expression explicite dépend du jeu de paramètres Skyrme considéré (Eq. 1.6.9). En revanche, la masse effective du Λ est principalement générée par la dépendance en impulsion de l'interaction $N\Lambda$, telle qu'elle est extraite des calculs de BHF en matière uniforme [35]. Elle est paramétrée sous la forme polynomiale suivante :

$$\frac{m_\Lambda^*(\rho_N)}{m_\Lambda} = \mu_1 - \mu_2 \rho_N + \mu_3 \rho_N^2 - \mu_4 \rho_N^3, \quad (2.5.5)$$

Les valeurs des paramètres μ_{1-4} , qui dépendent de la fonctionnelle hypernucléaire considérée, sont reportées dans le tableau 2.2 pour les fonctionnelles DF–NSC89, DF–NSC97a et DF–NSC97f. Conformément au traitement usuel adopté dans les calculs BHF des hypernoyaux simples- Λ , la masse effective du Λ ne dépend que de la densité nucléonique ρ_N , la densité hypéronique ρ_Λ étant typiquement beaucoup plus faible. Même dans les hypernoyaux doubles- Λ , la fraction totale d'hypérons demeure suffisamment réduite pour que leur rétroaction sur le champ moyen puisse être négligée dans une première approximation. Par conséquent, la même expression de la masse effective m_Λ^* est utilisée pour la description des hypernoyaux à un et à deux Λ . La dépendance de la masse effective à la densité est également présentée dans le tableau. Étant donné que cette quantité n'est requise que pour la description des noyaux finis, les densités considérées sont limitées à des valeurs proches de la densité de saturation. On observe que les trois fonctionnelles étudiées présentent un comportement qualitativement similaire pour la masse effective du Λ à faible densité.

Étant donnée la forme fonctionnelle de ε^{loc} et de m^* pour les nucléons et les Λ , l'énergie totale du système (2.4.2) peut alors être réécrite sous une forme qui sépare explicitement les contributions provenant de l'opérateur local $\hat{\rho}$ et de l'opérateur non local $\hat{\tau} = \vec{\nabla} \hat{\rho} \vec{\nabla}$ comme suit [52] :

$$E(\rho_N, \rho_\Lambda, \tau_N, \tau_\Lambda) = \frac{\hbar^2}{2m_N^*(\rho_N)} \tau_N + \frac{\hbar^2}{2m_\Lambda^*(\rho_N)} \tau_\Lambda + \varepsilon_{NN}^{\text{loc}}(\rho_N) + \varepsilon_{N\Lambda}^{\text{loc}}(\rho_N, \rho_\Lambda) + \varepsilon_{\Lambda\Lambda}^{\text{loc}}(\rho_\Lambda), \quad (2.5.6)$$

où τ_N et τ_Λ désignent les densités cinétiques des nucléons et des hyperons, respectivement.

2.5.2 Équations de HF pour les hypernoyaux

La minimisation de l'énergie totale du système hypernucléaire, exprimée sous la forme d'une fonctionnelle de densité incluant les masses effectives (Eq. (2.5.6)), conduit à un ensemble d'équations de type HF étendues aux degrés de liberté hyperoniques. Ces équations décrivent le mouvement monoparticulaire des nucléons et des hyperons dans un champ moyen auto-cohérent.

Ces équations prennent la forme d'équations de Schrödinger à un corps pour chaque espèce baryonique $i = n, p, \Lambda$:

$$\left[-\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m_i^*(\mathbf{r})} \nabla + V_i(\mathbf{r}) - i W_i(\mathbf{r}) (\nabla \times \sigma) \right] \varphi_{i,\alpha}(\mathbf{r}) = -e_{i,\alpha} \varphi_{i,\alpha}(\mathbf{r}), \quad (2.5.7)$$

où $\varphi_{i,\alpha}(\mathbf{r})$ désigne la fonction d'onde du niveau d'énergie individuel α de l'espèce i , et $e_{i,\alpha}$ les énergies individuelles correspondantes. Le terme $W_i(\mathbf{r})$ représente le potentiel spin-orbite. Pour les nucléons, ce terme est issu de la fonctionnelle de Skyrme standard. En revanche, la contribution spin-orbite du Λ est négligée dans ce travail [52], en raison du faible dédoublement spin-orbite observé expérimentalement pour les hypernoyaux [30].

Potentieux effectifs en matière nucléaire uniforme

Les énergies à une particule dans la matière nucléaire uniforme sont déduites de la fonctionnelle d'énergie (2.4.3) et s'écrivent comme :

$$\varepsilon_N^{\text{unif}}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_N} + v_N^{\text{unif}}, \quad \varepsilon_\Lambda^{\text{unif}}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\Lambda} + v_\Lambda^{\text{unif}}, \quad (2.5.8)$$

où le potentiel effectif des nucléons est donné par

$$v_N^{\text{unif}}(\rho_N, \rho_\Lambda) = v_N^{\text{Sky}} + \frac{\partial \varepsilon_{N\Lambda}}{\partial \rho_N}, \quad (2.5.9)$$

v_N^{Sky} étant issu de la fonctionnelle de Skyrme, et le potentiel effectif des Λ par

$$v_\Lambda^{\text{unif}}(\rho_N, \rho_\Lambda) = \frac{\partial \varepsilon_{N\Lambda}}{\partial \rho_\Lambda} + \frac{\partial \varepsilon_{\Lambda\Lambda}}{\partial \rho_\Lambda}. \quad (2.5.10)$$

Le potentiel hypéronique uniforme peut être décomposé en deux contributions distinctes :

$$v_\Lambda^{\text{unif}} = v_\Lambda^{(N),\text{unif}} + v_\Lambda^{(\Lambda),\text{unif}}, \quad (2.5.11)$$

où, en utilisant les Eqs. (2.4.4) et (2.4.5), on obtient

$$v_\Lambda^{(N),\text{unif}} = \frac{\partial E_{N\Lambda}}{\partial \rho_\Lambda} = -f_1(\rho_N) \rho_N + \frac{5}{3} f_2(\rho_N) \rho_N \rho_\Lambda^{2/3}, \quad (2.5.12)$$

$$v_\Lambda^{(\Lambda),\text{unif}} = \frac{\partial E_{\Lambda\Lambda}}{\partial \rho_\Lambda} = -2\alpha_7 \rho_\Lambda + 3\alpha_8 \rho_\Lambda^2 - 4\alpha_9 \rho_\Lambda^3. \quad (2.5.13)$$

Le terme $v_\Lambda^{(N),\text{unif}}$ représente la contribution des nucléons au potentiel de l'hypéron, tandis que $v_\Lambda^{(\Lambda),\text{unif}}$ correspond à la contribution directe des hypérons à leur propre potentiel (l'interaction directe $\Lambda\Lambda$).

Potentifs effectifs dans les noyaux finis

Dans un noyau fini, la dépendance en densité des masses effectives modifie la structure des potentiels locaux. Les potentiels intervenant dans les équations de HF s'écrivent alors :

Le potentiel moyen ressenti par les nucléons s'écrit alors :

$$V(\mathbf{r}) = v_N^{\text{unif}}(\mathbf{r}) + \frac{\partial}{\partial \rho_N} \left[\frac{m_\Lambda}{m_\Lambda^*(\rho_N)} \right] \left[\frac{\tau_\Lambda}{2m_\Lambda} - \frac{3}{5} \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{2m_\Lambda} \rho_\Lambda^{5/3} \right], \quad (2.5.14)$$

tandis que le potentiel hypéronique est donné par :

$$V(\mathbf{r}) = v_\Lambda^{\text{unif}} - \left[\frac{m_\Lambda}{m_\Lambda^*(\rho_N)} - 1 \right] \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{2m_\Lambda} \rho_\Lambda^{2/3}, \quad (2.5.15)$$

Comme dans le cas de la matière uniforme, le potentiel de l'hypéron peut être décomposé en deux contributions :

$$V_\Lambda = V_\Lambda^{(N)} + V_\Lambda^{(\Lambda)}, \quad (2.5.16)$$

où la contribution provenant des nucléons s'écrit

$$V(\mathbf{r}) = v_{\Lambda}^{(N),\text{unif}} - \left[\frac{m_{\Lambda}}{m_{\Lambda}^*(\rho_N)} - 1 \right] \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{2m_{\Lambda}} \rho_{\Lambda}^{2/3}, \quad (2.5.17)$$

tandis que la contribution directe des hypérons est simplement donnée par

$$V(\mathbf{r}) = v_{\Lambda}^{(\Lambda),\text{unif}}. \quad (2.5.18)$$

La différence entre le potentiel hypéronique dans les noyaux finis et celui en matière uniforme est ainsi principalement liée aux termes dépendant de la densité d'énergie cinétique du Λ , et reflète les effets de la dépendance en impulsion de l'interaction $N\Lambda$.

2.5.3 Correction du centre de masse

L'approximation de champ moyen, en localisant le système nucléaire dans un référentiel fixe, brise spontanément l'invariance par translation. Cette localisation artificielle engendre un mouvement parasite du centre de masse qui contribue de manière non physique à l'énergie cinétique totale du système. Pour corriger cet effet, qui est particulièrement significatif dans les systèmes légers comme ceux étudiés dans cette thèse, il est nécessaire de soustraire la contribution de l'énergie cinétique du centre de masse de l'énergie totale.

Dans le cas d'un hypernoyau, cette correction doit tenir compte de la différence de masse entre les nucléons et les hypérons. Elle est donnée par l'expression suivante [78]

$$\epsilon_{\text{c.m.}} = \frac{\langle \hat{P}_{\text{c.m.}}^2 \rangle}{2[(A - n_{\Lambda})m_N + n_{\Lambda}m_{\Lambda}]}, \quad (2.5.19)$$

où $\langle \hat{P}_{\text{c.m.}}^2 \rangle$ est la valeur moyenne du carré de l'impulsion totale du système, A est le nombre de baryons, n_{Λ} le nombre d'hypérons, et m_N et m_{Λ} désignent respectivement la masse du nucléon et de l'hypéron Λ . Cette correction, bien que numériquement modeste, est systématiquement incluse dans nos calculs afin de garantir la précision des énergies de liaison prédites, en particulier pour les hypernoyaux légers.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons introduit le cadre physique et théorique nécessaire à l'étude des hypernoyaux dans une approche de champ moyen non relativiste. Après

avoir présenté les notions fondamentales liées aux hypernoyaux et au baryon Λ , ainsi que les mécanismes de production et de décroissance qui fondent l'accès expérimental à ces systèmes, nous avons établi les éléments spécifiques requis pour étendre la description des noyaux ordinaires aux systèmes hypernucléaires. Nous avons formulé un hamiltonien effectif baryonique et une fonctionnelle de densité d'énergie incluant de manière cohérente les interactions NN , $N\Lambda$ et $\Lambda\Lambda$. La paramétrisation de ces interactions à partir de calculs BHF permet d'ancrer la description des hypernoyaux finis dans un cadre microscopique contrôlé. L'introduction des masses effectives des nucléons et des hypérons a permis de traiter explicitement la dépendance en impulsion des interactions, élément clé pour la structure des niveaux d'énergie individuels. La minimisation variationnelle de la fonctionnelle d'énergie a conduit aux équations de SHF étendues aux degrés de liberté hypéroniques, qui constituent le cœur du formalisme utilisé dans ce travail. La prise en compte des corrélations d'appariement et de la correction du centre de masse complète ce cadre.

Ainsi, ce chapitre établit le lien entre le formalisme général de champ moyen présenté au Chap. 1 et son application concrète aux hypernoyaux. Il fournit l'ensemble des outils théoriques nécessaires aux calculs numériques qui seront développés dans la suite. Le chapitre suivant est consacré à la méthodologie numérique et à la validation du cadre de calcul, avant l'étude détaillée des propriétés structurales des hypernoyaux d'un seul- Λ et double- Λ .

Chapitre 3

Code de calcul

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation du cadre méthodologique et numérique permettant la résolution pratique des équations de champ moyen issues du formalisme SHF + BCS développé dans les chapitres précédents. L'objectif est de passer d'une formulation théorique continue à une implémentation auto-cohérente robuste, adaptée à l'étude de noyaux finis déformés et d'hypernoyaux.

Nous introduisons dans un premier temps le code de calcul EV8 dans sa version originale, qui constitue la base conceptuelle de notre approche numérique. Les hypothèses physiques et numériques fondamentales y sont introduites, notamment la résolution en espace réel sur une grille cartésienne tridimensionnelle, le traitement auto-cohérent de la déformation et l'utilisation de la méthode du temps imaginaire pour l'accès à l'état fondamental. Nous présentons ensuite les améliorations introduites dans la version plus récente du code, visant à accroître la précision numérique, la stabilité des calculs contraints et la compatibilité avec les fonctionnelles de Skyrme modernes. Ces développements sont essentiels pour l'étude systématique des surfaces d'énergie potentielle en fonction de la déformation. Enfin, nous décrivons l'extension nouvelle du code EV8 au cas des hypernoyaux par l'introduction explicite des degrés de liberté hypéroniques Λ [57]. Cette généralisation permet de traiter de manière cohérente les interactions $N\Lambda$ et $\Lambda\Lambda$, les termes de réarrangement associés aux fonctionnelles de densité, ainsi que les observables spécifiques aux systèmes hypernucléaires. Le chapitre se conclut par une analyse de la stabilité numérique et des critères de convergence adoptés, garantissant la fiabilité des résultats présentés dans le chapitre suivant.

3.2 Code EV8 : version originale (2005)

Le code EV8 [59] s'inscrit dans le cadre du modèle de champ moyen auto-cohérent fondé sur la théorie de la fonctionnelle de l'énergie de Skyrme. Il fournit une réalisation opérationnelle des équations de HF+BCS appliquées aux noyaux finis.

3.2.1 Présentation et description du code

Le code EV8 est un programme numérique développé pour la résolution auto-cohérente des équations de HF couplées au schéma BCS (HF+BCS) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de l'énergie de Skyrme. Il repose sur une formulation en espace des coordonnées, dans laquelle les fonctions d'onde individuelles sont représentées explicitement sur un réseau cartésien tridimensionnel discret. Cette approche est pleinement cohérente avec le formalisme théorique présenté dans les chapitres 1 et 2, où l'état fondamental du noyau est décrit par un déterminant de Slater construit à partir d'orbitales mono-particulaires optimisant une fonctionnelle d'énergie dépendant des densités locales. Dans EV8, le point de départ est la fonctionnelle d'énergie nucléaire $E[\rho, \tau, \mathbf{J}, \dots]$, exprimée en termes des densités locales associées aux nucléons, telles qu'introduites dans le cadre général des fonctionnelles de Skyrme. La minimisation variationnelle de cette fonctionnelle sous contrainte d'orthonormalité des orbitales conduit aux équations de HF à une particule

$$\hat{h}_q(\mathbf{r})\varphi_{q,\alpha}(\mathbf{r}) = e_{q,\alpha}\varphi_{q,\alpha}(\mathbf{r}), \quad (3.2.1)$$

où $q = n, p$ désigne l'isospin, \hat{h}_q l'hamiltonien de champ moyen dépendant explicitement des densités locales, et $e_{q,\alpha}$ les énergies individuelles. Ces équations sont résolues de manière auto-cohérente, les densités étant recalculées à chaque itération à partir des orbitales occupées.

Les corrélations d'appariement sont prises en compte dans EV8 au niveau BCS. Cette approximation permet de capturer l'essentiel des corrélations d'appariement tout en conservant une structure numérique relativement simple et efficace. Sur le plan algorithmique, EV8 met en œuvre une procédure itérative classique de champ moyen. À partir d'un jeu initial de fonctions d'onde, les densités locales sont calculées sur le réseau spatial, puis injectées dans l'hamiltonien de champ moyen dont la forme est entièrement déterminée par la fonctionnelle de Skyrme choisie. Les nouvelles orbitales sont obtenues par une propagation en temps imaginaire, méthode qui permet de filtrer progressivement les états de plus haute énergie et d'assurer la convergence vers

l'état fondamental, comme détaillé dans la section 3.2.3. L'un des atouts majeurs du code EV8 réside dans sa capacité à traiter de manière unifiée les noyaux sphériques et déformés, sans hypothèse a priori sur la géométrie de la densité nucléaire. Cette caractéristique est essentielle pour l'étude systématique des effets de déformation et constitue un prérequis fondamental pour l'introduction de contraintes multipolaires, en particulier la contrainte quadrupolaire qui sera présentée dans la section 3.2.4.

3.2.2 Discrétisation spatiale et symétries

Dans le code EV8, les équations de HF sont résolues directement dans l'espace des coordonnées, lequel est discrétisé sur un réseau cartésien tridimensionnel uniforme. Le domaine de calcul est défini par une boîte rectangulaire de dimensions finies, choisies suffisamment grandes pour contenir l'essentiel de la densité nucléaire et imposer des conditions aux limites nulles aux frontières de la boîte. La discrétisation spatiale est caractérisée par un pas constant $\Delta x = \Delta y = \Delta z$, identique dans les trois directions de l'espace. Ce paramètre numérique contrôle directement la précision de la représentation des fonctions d'onde et des densités locales, ainsi que l'évaluation des opérateurs différentiels intervenant dans l'hamiltonien de champ moyen. Les dérivées spatiales, en particulier le Laplacien associé au terme cinétique et les gradients intervenant dans les termes de spin-orbite, sont évaluées à l'aide de schémas de différences finies d'ordre élevé, assurant un bon compromis entre précision et coût computationnel. Dans l'ensemble des calculs présentés, on adopte $\Delta x = 0.8$ fm, ce qui assure un volume total suffisant pour décrire correctement les noyaux, et par la suite les hypernoyaux, légers étudiés, avec une précision numérique adaptée à la description des systèmes déformés et des densités étendues. Afin de réduire significativement le temps de calcul tout en conservant l'essentiel de la physique pertinente, le code EV8 exploite des symétries spatiales auto-cohérentes. En particulier, l'existence de trois plans de symétrie orthogonaux est supposée, tels que :

$$\rho(x, y, z) = \rho(-x, y, z), \quad \rho(x, y, z) = \rho(x, -y, z) \quad \text{et} \quad \rho(x, y, z) = \rho(x, y, -z). \quad (3.2.2)$$

Sous cette hypothèse, le domaine de calcul est limité à un seul octant de la boîte tridimensionnelle, réduisant ainsi d'un facteur huit le volume numérique à traiter. Le calcul est alors réalisé sur un réseau cartésien fini de dimensions $N_x \times N_y \times N_z$ points dans l'octant, avec, dans nos calculs, $N_x = N_y = N_z = 16$. Cela correspond à une boîte physique totale de 32^3 points, soit environ 25.6 fm de côté, suffisante pour contenir les fonctions d'onde étendues, comme décrit sur le schéma 3.2.1. L'imposition de ces

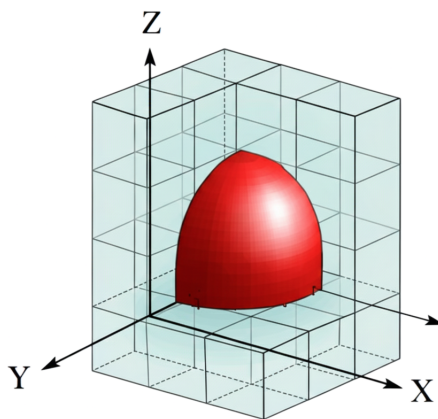


FIGURE 3.2.1 – discrétisation des octants + symétries supposées dans les calculs EV8.

symétries exclut certaines déformations impaires de la densité, telles que les déformations octupolaires, mais autorise pleinement les déformations paires, notamment les déformations quadrupolaires et hexadécupolaires. Ce choix est donc bien adapté aux études des propriétés statiques et des surfaces d'énergie potentielle dominées par des modes de déformation pairs, qui constituent l'objet principal de ce travail.

Aucune symétrie de spin n'est imposée dans EV8. Chaque orbitale à une particule $|\alpha\rangle$ est décrite par un spineur à deux composantes explicites (spin *up* et *down*), permettant de traiter correctement les effets de spin-orbite générés par la fonctionnelle de Skyrme. Enfin, pour les noyaux pair-pair, la symétrie par renversement du temps est exploitée pour réduire de moitié le nombre d'orbitales à calculer, les états étant dégénérés par paires de Kramers.

3.2.3 Méthode du temps imaginaire

La résolution des équations de HF auto-cohérentes est effectuée à l'aide de la méthode du temps imaginaire, qui constitue l'un des algorithmes numériques les plus efficaces pour accéder à l'état fondamental d'un système quantique à plusieurs corps.

Le principe de cette méthode repose sur l'évolution formelle des orbitales à une particule selon la relation itérative

$$|\varphi_\alpha^{(n+1)}\rangle = \exp\left(-\frac{\Delta t}{\hbar} \hat{h}^{(n)}\right) |\varphi_\alpha^{(n)}\rangle. \quad (3.2.3)$$

où \hat{h} désigne l'hamiltonien de champ moyen construit à partir des densités de l'itération n . Une telle évolution entraîne un amortissement exponentiel des composantes de haute

énergie (états excités) et projette progressivement les fonctions d'onde sur les états de plus basse énergie, conduisant ainsi à l'état fondamental du système.

Cependant, cet opérateur n'est pas unitaire et ne conserve pas la norme. Pour garantir le respect du principe de Pauli et la conservation du nombre de particules, les orbitales $|\varphi_\alpha^{(n+1)}\rangle$ sont systématiquement ré-orthonormalisées (procédure de Gram-Schmidt) à l'issue de chaque pas de temps. Dans le code EV8, l'opérateur exponentiel est approché par un développement en série de Taylor en fonction du pas de temps Δt . Le processus est initialisé à partir de fonctions d'onde issues d'un potentiel de Nilsson (code NIL8), ce qui fournit un point de départ proche de la solution. Le cycle itératif est poursuivi jusqu'à la stabilisation de l'énergie totale, des densités et des observables globales. Typiquement, un nombre de l'ordre de quelques centaines d'itérations en temps imaginaire (environ 600 dans les calculs présentés ici pour atteindre une convergence fine) est suffisant pour obtenir l'état fondamental auto-cohérent.

3.2.4 Hartree–Fock sous contrainte quadrupolaire

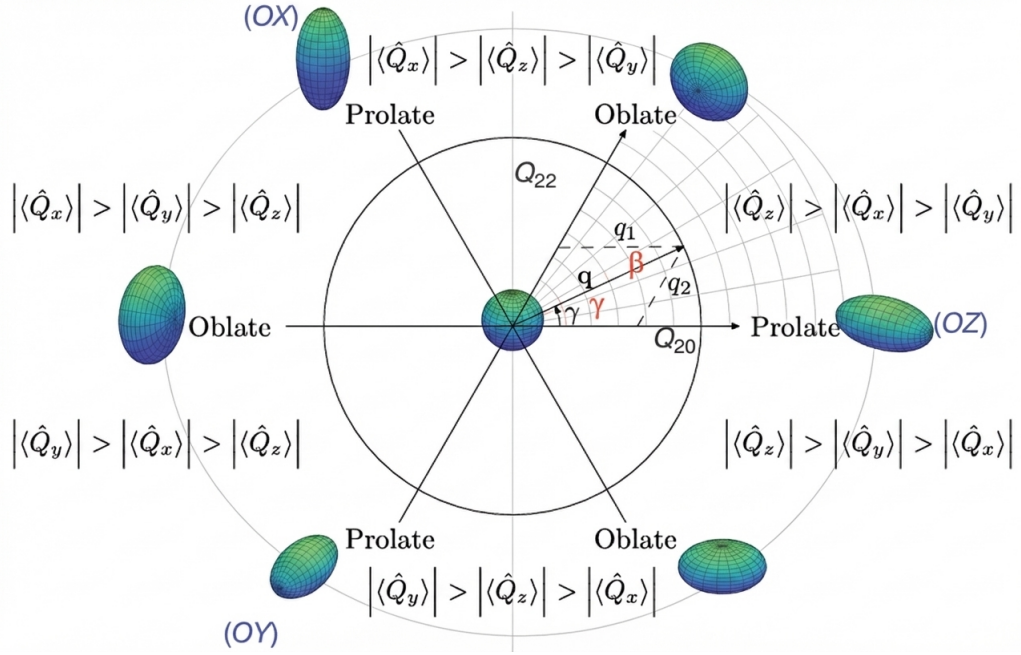
La procédure de HF standard converge naturellement vers un minimum local de l'énergie totale. Cependant, pour étudier la structure nucléaire, il est indispensable d'explorer la dépendance de l'énergie vis-à-vis de la forme du noyau et de construire des surfaces d'énergie potentielle (SEP). Pour ce faire, nous introduisons des contraintes externes sur la densité nucléaire.

En raison de l'importance des corrélations quadrupolaires dans les modèles collectifs [54, 79], ce travail se concentre sur les contraintes quadrupolaires. Celles-ci permettent de piloter les déformations ellipsoïdales et d'accéder à l'ensemble des configurations géométriques : sphériques, allongées (prolate), aplaties (oblate) et triaxiales.

Le code EV8 caractérise la géométrie du noyau via les moments multipolaires de masse $\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle$. Compte tenu des symétries imposées (parité et plans de réflexion), seuls les moments avec ℓ et m pairs sont non nuls, avec la propriété $\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle = \langle \hat{Q}_{\ell, -m} \rangle$. Pour le secteur quadrupolaire ($\ell = 2$), les moments axiaux et non-axiaux sont définis sur l'état HF $|\Phi\rangle$ par :

$$Q_{20} = \langle \Phi | \hat{Q}_{20} | \Phi \rangle, \quad Q_{22} = \sqrt{\frac{1}{2}} \langle \Phi | \hat{Q}_{22} + \hat{Q}_{2, -2} | \Phi \rangle. \quad (3.2.4)$$

Il est physiquement plus intuitif de relier ces moments aux dimensions cartésiennes du noyau. On définit alors les opérateurs :


 FIGURE 3.2.2 – Cartographie des formes nucléaires dans le plan des déformations (β, γ)

$$\hat{Q}_x = -\sqrt{\frac{4\pi}{5}} \left(\hat{Q}_{20} - \sqrt{6} \hat{Q}_{22} \right) = 2\hat{x}^2 - \hat{y}^2 - \hat{z}^2, \quad (3.2.5)$$

$$\hat{Q}_y = -\sqrt{\frac{4\pi}{5}} \left(\hat{Q}_{20} + \sqrt{6} \hat{Q}_{22} \right) = 2\hat{y}^2 - \hat{x}^2 - \hat{z}^2, \quad (3.2.6)$$

$$\hat{Q}_z = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \hat{Q}_{20} = 2\hat{z}^2 - \hat{x}^2 - \hat{y}^2. \quad (3.2.7)$$

Afin de relier ces grandeurs microscopiques à une interprétation géométrique unifiée, on introduit les coordonnées collectives (q, γ) . Le paramètre q mesure l'amplitude totale de la déformation quadrupolaire et est défini à partir des moments quadrupolaires par :

$$q = \sqrt{\frac{16\pi}{5} \left(\langle \hat{Q}_{20} \rangle^2 + \langle \hat{Q}_{22} \rangle^2 \right)}. \quad (3.2.8)$$

L'angle γ caractérise la triaxialité de la forme nucléaire. Il est calculé via la relation

suivante, qui garantit une définition univoque dans le secteur $0^\circ \leq \gamma \leq 60^\circ$:

$$\gamma = 2 \arctan \left(\frac{\sqrt{2} \langle \hat{Q}_{22} \rangle}{\sqrt{\langle \hat{Q}_{20} \rangle^2 + 2 \langle \hat{Q}_{22} \rangle^2 + \langle \hat{Q}_{20} \rangle}} \right). \quad (3.2.9)$$

Ces coordonnées permettent de cartographier les formes nucléaires (voir Fig. 3.2.2) : $\gamma = 0^\circ$ correspond à une forme allongée le long de l'axe z et $\gamma = 60^\circ$ correspond à une forme aplatie. Les valeurs intermédiaires décrivent des formes triaxiales. Pour faciliter la comparaison avec d'autres travaux, on introduit souvent le paramètre de déformation adimensionnel de Hill-Wheeler β_{lm} [80], directement proportionnel à q :

$$\beta_2 \equiv \beta = \frac{4\pi}{3R_0^2 A} \left(\sqrt{\frac{5}{16\pi}} q \right) \approx \frac{4\pi}{3R_0^2 A} \langle \hat{Q}_{20} \rangle, \quad R_0 = 1.2A^{1/3} \text{fm}. \quad (3.2.10)$$

Le paramètre β mesure l'amplitude globale de la déformation quadrupolaire et fournit une mesure globale de l'élongation du noyau : $\beta = 0$ correspond à une forme sphérique, $\beta > 0$ à une forme allongée et $\beta < 0$ à une forme aplatie, l'ensemble du plan (β, γ) étant couvert par symétrie (voir Fig. 3.2.2). On rappelle que la déformation nucléaire n'est pas une observable stricte et que le paramètre β fournit une mesure effective de la forme du noyau.

Pour explorer systématiquement l'espace des formes, EV8 utilise une paramétrisation spécifique (q_1, q_2) , plus stable numériquement pour les contraintes que les paramètres polaires usuels (q, γ) . Ces variables permettent de contrôler simultanément l'amplitude de la déformation et la triaxialité. Elles sont reliées aux paramètres collectifs par :

$$\begin{aligned} q_1 &= q \cos \gamma - \frac{1}{\sqrt{3}} q \sin \gamma, \\ q_2 &= \frac{2}{\sqrt{3}} q \sin \gamma, \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

qui sont directement liées aux composantes cartésiennes par les relations

$$\langle \hat{Q}_x \rangle = -q \cos(\gamma + 60), \quad \langle \hat{Q}_y \rangle = -q \cos(\gamma - 60), \quad \langle \hat{Q}_z \rangle = -q \cos(\gamma), \quad (3.2.12)$$

et, inversement,

$$q = q_1^2 + q_2^2 + q_1 q_2, \quad \gamma = 2 \arctan \left(\frac{3q_2}{2q_1 + q_2} \right). \quad (3.2.13)$$

L'exploration des configurations triaxiales est réalisée en faisant varier simultanément q_1 et q_2 dans le fichier d'entrée. La contrainte est imposée via une méthode de contrainte quadratique, qui présente une meilleure stabilité numérique que la contrainte linéaire [54]. L'énergie variationnelle est alors modifiée selon

$$E' = E_{\text{HF}} + \sum_{i=1,2} \frac{C_i}{2} \left(\langle \hat{Q}_i \rangle - \mu_i \right)^2, \quad (3.2.14)$$

où $\langle \hat{Q}_i \rangle$ sont les valeurs calculées des moments (q_1, q_2) , μ_i sont les valeurs cibles désirées, et C_i sont les constantes de rigidité de la contrainte.

Pratiquement, dans le fichier d'entrée, l'utilisateur définit les cibles μ_i par des nombres entiers multipliant un pas élémentaire Δq (paramètre `delq`). Le code offre la possibilité de réajuster automatiquement les paramètres μ_i au cours des itérations pour s'assurer qu'à la convergence, la déformation obtenue $\langle \hat{Q} \rangle$ coïncide exactement avec la contrainte demandée. Cette méthode permet de tracer les courbes d'énergie $E(q, \gamma)$ avec une grande précision, constituant la base de l'analyse structurelle présentée au chapitre 4.

La version originale du code EV8 fixe le cadre conceptuel de base du formalisme. La section suivante en présente les prolongements naturels.

3.3 Le code de référence : EV8 (version 2015)

Dans ce travail, nous utilisons la version modernisée du code Ev8, publiée en 2015 par Ryssens et al. [58]. Cette mouture constitue une évolution substantielle de la version originale de 2005 [59]. Bien que les deux versions reposent sur les mêmes fondements théoriques ; à savoir la résolution auto-cohérente des équations de HF+BCS avec une interaction de type Skyrme sur un maillage cartésien tridimensionnel ; la nouvelle version introduit des améliorations numériques et fonctionnelles déterminantes pour des calculs de haute précision.

3.3.1 Améliorations numériques

La différence majeure réside dans la discrétisation des opérateurs différentiels. Alors que la version originale reposait sur des différences finies, la version 2015 implémente

la technique du maillage de Lagrange (Lagrange Mesh). Cette approche permet de calculer les dérivées spatiales avec une précision quasi-spectrale, bien supérieure à celle des schémas de différences finies classiques, sans accroître le coût de calcul. De plus, le traitement de l'interaction coulombienne a été revu. Le nouveau solveur de Poisson intègre des conditions aux limites améliorées qui éliminent les interactions parasites entre les images périodiques de la boîte de calcul (défaut fréquent dans les méthodes de Fourier), assurant ainsi une description rigoureuse des noyaux aux limites de la stabilité et des configurations très déformées.

3.3.2 Améliorations physiques

Sur le plan physique, cette version offre une flexibilité accrue dans la définition de la fonctionnelle de densité d'énergie nucléaire. Elle permet :

- L'inclusion explicite des termes tensoriels de spin-courant \mathbf{J}^2 (souvent négligés dans les anciennes versions mais cruciaux pour la spectroscopie fine).
- Un traitement exact du terme d'échange Coulombien et de la correction du mouvement du centre de masse.
- Une compatibilité totale avec les paramétrisations modernes de Skyrme (familles SLy, SkO, UNEDF, etc.).

Enfin, les algorithmes de contrainte ; essentiels pour nos calculs de Surface d'Énergie Potentielle (Potential Energy Surface - PES) ; ont été stabilisés, permettant une convergence robuste même pour des configurations exotiques (formes très allongées ou triaxiales). En résumé, la version 2015 d'EV8 garantit une précision numérique et une fidélité physique supérieures, justifiant son choix comme socle pour l'implémentation de la physique des hypernoyaux.

Ces développements récents offrent un cadre modulaire idéal pour l'extension du formalisme. La section suivante décrit cette généralisation aux systèmes avec hypercharge étrangeté.

3.4 Adaptation du code EV8 pour les hypernoyaux : le code EV8- Λ (2025)

L'objectif central de ce travail de thèse a été d'étendre le code de référence EV8 (version 2015) pour permettre la description microscopique des hypernoyaux. Cette extension, baptisée EV8- Λ [57], ne se limite pas à l'ajout statique d'une particule supplémentaire ; elle nécessite une modification profonde de la boucle auto-cohérente pour

traiter le couplage dynamique entre le cœur nucléaire et l'hypéron Λ via l'interaction forte.

Les objectifs principaux de ce développement sont :

- (i) intégrer la contribution N - Λ et, plus généralement, permettre la prise en compte de $\Lambda\Lambda$ pour études double- Λ ;
- (ii) conserver la structure 3D sur maillage et l'ensemble des optimisations numériques d'EV8-2015 (symétries octantiques, maillage de Lagrange) ;
- (iii) minimiser l'impact sur le coût informatique par des modifications locales des structures de données et des algorithmes ;
- (iv) fournir une interface utilisateur compatible avec les fichiers d'entrée existants d'EV8, moyennant des extensions contrôlées, ainsi que des sorties dédiées aux observables hypéroniques.

Les principes de conception respectent la philosophie d'EV8 : modularité (séparation nette entre secteur nucléonique et hypéronique), robustesse numérique (stabilité des contraintes) et traçabilité (impressions détaillées à chaque itération).

3.4.1 Intégration des structures de données

Sur le plan informatique, l'introduction de l'hypéron nécessite l'allocation de nouvelles structures de données miroirs de celles des nucléons. Dans notre implémentation, le Λ est traité comme une espèce distincte de fermions, neutre (sans isospin ni charge) et discernable des nucléons.

a. Structures mémoire et fonctions d'onde : Nous avons introduit des tableaux spécifiques pour stocker les grandeurs hypéroniques, définis sur le même réseau cartésien que les nucléons :

- Orbitales hypéroniques : Un jeu d'orbitales $\{\varphi_{\Lambda,i}(\mathbf{r})\}$ (spineurs à deux composantes). Pour les hypernoyaux légers étudiés, le nombre d'orbitales propagées (`nwaveLambda`) est réduit au strict nécessaire (états $1s$ et $1p$).
- Densités locales : Calcul de la densité de matière $\rho_{\Lambda}(\mathbf{r})$, de la densité d'énergie cinétique $\tau_{\Lambda}(\mathbf{r})$ et des courants $\mathbf{J}_{\Lambda}(\mathbf{r})$ à chaque itération.
- Matrices d'appariement : Amplitudes (u_{α}, v_{α}) et matrices κ_{Λ} dans la base canonique pour un éventuel traitement BCS.

b. Extension du fichier d'entrée : Afin de piloter cette nouvelle physique sans rompre la compatibilité, des blocs optionnels ont été ajoutés au fichier d'entrée standard :

- `nLambda` : Nombre d'hypérons imposé (0, 1 ou 2) ;
- `HyperonInteraction` : Choix de la fonctionnelle N - Λ / $\Lambda\Lambda$ (dans notre cas

- DF-NSC89, DF-NSC97a, DF-NSC97f, EmpC) ;
- `alpha_i` : Paramètres $\alpha_{1\dots 9}$ définissant les polynômes $f_{1,2,3}$ (voir section 2.4.3) ;
- `mu_i` : Coefficients $\mu_{1\dots 4}$ intervenant dans la masse effective $m_\Lambda^*(\rho_N)$ (voir section 2.5.1) ;
- `gLambda` : Intensité de l'appariement Λ ;
- `spin_orbit_lambda` : Commutateur pour activer/désactiver le terme spin-orbite (négligé par défaut).

En l'absence de ces blocs, le code se comporte strictement comme EV8-2015.

3.4.2 Fonctionnelles et Potentiels couplés

Le cœur de la modification réside dans la construction des champs moyens. Contrairement aux nucléons qui ressentent le potentiel Skyrme standard, l'hypéron ressent un potentiel $U_\Lambda(\mathbf{r})$ dérivé des fonctionnelles DF-NS. Le système n'est plus constitué d'un seul fluide, mais de deux fluides couplés.

Densité d'énergie étendue : La densité d'énergie totale s'écrit désormais :

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_N(\rho_N, \tau_N, \mathbf{J}_N) + \varepsilon_\Lambda(\rho_\Lambda, \tau_\Lambda, \mathbf{J}_\Lambda) + \varepsilon_{N\Lambda}(\rho_N, \rho_\Lambda) + \varepsilon_{\Lambda\Lambda}(\rho_\Lambda). \quad (3.4.1)$$

Construction des potentiels effectifs : À chaque itération spatiale, les champs moyens sont construits en incluant les termes croisés :

a. Potentiel Hypéronique V_Λ : Il est calculé analytiquement à partir des dérivées fonctionnelles $U_\Lambda(\mathbf{r}) = \frac{\delta\varepsilon}{\delta\rho_\Lambda}$ et inclut les corrections de masse effective via $\frac{\delta\varepsilon}{\delta\tau_\Lambda}$. Il dépend fortement de la densité instantanée du cœur ρ_N .

b. Potentiel Nucléonique V_N (Réarrangement) : Point crucial de notre développement, le potentiel ressenti par les nucléons est modifié par la présence de l'hypéron. Nous avons explicitement codé le terme de réarrangement $\frac{\partial\varepsilon_{N\Lambda}}{\partial\rho_N}$, qui traduit la "réponse" du cœur nucléaire à l'interaction avec le Λ .

L'implémentation des termes d'interaction utilise les formes polynomiales présentées au Chapitre 2 :

$$\varepsilon_{N\Lambda} = -f_1(\rho_N) \rho_N \rho_\Lambda + f_2(\rho_N) \rho_N \rho_\Lambda^{5/3}. \quad (3.4.2)$$

Traitement numérique : Les dérivées spatiales liées aux densités de Λ (gradients, Laplaciens) utilisent les mêmes routines de haute précision (maillage de Lagrange) que le secteur nucléonique, garantissant la cohérence numérique.

3.4.3 Correction du centre de masse

La cinématique du système est modifiée par la présence d'un hypéron de masse $M_\Lambda \neq M_N$. Dans le code étendu, nous avons généralisé la correction du centre de masse à un corps pour tenir compte de l'impulsion portée par l'hypéron. La correction soustraite à l'énergie totale est :

$$E_{CM} = \frac{\langle \hat{P}_{tot}^2 \rangle}{2M_{tot}}. \quad (3.4.3)$$

L'implémentation calcule l'impulsion totale $\hat{P}_{tot} = \sum_i^A \hat{p}_i + \sum_j^{n_\Lambda} \hat{p}_{\Lambda,j}$ en sommant les contributions sur le réseau. Cette correction est essentielle pour prédire correctement les énergies de liaison des hypernoyaux très légers.

3.4.4 Termes spin-orbit et effets spécifiques du Λ

Observations expérimentales et choix pratiques :

- **Spin-orbit du Λ** : expérimentalement très faible ; par défaut, EV8- Λ néglige la contribution spin-orbit du Λ (`spin_orbit_lambda=0`). L'option `=1` permet néanmoins d'ajouter un terme de type $W_\Lambda \mathbf{J}_\Lambda \cdot \nabla \rho$ si nous souhaitons tester son influence (valeur modifiable via l'entrée).
- **Exclusion de couplages tensoriels spécifiques** : dans la version initiale, on n'introduit pas de termes tensoriels dédiés au Λ (coût / manque de contraintes). Ils peuvent être ajoutés ultérieurement.

3.4.5 Traitement de l'appariement et Observables

Appariement Hypéronique (BCS)

Pour être complet, le code inclut une routine BCS pour les hyperons :

- **BCS en base canonique** : on diagonalise l'opérateur de champ moyen \hat{h}_Λ dans la base numérique afin d'obtenir les valeurs propres $\varepsilon_{\Lambda,\alpha}$ associées aux états hyperoniques. Les équations BCS sont ensuite formulées et résolues pour l'hypéron Λ dans cette base canonique, selon une procédure analogue à celle utilisée dans le secteur nucléonique.
- **Occupation et densités** : calcul de v_α^2 et $u_\alpha v_\alpha$, permettant la mise à jour des densités hyperoniques $\rho_\Lambda(\mathbf{r})$ et $\tau_\Lambda(\mathbf{r})$, conformément aux formules BCS (§1.7.3).
- **Appariement** : l'algorithme BCS pour les Λ est entièrement implémenté et peut être activé via les blocs d'entrée. Cependant, pour les résultats présentés

dans cette thèse (systèmes à 1 ou 2 Λ), l'appariement hypéronique est désactivé (`gLambda=0`), l'effet superfluide n'étant pas pertinent pour un nombre si faible de particules ; sauf indication contraire dans des études de test spécifiques [57].

Observables de sortie

Les routines d'extraction ont été enrichies pour calculer :

- **L'énergie de liaison de l'hypéron (B_Λ)** : Calculée comme la différence entre l'énergie totale de l'hypernoyau et celle du cœur nucléaire.
- **Les déformations généralisées** : Les moments quadrupolaires sont calculés pour la distribution de matière totale. Pour faciliter la comparaison, le paramètre β est normalisé par rapport au rayon du cœur nucléaire :

$$\beta = \frac{4\pi}{3R_0^2 A} \langle \hat{Q}_{20} \rangle, \quad R_0 = 1.2(A - n_\Lambda)^{1/3} \text{fm}, \quad (3.4.4)$$

- **Rayons et profils** : Les rayons quadratiques moyens et les densités sont imprimés séparément pour le cœur et l'hypéron, permettant de visualiser la localisation spatiale de l'impureté étrange.

3.4.6 Algorithme de résolution couplé

L'algorithme de résolution a été repensé pour traiter la dynamique conjointe des nucléons et des hyperons. Les équations de HF pour les deux espèces sont résolues simultanément au sein de la même boucle de temps imaginaire.

Le schéma itératif ($t \rightarrow t + \Delta t$) procède comme suit :

a. Construction simultanée : Calcul des potentiels $V_N(\mathbf{r})$ et $V_\Lambda(\mathbf{r})$ basés sur les densités de l'étape précédente.

b. Propagation temporelle :

- Propagation des orbitales nucléaires : $\varphi_N^{(n+1)} = \exp(-\Delta t \hat{h}_N) \varphi_N^{(n)}$
- Propagation des orbitales hyperoniques : $\varphi_\Lambda^{(n+1)} = \exp(-\Delta t \hat{h}_\Lambda) \varphi_\Lambda^{(n)}$
- Note technique : Le pas de temps Δt est ajusté automatiquement pour garantir la stabilité numérique, particulièrement lorsque la masse effective m_Λ^* varie fortement (valeur typique $\Delta t \approx 1.2 \times 10^{-24}$ s).

c. Orthonormalisation : Les deux jeux d'orbitales sont orthonormalisés séparément (Gram-Schmidt) pour assurer le respect du principe de Pauli pour chaque espèce fermionique.

d. Convergence : Le cycle continue jusqu'à stabilisation de l'énergie totale E_{tot} et des densités partielles.

e. Coût : l'ajout de n_Λ orbitales augmente la mémoire et le temps de calcul selon un facteur proche de $1 + \frac{n_\Lambda}{n_p+n_n}$ pour le stockage des orbitales ; le coût supplémentaire est donc marginal dans le cas des hypernoyaux légers (un ou deux Λ).

L'ensemble des étapes numériques décrites dans cette section peut être synthétisé par le schéma auto-cohérent présenté en Fig. 3.6.1, qui résume l'architecture générale du code EV8 étendu aux hypernoyaux. Le diagramme illustre l'enchaînement des étapes du calcul SHF avec appariement BCS : construction des densités, calcul du champ moyen nucléonique et hypéronique, prise en compte de l'appariement, résolution des équations de champ moyen et mise à jour itérative jusqu'à convergence. Une fois l'auto-cohérence atteinte, les observables statiques du système sont extraites.

3.5 Stabilité numérique et convergence

Avant de présenter les résultats, nous explicitons le paramétrage numérique commun à l'ensemble des calculs rapportés, ainsi que la stratégie de calcul adoptée pour l'étude des hypernoyaux déformés, qui repose sur les éléments suivants [57] :

- nombre de points par direction $N_x = N_y = N_z = 16$ (octant exploité via symétries spatiales), ce qui donne une boîte suffisante pour les hypernoyaux légers étudiés ;
- un pas de maillage $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.8$ fm assurant un compromis optimal entre précision et temps de calcul pour des hypernoyaux légers et déformés ;
- l'utilisation de la méthode du temps imaginaire avec environ 600 itérations afin de garantir une convergence de l'énergie totale E_{tot} à $|\Delta E_{tot}| < 10^{-5}$ MeV entre itérations ;
- l'imposition de la contrainte quadrupolaire pour cartographier la surface d'énergie potentielle et identifier les minima globaux ;
- orthogonalisation complète des orbitales après chaque pas temporel ; ré-orthonormalisation séparée par espèces (nucléons, Λ) ;
- les corrélations d'appariement nucléaires sont traitées en HF+BCS avec la constante $g = 410$ MeV·fm³. En revanche, bien que la version EV8- Λ comporte une option BCS pour les Λ (cf. §3.4.5), l'appariement hypéronique n'a pas été activé dans les simulations numériques présentés ici (fichier d'entrée : `gLambda=0`). Cette décision est motivée par (i) la faible influence attendue pour les cas à $n_\Lambda = 1$ et (ii) la volonté d'isoler l'effet des termes N - Λ et Λ - Λ dans les analyses des

surfaces d'énergie.

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons établi de manière détaillée le cadre méthodologique et numérique sur lequel repose l'ensemble des calculs présentés dans cette thèse. Après avoir rappelé les principes fondamentaux du code EV8 dans sa version originale, nous avons mis en évidence les améliorations substantielles introduites dans sa version récente, en particulier en termes de précision numérique, de stabilité des calculs contraints et de compatibilité avec les fonctionnelles de Skyrme modernes.

Nous avons ensuite présenté l'extension originale du code au cas des hypernoyaux, notée EV8- Λ , développée dans le cadre de ce travail. Cette version permet une prise en compte explicite et cohérente des interactions $N\Lambda$ et $\Lambda\Lambda$, des termes de réarrangement associés, ainsi que des observables spécifiques aux hyperons, tout en conservant l'architecture numérique robuste du code initial. Bien que le formalisme autorise un traitement de l'appariement hyperonique au niveau BCS, celui-ci est négligé dans les calculs numériques présentés, ce choix étant justifié par le faible nombre d'hyperons considérés et le caractère isolé de leurs niveaux d'énergie individuels. Enfin, l'analyse de la stabilité numérique et des critères de convergence adoptés a permis de valider la fiabilité des solutions auto-cohérentes obtenues, tant pour les noyaux ordinaires que pour les hypernoyaux déformés. L'ensemble de ces développements fournit ainsi une base numérique solide et maîtrisée pour l'étude systématique de l'influence de l'étrangeté sur les propriétés statiques et la déformation des hypernoyaux légers, dont les résultats et l'interprétation physique sont présentés dans la partie suivante de la thèse [57].

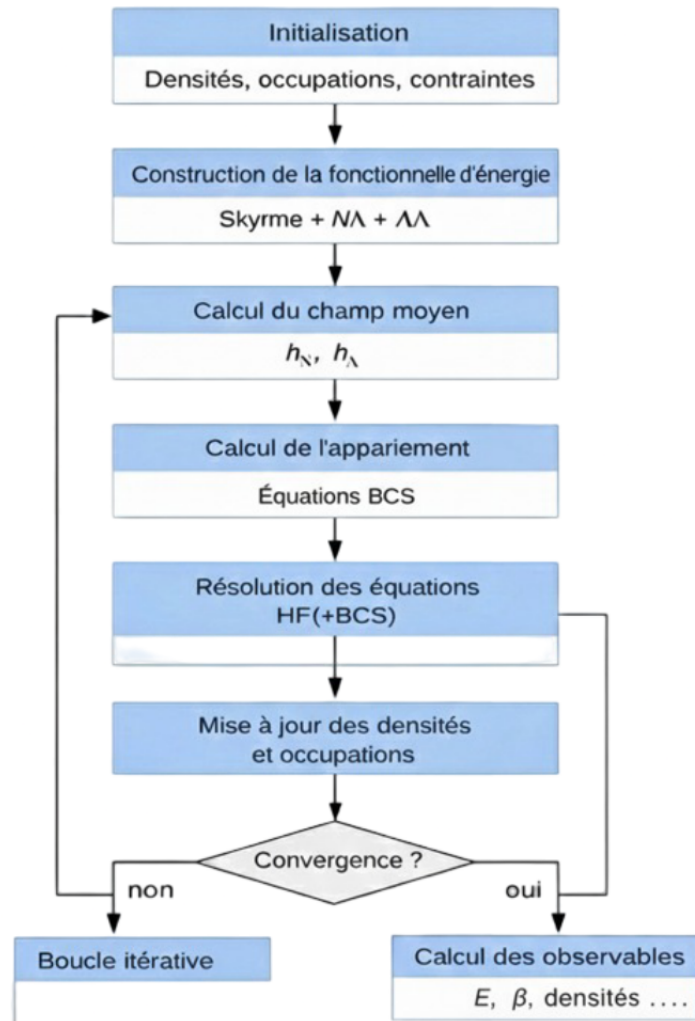


FIGURE 3.6.1 – Algorithme principale du code EV8-A dans le cadre SHF+BCS.

Chapitre 4

Résultats pour les Hypernoyaux

légers : ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$

4.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation et à la discussion des résultats obtenus pour les hypernoyaux légers ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, en prenant comme système de référence le noyau de ${}^8\text{Be}$. Ce dernier présente la particularité d'être fortement déformé et de présenter une structure en amas (clustering) prononcée. L'objectif central est d'analyser, dans le cadre du champ moyen auto-cohérent implémenté dans le code EV8, l'impact microscopique de l'injection d'un ou de deux hypérons Λ sur cette structure nucléaire [57].

Le choix de la chaîne isotopique du Béryllium n'est pas fortuit. Le ${}^8\text{Be}$ constitue un laboratoire idéal pour étudier le rôle stabilisateur de l'étrangeté. En effet, sa structure en deux clusters alpha α - α permet de mettre en évidence de manière spectaculaire l'effet de « colle » (*glue-like role*) des hypérons.

Méthodologiquement, les calculs présentés reposent sur l'interaction de Skyrme SLy4 pour le secteur nucléonique. Pour le secteur étrange, cette interaction est couplée aux fonctionnelles de densité effectives $N\Lambda$ issues de calculs microscopiques BHF, à savoir DF-NSC89, DF-NSC97a et DF-NSC97f, complétées par la prescription empirique EmpC pour le canal $\Lambda\Lambda$. L'analyse des résultats s'articule autour de la progression suivante : (i) justifions d'abord le choix des paramètres et validons notre approche par comparaison avec des codes sphériques établis ; (ii) caractérisons l'état fondamental du ${}^8\text{Be}$ et ses Surface d'Énergie Potentielle (PES) ; (iii) analysons la contraction des rayons et l'évolution vers la forme sphérique (réduction de la déformation) via l'étude

microscopique des niveaux d'énergie individuels et des distributions de densité ; (iv) confrontons nos résultats théoriques aux données expérimentales disponibles pour les énergies de liaison simple (B_Λ) et double ($B_{\Lambda\Lambda}$), afin d'évaluer la qualité prédictive des différentes fonctionnelles.

L'ensemble de ces résultats vise à établir un lien cohérent entre les modifications microscopiques du champ moyen induites par les hypérons et les propriétés structurales macroscopiques des hypernoyaux légers.

4.2 Choix des interactions effectives

La fiabilité des prédictions microscopiques repose sur un choix pertinent des interactions effectives décrivant les différents secteurs du système. Pour garantir la cohérence du champ moyen, nous avons sélectionné des paramétrisations largement éprouvées dans la littérature.

Secteur nucléonique (NN) :

Pour décrire le cœur nucléaire, nous avons retenu l'interaction de Skyrme SLy4 (Skyrme Lyon 4) [65]. Ce choix dépasse la simple convention et repose sur trois arguments physiques majeurs adaptés à notre étude :

i. Compatibilité avec l'approche microscopique : Les fonctionnelles hypéroniques utilisées dans ce travail dérivent de calculs de BHF qui nécessitent une description réaliste de l'équation d'état de la matière nucléaire. SLy4 a été spécifiquement conçue pour décrire correctement la matière nucléaire de la saturation jusqu'aux hautes densités, assurant ainsi une cohérence optimale avec les modèles microscopiques d'interaction NA calibrés par Vidaña et al. [36].

ii. Stabilité dans les calculs déformés : Contrairement à des paramétrisations plus anciennes (comme SIII) qui peuvent présenter des instabilités de spin ou de déformation, SLy4 est reconnue pour sa robustesse. Elle permet de décrire des configurations exotiques (comme la structure en clusters α - α du ^8Be) sans générer d'artefacts numériques ferromagnétiques, ce qui est crucial lorsque le cœur est polarisé par l'ajout d'impuretés étranges.

iii. Qualité spectroscopique : SLy4 offre une excellente reproduction des propriétés de structure de couches (gaps spin-orbite) et des rayons pour les noyaux légers. Elle constitue donc une référence fiable ("baseline") pour isoler et quantifier les modifications structurales induites purement par les hypérons.

Note : Des tests de sensibilité ont été effectués avec d'autres forces (SIII, SGII, SkM*), mais SLy4 reste notre interaction de référence pour la discussion des résultats.

Secteur hypéronique ($N\Lambda$ et $\Lambda\Lambda$) :

Pour l'interaction nucléon-hypéron, nous avons adopté trois fonctionnelles de densité construites à partir de calculs microscopiques de BHF, basées sur les potentiels mésoniques du groupe de Nijmegen :

- **DF-NSC89**
- **DF-NSC97a**
- **DF-NSC97f**

Enfin, le canal d'interaction hypéron-hypéron ($\Lambda\Lambda$) est traité via la prescription empirique EmpC, tandis que l'interaction nucléon-hypéron ($N\Lambda$) est régie par les fonctionnelles déduites des potentiels de Nijmegen.

4.3 Validation du Modèle

Avant d'aborder l'étude des hypernoyaux déformés, il est indispensable de valider la précision de notre implémentation numérique. Bien que le code EV8 exploite des symétries spatiales (plans de réflexion) pour réduire le domaine de calcul, il n'impose pas la symétrie sphérique. La validation standard consiste donc à vérifier qu'il retrouve les résultats exacts de codes de référence imposant la symétrie sphérique (1D) lorsque le noyau est non déformé.

Cette étape poursuit deux objectifs : (i) s'assurer que les termes de la fonctionnelle $N\Lambda$ sont correctement codés et (ii) confirmer que la base sur réseau cartésien reproduit fidèlement les états quantiques sphériques.

Nous avons calculé les énergies des niveaux d'énergie individuels (valeurs propres ε_Λ) pour une série d'hypernoyaux à couches fermées, allant des systèmes légers (${}^5_\Lambda\text{He}$, ${}^{17}_\Lambda\text{O}$) aux systèmes lourds (${}^{141}_\Lambda\text{Ce}$) couvrant ainsi une large gamme de masse.

Note : Pour cette validation, nous comparons directement les énergies de particules indépendantes (ε_Λ) plutôt que les énergies de séparation (B_Λ), afin de tester directement le potentiel moyen généré par le code sans inclure les effets de réarrangement du cœur qui interviennent dans le calcul des énergies totales.

Le Tableau 4.1 présente la comparaison entre nos résultats (colonne « notre code ») et ceux issus d'un code sphérique de référence [52, 53], pour les trois fonctionnelles : DF-NSC89, DF-NSC97a et DF-NSC97f, ainsi qu'aux données expérimentales disponibles.

TABLE 4.1 – Énergies des particules individuelles ε_Λ des hypernoyaux à un seul Λ , légers à lourds, obtenues à partir de nos travaux et du code sphérique décrit dans les références [52, 53] pour les différentes fonctionnelles : DF-NSC89+EmpC, DF-NSC97a+EmpC et DF-NSC97f+EmpC. Les données expérimentales sont également fournies à titre de comparaison [81–83]. Les unités sont données en MeV.

Hypernoyau	Λ	Exp.	notre code sphérique	du code sphérique
${}^5_\Lambda\text{He}$	1s	-3.12	-4.993/ - 8.019/ - 5.129	-5.30/ - 8.327/ - 5.883
${}^9_\Lambda\text{Be}$	1s	-9.11	-8.440/ - 12.581/ - 8.889	-8.797/ - 12.915/ - 9.782
${}^{13}_\Lambda\text{C}$	1s	-11.69	-11.066/ - 16.241/ - 11.716	-11.574/ - 16.739/ - 12.813
	1p	-0.7	-1.276/ - 4.489/ - 2.151	-0.86/ - 3.437/ - 0.994
${}^{17}_\Lambda\text{O}$	1s	-12.5	-12.793/ - 18.013/ - 13.810	-13.128/ - 18.273/ - 14.642
	1p	-2.5	-3.438/ - 7.247/ - 4.653	-2.872/ - 6.096/ - 3.239
${}^{29}_\Lambda\text{Si}$	1s	-16.6	-16.141/ - 22.335/ - 17.714	-16.401/ - 22.469/ - 18.37
	1p	-7.0	-8.952/ - 13.079/ - 9.713	-7.209/ - 11.722/ - 8.003
${}^{41}_\Lambda\text{Ca}$	1s	-20.0	-17.797/ - 24.045/ - 19.768	-17.951/ - 24.110/ - 20.201
	1p	-12.0	-10.689/ - 16.022/ - 12.819	-9.884/ - 14.700/ - 11.063
	1d	-1.0	-2.736/ - 7.045/ - 4.705	-1.452/ - 4.839/ - 1.642
${}^{50}_\Lambda\text{Zr}$	1s	-22.5	-21.240/ - 27.973/ - 23.994	-21.242/ - 27.872/ - 24.090
	1p	-16.0	-16.343/ - 22.555/ - 19.195	-15.574/ - 21.379/ - 17.758
	1d	-9.0	-10.434/ - 16.077/ - 13.243	-8.972/ - 13.901/ - 10.030
	1f	-2.0	-3.816/ - 6.078/ - 3.455	-
	2s	-	-8.711/ - 13.835/ - 10.621	-10.352/ - 11.430/ - 7.006
${}^{141}_\Lambda\text{Ce}$	1s	-24.0	-22.505/ - 29.147/ - 25.581	-22.308/ - 28.656/ - 25.387
	1p	-21.0	-18.685/ - 25.026/ - 21.837	-17.992/ - 23.922/ - 20.417
	1d	-14.0	-13.964/ - 19.940/ - 17.095	-12.710/ - 18.102/ - 14.326
	1f	-7.0	-8.516/ - 14.066/ - 11.545	-
	1g	-1.0	-5.798/ - 11.074/ - 8.350	-
	2s	-	-11.927/ - 17.763/ - 14.718	-10.352/ - 15.435/ - 11.366

Analyse de la précision numérique : La comparaison des colonnes 4 et 5 du Tableau 4.1 montre un accord satisfaisant entre notre approche 3D [57] et le code sphérique 1D. Les écarts observés (par exemple pour l'état $1s$ du ${}_{\Lambda}^{17}\text{O}$: -12.793 MeV contre -13.128 MeV avec NSC89) restent modestes et sont inhérents aux différences de traitement du continuum et de discrétisation entre une boîte cartésienne et une méthode radiale. Cela valide la robustesse de l'algorithme EV8- Λ .

Analyse physique des fonctionnelles : En confrontant ces résultats aux données expérimentales (colonne 3), plusieurs tendances se dégagent :

- **DF–NSC97a (valeurs centrales) :** Cette fonctionnelle se révèle systématiquement trop attractive. Par exemple, pour le ${}_{\Lambda}^9\text{Be}$, elle prédit une énergie de -12.581 MeV, bien plus liée que la valeur expérimentale de -9.11 MeV. Cette tendance à la surestimation du liage se confirme sur toute la table, jusqu'au ${}_{\Lambda}^{141}\text{Ce}$.
- **DF–NSC89 et DF–NSC97f :** Ces paramétrisations offrent un meilleur accord avec l'expérience. Pour le ${}_{\Lambda}^{13}\text{C}$ ($1s$), la fonctionnelle NSC89 prédit -11.066 MeV, très proche de la valeur expérimentale de -11.69 MeV.
- **Structure en couches :** Les résultats reproduisent la structure régulière des niveaux ($1s, 1p, 1d, \dots$) caractéristique d'un puits de potentiel sans terme spin-orbite majeur, le Λ se comportant de manière analogue à une particule dans un oscillateur harmonique.

Ce constat est cohérent avec l'analyse publiée (voir [57]). Cette étude comparative valide notre outil numérique pour l'étude des systèmes légers et justifie l'utilisation préférentielle des fonctionnelles NSC89 et NSC97f pour la suite de nos travaux.

4.4 Surfaces d'énergie et déformation du cœur ${}^8\text{Be}$

Avant d'introduire les degrés de liberté étranges, il est impératif de caractériser précisément l'état fondamental du cœur nucléaire. Nos calculs HF avec l'interaction SLy4 confirment la nature exotique du ${}^8\text{Be}$, qui se distingue radicalement de ses voisins isotopiques.

Analyse des courbes d'énergie potentielle

Nous avons exploré la PES du système en imposant une contrainte sur le moment quadrupolaire axial Q_{20} . La courbe d'énergie obtenue (voir Figure 4.5.1) révèle la topologie suivante :

i. Absence de minimum sphérique : Contrairement aux noyaux magiques, la configuration sphérique ($Q = 0$) correspond ici à un maximum d'énergie (point instable), illustrant la tendance naturelle du système à briser la symétrie sphérique.

ii. Un minimum prolate prononcé : La courbe plonge vers un puits de potentiel très profond situé dans la région des déformations allongées. Nos calculs situent ce minimum autour d'une déformation $\beta \simeq 0.55$.

iii. Rigidité de la déformation : La pente abrupte des courbes d'énergie autour de ce minimum indique que le cœur de ${}^8\text{Be}$ est "rigide" : il est fortement stabilisé dans cette forme allongée.

Structure en amas (Clustering) α - α

Cette déformation exceptionnelle n'est pas fortuite. L'analyse des distributions de densité de matière (protons et neutrons) au minimum de l'énergie met en évidence une structure en haltère, caractéristique d'un système à deux centres. Géométriquement, cela correspond à la formation de deux clusters alpha (${}^4\text{He}$) en interaction, séparés par une distance d'équilibre qui minimise l'énergie totale. Le ${}^8\text{Be}$ peut ainsi être décrit comme un dimère α - α . Cette configuration contraste fortement avec les isotopes plus lourds comme le ${}^{12}\text{Be}$ ($N = 8$), où la fermeture de couche favorise un retour vers la sphéricité. Le ${}^8\text{Be}$ constitue donc l'archétype du noyau léger dominé par les corrélations d'amas, offrant un substrat idéal ("laboratoire") pour tester l'effet de polarisation de l'hypéron Λ .

4.5 L'effet de rétrécissement (*shrinkage effect*)

L'un des résultats majeurs de ce travail est la mise en évidence quantitative de l'effet de rétrécissement du cœur nucléaire induit par la présence des hyperons Λ [57, 84, 85].

L'analyse des courbes d'énergie de déformation pour les systèmes hypernucléaires ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$ (cf. Fig. 4.5.1) révèle que la topologie globale de la surface d'énergie est conservée : le minimum d'énergie correspond toujours à une structure allongée. Toutefois, nous observons un déplacement systématique de ce minimum vers des valeurs de déformation plus faibles.

Comme le résume le Tableau 4.2, l'ajout successif d'hyperons Λ réduit progressivement le paramètre de déformation quadrupolaire β_2 à l'équilibre [57] :

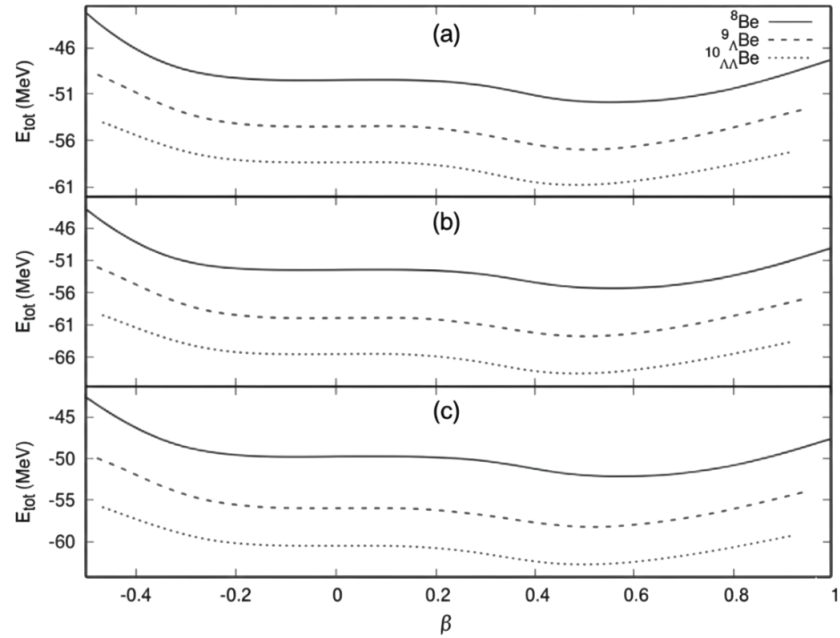


FIGURE 4.5.1 – Courbes d'énergie de déformation pour les hypernoyaux ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, obtenues à l'aide des fonctionnels : (a) DF-NSC89+EmpC, (b) DF-NSC97a+EmpC et (c) DF-NSC97f+EmpC. La courbe d'énergie du noyau cœur ${}^8\text{Be}$ est également représentée dans chaque panneau.

TABLE 4.2 – Évolution du paramètre de déformation d'équilibre β_2 en fonction du contenu en étranger.

Système	Configuration	β_2 (Équilibre)	Variation / Cœur
${}^8\text{Be}$	Cœur nu (0Λ)	0.558	-
${}^9_{\Lambda}\text{Be}$	1Λ (orbitale s)	0.556	$\Delta\beta \approx -0.002$
${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$	2Λ (orbitale s)	0.552	$\Delta\beta \approx -0.006$

Interprétation physique

Cette réduction de la déformation, bien que subtile en amplitude, traduit un changement structurel fondamental dû à la nature de l'interaction de l'hypéron Λ avec le cœur nucléaire :

i. Occupation de l'orbitale s : Le ou les hyperons Λ occupent l'état fondamental de plus basse énergie, l'orbitale $s_{1/2}$ ($[000]1/2$).

ii. Absence de blocage de Pauli : En tant que baryon distinct (disposant d'un nombre quantique d'étrangeté $S = -1$), le Λ n'est pas soumis au principe d'exclusion de Pauli vis-à-vis des nucléons (neutrons et protons). Il peut donc pénétrer profondément à l'intérieur du noyau, se localisant au centre de densité du système.

iii. Effet de "Colle" (Glue-like role) : La présence du Λ ajoute une interaction attractive au centre du système. Cette attraction supplémentaire tend à rapprocher les deux clusters α qui constituent le cœur du ${}^8\text{Be}$.

En conséquence, le noyau devient plus compact et son élongation diminue. C'est ce phénomène de contraction spatiale et de réduction de la déformation allongée que l'on nomme l'effet de rétrécissement ou shrinkage effect.

4.6 Structure microscopique : Niveaux d'énergie individuels

L'analyse des niveaux d'énergie individuels (single-particle levels), présentée aux figures 4.6.1, 4.6.2, 4.6.3 et 4.6.4 [57], permet de relier microscopiquement les propriétés globales des hypernoyaux à l'évolution de leur structure en couches sous l'effet conjoint de la déformation et de l'injection d'étrangeté.

Cette section examine l'évolution des spectres neutroniques et protoniques pour les systèmes ${}^8\text{Be}$, ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, , offrant un cadre cohérent pour analyser les effets de polarisation du cœur induits par les hyperons.

4.6.1 Spectre des nucléons

Le noyau de référence ${}^8\text{Be}$: Dans le système cœur, les figures 4.6.1 et 4.6.2 montrent clairement que la déformation quadrupolaire β lève la dégénérescence des niveaux sphériques, conduisant aux dédoublements caractéristiques des diagrammes de Nilsson. Les orbitales situées à proximité de la surface de Fermi, telles que $[110]1/2$ et $[101]3/2$, présentent une dépendance marquée vis-à-vis de β , tant pour les neutrons que pour

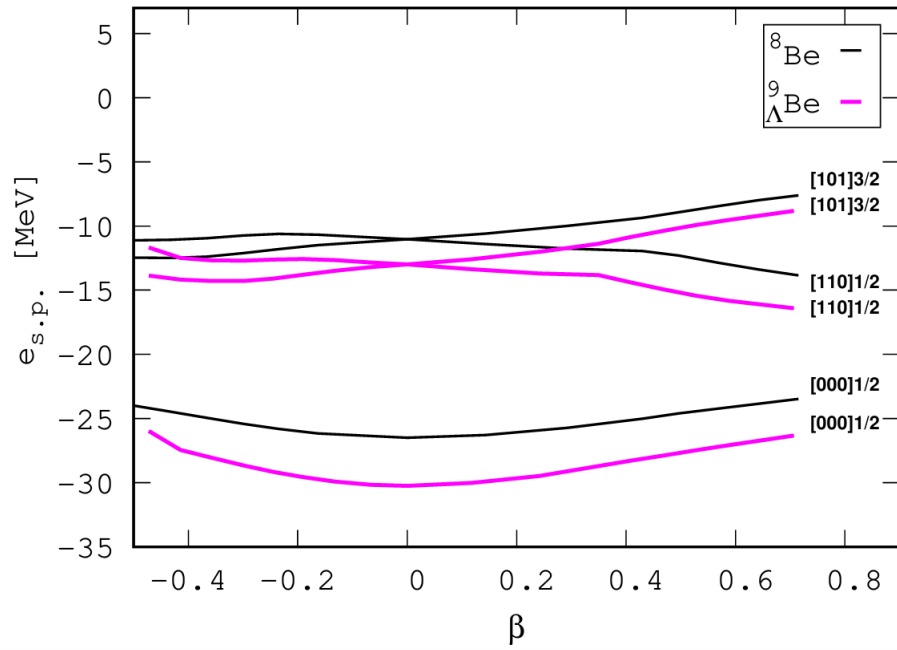


FIGURE 4.6.1 – Niveaux d'énergie individuels de neutrons en fonction du paramètre de déformation β dans les systèmes ${}^8\text{Be}$ et ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$.

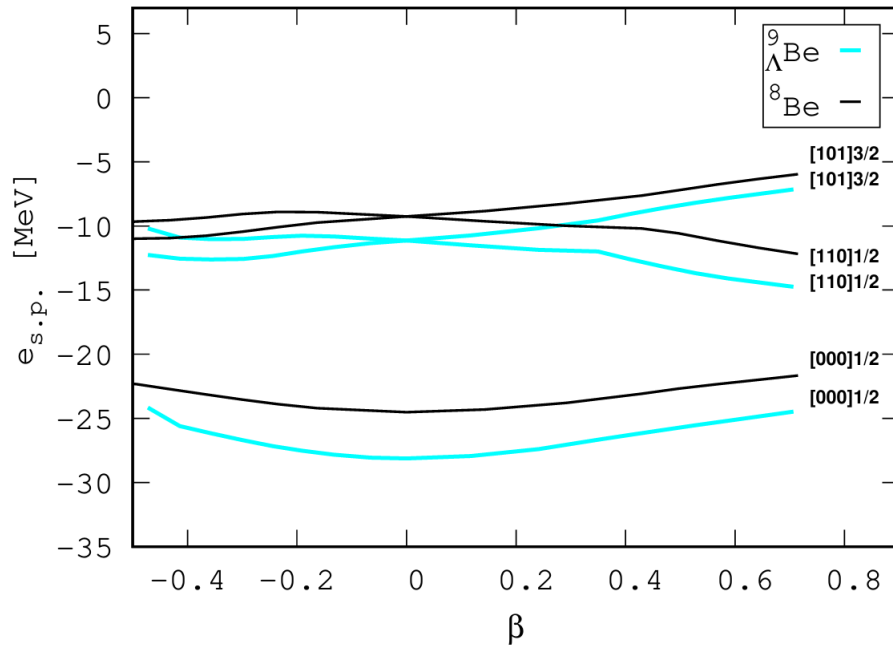


FIGURE 4.6.2 – Niveaux d'énergie individuels de protons en fonction du paramètre de déformation β dans les systèmes ${}^8\text{Be}$ et ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$.

les protons. Cette sensibilité confirme le rôle déterminant de la déformation dans la structuration des spectres individuels.

L'impact de l'étrangeté dans ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$: L'introduction d'un hypéron Λ modifie les spectres nucléoniques de manière cohérente :

Pour les neutrons (Fig. 4.6.1) : On observe un abaissement global des niveaux d'énergie individuels par rapport au cœur nu (courbes noires). Cet effet est particulièrement prononcé pour l'orbitale $[000]1/2$, fortement localisée au centre du noyau. Cela résulte de la polarisation du potentiel moyen induite par le Λ , qui accroît la densité centrale et renforce l'attraction ressentie par les nucléons via le terme de réarrangement du champ moyen (contribution $\partial E_{N\Lambda}/\partial\rho_N$).

Pour les protons (Fig. 4.6.2) : Une tendance similaire est observée avec un déplacement des niveaux vers des énergies plus négatives. Bien que l'amplitude de l'effet puisse différer légèrement de celle des neutrons (du fait des différences de recouvrement spatial et de l'absence de charge du Λ), l'ordre relatif des niveaux et leur évolution en β restent inchangés.

Amplification dans le système double ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$ Lorsque deux hypérons sont ajoutés, l'effet observé précédemment est amplifié. Les figures 4.6.3 et 4.6.4 indiquent que les puits de potentiel neutroniques et protoniques sont davantage approfondis. Là encore, les orbitales de type $[000]1/2$ sont les plus affectées, confirmant la corrélation entre l'effet des hypérons et la localisation spatiale des états (onde s).

Néanmoins, la topologie des courbes reste qualitativement similaire à celle du ${}^8\text{Be}$. L'ajout d'un ou de deux hypérons agit donc comme une perturbation « douce » du champ moyen : il renforce le liage global sans altérer fondamentalement la structure en couches ni le mécanisme microscopique de la déformation.

4.6.2 Spectre des hypérons

En parallèle, les spectres individuels hypéroniques se distinguent par leur simplicité structurale. En raison de l'absence de terme spin-orbite significatif, le Λ présente une structure simple rappelant l'oscillateur harmonique. Le gap entre les couches $1s$ et $1p$ est marqué, confirmant une structure en couches bien définie.

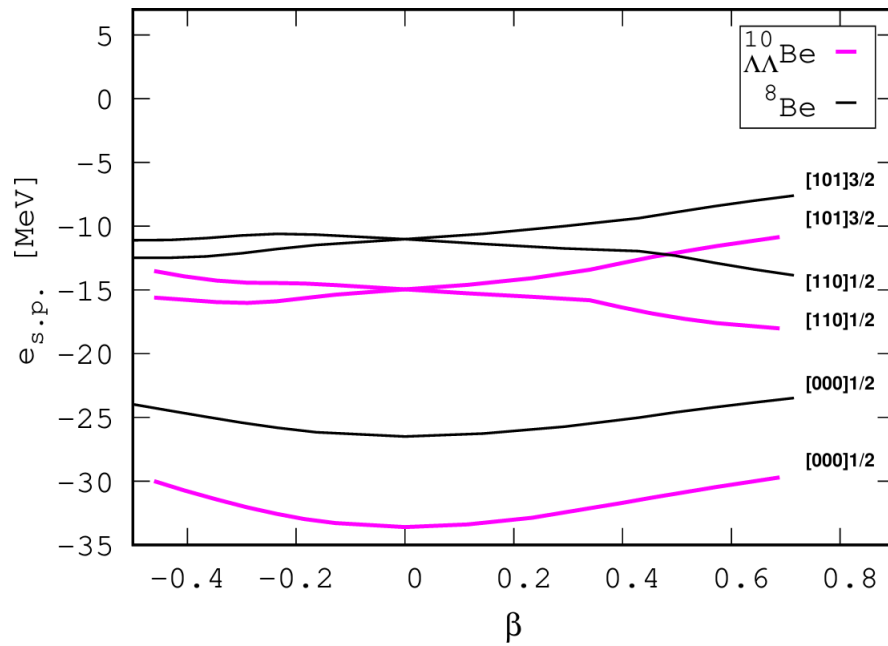


FIGURE 4.6.3 – Niveaux d'énergie individuels de neutrons en fonction du paramètre de déformation β dans les systèmes ${}^8\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$.

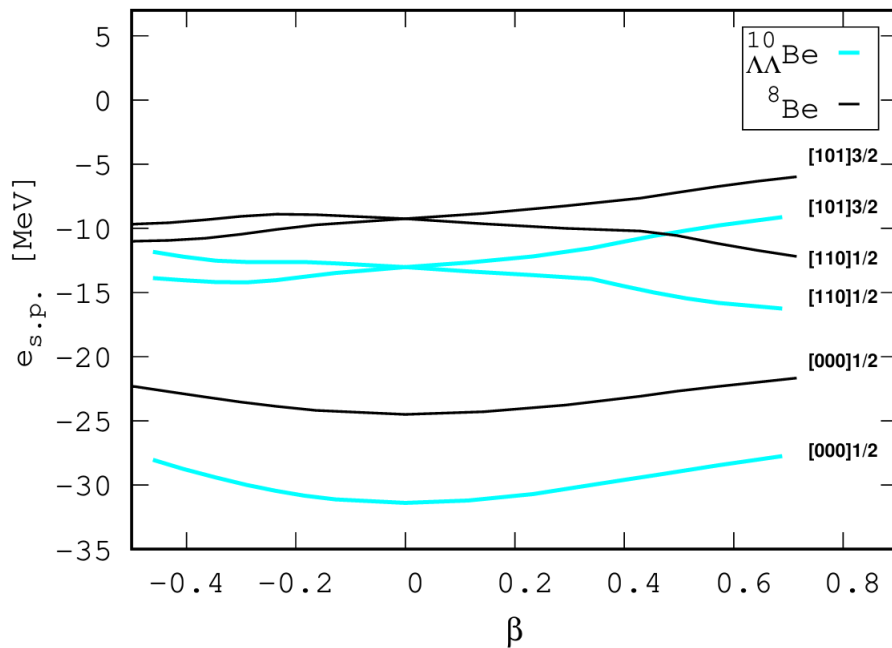


FIGURE 4.6.4 – Niveaux d'énergie individuels de protons en fonction du paramètre de déformation β dans les systèmes ${}^8\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$.

4.7 Distributions de densité et clusterisation α

L'effet de « colle » (*glue-like role*) des hypérons Λ se manifeste de façon directe et complémentaire dans les profils radiaux/axiaux de densité (Fig. 4.7.1) et dans les cartes de contour de la densité totale dans le plan (r, z) (Fig. 4.7.2). Cette section détaille ces observations en distinguant l'impact qualitatif sur la structure en clusters de la quantification du phénomène via les rayons quadratiques moyens [57].

4.7.1 Densité spatiale et visualisation du « shrinkage »

Les profils de densité présentés en Fig. 4.7.1 affichent, à gauche, la densité totale $\rho(r, z = 0)$ en fonction de la coordonnée radiale r et, à droite, la densité $\rho(r = 0, z)$ le long de l'axe de symétrie z .

Trois systèmes sont comparés : le noyau cœur ${}^8\text{Be}$ (référence), l'hypernoyau ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ (un Λ) et l'hypernoyau ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$ (deux Λ). L'analyse comparative met en évidence trois effets majeurs :

i. Augmentation de la densité centrale : L'insertion d'un hypéron Λ entraîne un accroissement notable de la densité au centre géométrique du système ($r \approx 0, z \approx 0$). Cet effet est amplifié par l'ajout d'un second Λ . Cette augmentation, variant de quelques pourcents à plusieurs dizaines de pourcents selon le système, témoigne de l'attraction centrale supplémentaire exercée par l'interaction ΛN .

ii. Compaction des profils : Les pentes des distributions radiales et axiales deviennent plus raides en présence d'hypérons. La « queue » de distribution se réduit, signifiant que la masse nucléaire se concentre davantage vers l'intérieur, illustrant une réduction de la taille effective du système.

iii. Comblement de la région inter-clusters : Pour le ${}^8\text{Be}$, le profil axial révèle une structure bicentrique marquée (signature des deux clusters α). Dans le cas du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, on observe une remontée significative de la densité dans la zone centrale séparant les deux lobes. La profondeur du « creux » inter-amas diminue, indiquant une perte de netteté de la structure clusterisée.

Interprétation microscopique : Ces modifications résultent directement des propriétés quantiques du Λ . N'étant pas soumis au principe d'exclusion de Pauli vis-à-vis des nucléons, l'hypéron occupe l'orbitale s la plus profonde ($[[000]1/2]$), localisant une densité de matière supplémentaire au centre du noyau. Par le couplage auto-cohérent, cette présence induit un réarrangement attractif des nucléons vers le centre, provoquant la contraction globale du système, phénomène connu sous le nom de shrinkage.

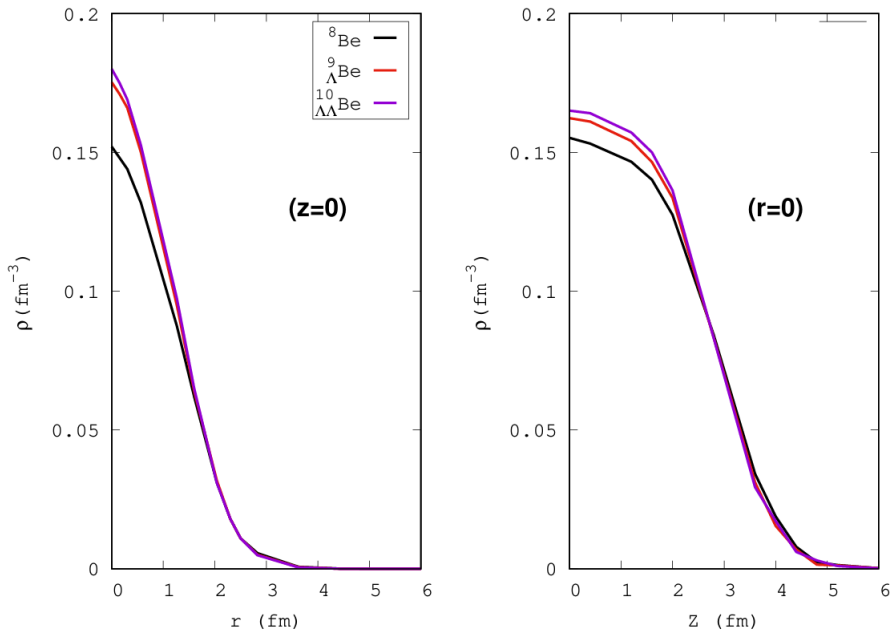


FIGURE 4.7.1 – Profils de densité totale correspondant au minimum d'énergie de l'état fondamental ($\beta \simeq 0.55$) pour ${}^8\text{Be}$, ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, représentés en fonction de r (panneaux de gauche) et de z (panneaux de droite), l'axe z correspondant à l'axe de symétrie.

4.7.2 Cartes de densité dans le plan (r, z)

Les cartes de contours présentées en Figure 4.7.2 offrent une confirmation topologique des effets discutés précédemment :

${}^8\text{Be}$: La carte révèle clairement deux lobes distincts (structure α - α) séparés le long de l'axe z par une région de moindre densité, caractéristique d'un noyau très déformé et clusterisé.

${}^9_{\Lambda}\text{Be}$: L'ajout du Λ tend à rapprocher les deux lobes et à « remplir » le col central. La silhouette globale devient moins allongée.

${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$: L'effet de sphérisation est manifeste. La composante centrale devient prédominante et la séparation entre les clusters s'estompe considérablement, conférant au système une forme beaucoup plus compacte.

En somme, ces cartes illustrent le rôle stabilisateur des Λ qui agissent comme un ciment entre les clusters α , réduisant l'amplitude des fluctuations de densité et favorisant une transition vers une géométrie plus sphérique.

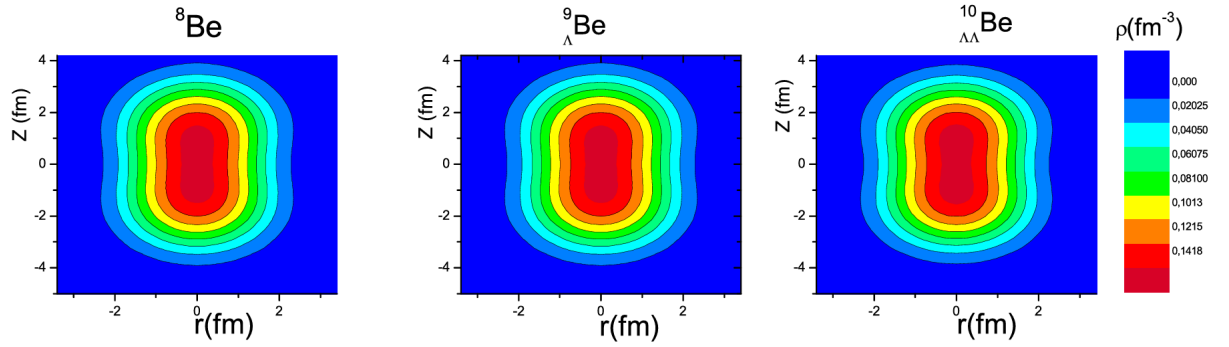


FIGURE 4.7.2 – Cartes de contours de la distribution de densité totale dans le plan (r, z) pour ${}^8\text{Be}$, ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, calculées à la déformation de l'état fondamental ($\beta \simeq 0.55$). L'axe z correspond à l'axe de symétrie.

4.7.3 Quantification du rétrécissement (Rayons RMS)

La contraction du système est quantifiée par le calcul des rayons quadratiques moyens massiques (R_{rms}) aux déformations d'équilibre. Les valeurs obtenues sont reportées ci-dessous :

Noyau	Rayon R_{rms} (fm)
${}^8\text{Be}$	2.5364
${}^9_{\Lambda}\text{Be}$	2.4344
${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$	2.3642

L'impact des hyperons sur la taille du noyau s'exprime par les variations relatives ΔR :

$$\Delta R_{8 \rightarrow 9} = R({}^8\text{Be}) - R({}^9_{\Lambda}\text{Be}) = 0.1020 \text{ fm} \quad (\approx 4.0\% \text{ de réduction}),$$

$$\Delta R_{9 \rightarrow 10} = R({}^9_{\Lambda}\text{Be}) - R({}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}) = 0.0702 \text{ fm} \quad (\approx 2.9\% \text{ de réduction}),$$

$$\Delta R_{8 \rightarrow 10} = R({}^8\text{Be}) - R({}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}) = 0.1722 \text{ fm} \quad (\approx 6.8\% \text{ de réduction}).$$

Ces résultats confirment quantitativement le rétrécissement est non négligeable [57]. Si l'ajout du premier Λ induit une contraction majeure (4%), l'effet du second, bien que toujours attractif, est légèrement atténué (2.9%), suggérant un début de saturation de la densité centrale.

4.7.4 Conséquences physiques et discussion

La synthèse des observations (profils, cartes et rayons) permet de dégager plusieurs conséquences structurelles majeures :

i. Réduction de la clusterisation : En comblant le vide central et en rapprochant les amas α , les hypérons atténuent l'identité individuelle des clusters. Cela stabilise la configuration nucléaire contre la scission et modifie la dynamique interne du noyau.

ii. Impact sur la spectroscopie rotationnelle : La contraction géométrique entraîne une réduction des moments d'inertie, ce qui devrait se traduire par une modification de l'espacement des niveaux dans les bandes rotationnelles. De plus, les PES en fonction de la déformation β s'en trouvent adoucies, en accord avec l'analyse des niveaux à un corps (Section 4.7).

iii. Additivité et saturation : L'effet attractif des Λ est additif mais non linéaire. La réduction de l'efficacité du second Λ indique une tendance à la saturation de l'effet de collage lorsque la densité centrale devient élevée.

Ces résultats s'inscrivent en parfaite cohérence avec les prédictions théoriques antérieures, tant dans les approches en champ moyen relativiste ou non-relativiste [86] que dans les modèles de clusters [87]. Tous s'accordent sur le fait que la polarisation du cœur nucléaire par les hypérons conduit à un système plus lié, plus compact et thermodynamiquement plus stable.

4.8 Énergies de liaison et comparaison expérimentale

La validation finale de notre approche repose sur la confrontation directe des énergies de liaison calculées avec les données expérimentales disponibles. Nous présentons ici les résultats numériques obtenus pour les différentes fonctionnelles $N\Lambda$ couplées au cœur SLy4, en mettant l'accent sur l'impact de la déformation et l'analyse de l'interaction $\Lambda\Lambda$ (Tab. 4.3).

4.8.1 Définitions et conventions

Nous adoptons les définitions usuelles pour l'énergie de liaison d'un ou deux hypérons :

$$B_{\Lambda}(A+1) = E(A) - E_{\Lambda}(A+1), \quad (4.8.1)$$

$$B_{\Lambda\Lambda}(A+2) = E(A) - E_{\Lambda\Lambda}(A+2), \quad (4.8.2)$$

où E représente l'énergie totale du système. Avec ces conventions, B_{Λ} et $B_{\Lambda\Lambda}$ sont positifs pour un système lié.

TABLE 4.3 – Valeurs des énergies de liaison $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$, ainsi que des énergies de liaison à un et deux hypérons Λ (B_{Λ} et $B_{\Lambda\Lambda}$) pour ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, calculées à l’aide des fonctionnelles DF–NSC89+EmpC, DF–NSC97a+EmpC et DF–NSC97f+EmpC. Les données expérimentales disponibles [88, 89] sont reportées dans la dernière colonne.

Quantité (MeV)	Cas sphérique	Cas déformé	Exp.
$B_{\Lambda}({}^9_{\Lambda}\text{Be})$	6.432/10.737/7.983	6.567/10.495/8.066	6.71 ± 0.04 [88]
$B_{\Lambda\Lambda}({}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be})$	9.816/20.135/13.314	11.602/20.493/13,697	11.77 ± 0.13 [89]
$\Delta B_{\Lambda\Lambda}$	-1.782/ - 1.338/ - 2.652	-1.532/ - 1.264/ - 2.438	-1.65 ± 0.15 [89]

L’énergie de liaison d’interaction $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$, qui mesure le gain (ou la perte) de liaison dû à la présence simultanée des deux hypérons, est définie par :

$$\Delta B_{\Lambda\Lambda}(A + 2) = B_{\Lambda\Lambda}(A + 2) - 2 B_{\Lambda}(A + 1). \quad (4.8.3)$$

La quantité $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$ mesure l’effet de liaison additionnel associé à la présence simultanée de deux hypérons Λ liés au même cœur nucléaire. Dans cette convention, $\Delta B_{\Lambda\Lambda} > 0$ indiquerait un gain de liaison supplémentaire, souvent interprété comme la manifestation d’une interaction $\Lambda\Lambda$ effective attractive. À l’inverse, $\Delta B_{\Lambda\Lambda} < 0$ signifie que la liaison du système à deux Λ est inférieure à la somme des liaisons individuelles, traduisant l’absence d’un gain de liaison additionnel net ou la réduction du gain (effet effective répulsif).

4.8.2 Énergie de liaison simple B_{Λ}

Les calculs pour le ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ révèlent une forte sensibilité au choix de la fonctionnelle $N\Lambda$ employée [57]. La comparaison avec la valeur expérimentale $B_{\Lambda}^{\text{exp}} = 6.71 \pm 0.04$ MeV donne :

DF-NSC97a + SLy4 : $B_{\Lambda} \approx 10.5$ MeV. Cette fonctionnelle surestime massivement l’attraction (surcharge d’environ +4 MeV).

DF-NSC89 + SLy4 : $B_{\Lambda} \approx 6.57$ MeV (en calcul déformé).

La fonctionnelle DF-NSC89 offre un accord remarquable avec l’expérience (écart ≈ 0.14 MeV), reproduisant l’énergie de liaison du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ à 2% près. C’est donc la paramétrisation la plus fiable pour ce système.

4.8.3 Énergie de liaison double $B_{\Lambda\Lambda}$ et interaction $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$

Pour le système doublement étrange ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, nous comparons nos résultats (avec DF-NSC89 et déformation) à la donnée expérimentale $B_{\Lambda\Lambda}^{\text{exp}} \simeq 11.77 \pm 0.13$ MeV.

Résultats numériques (DF-NSC89) : Calculé : $B_{\Lambda\Lambda} \simeq 11.60$ MeV.

Expérience : $B_{\Lambda\Lambda}^{\text{exp}} \simeq 11.77 \pm 0.13$ MeV.

En appliquant la définition (4.8.3) on trouve pour DF-NSC89 :

$$\Delta B_{\Lambda\Lambda}^{(\text{NSC89})} = B_{\Lambda\Lambda} - 2B_{\Lambda} \approx 11.60 - 2 \times 6.57 = -1.54 \text{ MeV},$$

valeur à rapprocher de la valeur expérimentale calculée selon la même convention :

$$\Delta B_{\Lambda\Lambda}^{\text{exp}} = 11.77 - 2 \times 6.71 = -1.65 \pm 0.15 \text{ MeV}.$$

Les écarts observés pour les trois fonctionnelles considérées (cas déformé) sont par exemple :

DF-NSC89 : $\Delta B_{\Lambda\Lambda} \approx -1.53$ MeV (écart absolu ≈ 0.12 MeV, soit $\sim 7\%$ par rapport à $|\Delta B_{\Lambda\Lambda}^{\text{exp}}|$).

DF-NSC97a : $\Delta B_{\Lambda\Lambda} \approx -1.26$ MeV (écart ≈ 0.39 MeV, $\sim 23\%$).

DF-NSC97f : $\Delta B_{\Lambda\Lambda} \approx -2.44$ MeV (écart ≈ 0.79 MeV, $\sim 48\%$).

Sur la base de ces chiffres, B_{Λ} , $B_{\Lambda\Lambda}$ et $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$ mettent en évidence des différences sensibles selon la fonctionnelle $N\Lambda$ employée. L'accord obtenu avec DF-NSC89 est excellent, avec un écart absolu de seulement 0.12 MeV par rapport à la valeur expérimentale reconstruite. dans la série étudiée et conduit à une interaction effective légèrement attractive; DF-NSC97a+EmpC tend à sur-lier individuellement le Λ (surestimation de B_{Λ}) et conduit à une interaction effective relativement plus attractive, tandis que DF-NSC97f+EmpC produit un $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$ trop négatif (sur-attraction effective entre les Λ dans notre schéma).

4.8.4 Discussion : Rôle de la déformation et physique de l'interaction

L'analyse globale des résultats (Tableau 4.3) permet de dégager deux conclusions physiques majeures :

i. L'importance cruciale de la déformation : La comparaison entre nos calculs sphériques et déformés montre que la prise en compte de la déformation auto-cohérente augmente systématiquement les énergies de liaison de 0.3 à 0.4 MeV. Ce gain d'énergie, bien que modéré, est indispensable pour atteindre la précision de l'ordre de 100 keV requise pour reproduire les données expérimentales.

ii. Nature de l'interaction effective : La valeur négative de $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$ (tant théo-

rique qu'expérimentale dans ce noyau) suggère que, pour le ${}_{\Lambda\Lambda}^{10}\text{Be}$, le gain d'attraction entre les deux hypérons ne suffit pas à compenser le coût énergétique ou les effets de saturation du milieu.

Cependant, la capacité de la fonctionnelle DF-NSC89 à reproduire simultanément B_{Λ} et $B_{\Lambda\Lambda}$ confirme que cette paramétrisation capture correctement la physique du champ moyen hypernucléaire dans les noyaux légers et déformés, validant ainsi l'ensemble de notre approche théorique.

4.9 Conclusion

Les résultats présentés dans ce chapitre mettent en évidence de manière cohérente l'influence structurante des hypérons Λ dans les hypernoyaux légers ${}_{\Lambda}^9\text{Be}$ et ${}_{\Lambda\Lambda}^{10}\text{Be}$. L'introduction d'un ou de deux hypérons conserve la topologie globale des surfaces d'énergie potentielle du cœur ${}^8\text{Be}$, tout en induisant un déplacement systématique du minimum de déformation vers des valeurs plus faibles du paramètre β . Cette évolution constitue une signature directe de la contraction du cœur nucléaire [57].

L'analyse microscopique montre que cet effet de *shrinkage* résulte de l'occupation de l'orbitale s par le Λ , de l'absence de contrainte du principe d'exclusion de Pauli vis-à-vis des nucléons, et de la polarisation attractive du champ moyen associée aux termes d'interaction $N\Lambda$. Les spectres d'énergie individuels des neutrons et des protons présentent un approfondissement global en présence des hypérons, particulièrement marqué pour les orbitales fortement localisées au centre, sans modification qualitative de l'ordre des niveaux ni de leur dépendance à la déformation. Ceci indique que l'effet des hypérons agit comme une perturbation douce mais systématique du champ moyen nucléaire. Ces conclusions sont renforcées par l'étude des distributions de densité, qui montrent une augmentation de la densité centrale, un comblement progressif du creux inter-clusters et une diminution des rayons quadratiques moyens, traduisant une atténuation de la structure de clusterisation α - α du cœur ${}^8\text{Be}$. Les hypérons jouent ainsi un rôle stabilisateur en rendant le système plus compact et plus lié. La confrontation aux données expérimentales à travers les énergies de liaison B_{Λ} , $B_{\Lambda\Lambda}$ et la quantité $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$ montre que la combinaison DF-NSC89 + SLy4, associée à un traitement auto-cohérent de la déformation, fournit le meilleur accord global pour les systèmes étudiés. L'effet de la déformation, bien que modéré, améliore systématiquement les énergies de liaison de l'ordre de 0.3–0.4 MeV, soulignant l'importance d'une description réaliste de la forme nucléaire.

En conclusion, les hypernoyaux légers à base de Béryllium constituent un labora-

toire privilégié pour relier, dans un cadre de champ moyen auto-cohérent, les propriétés microscopiques induites par les hypérons aux observables globales de structure. Les résultats obtenus fournissent une base solide pour évaluer la portée prédictive de l'approche employée et pour envisager son extension à d'autres systèmes hypernucléaires légers.

Conclusion Générale

Cette thèse s'est attachée à l'étude théorique des propriétés statiques des hypernoyaux légers, en plaçant au cœur de l'analyse l'interaction complexe entre la déformation nucléaire axiale et les degrés de liberté étranges. Pour mener à bien cette exploration, nous avons développé et implémenté une extension originale du formalisme de la fonctionnelle de la densité, en adaptant le code de champ moyen EV8 (SHF + BCS) au secteur $S = -1$. La fiabilité de cette nouvelle version, baptisée EV8- Λ , a été rigoureusement établie par une validation croisée avec des codes sphériques de référence et les données expérimentales disponibles, confirmant ainsi la robustesse de notre approche théorique basée sur l'interaction nucléaire SLy4 couplée aux fonctionnelles hypéroniques.

L'application de ce formalisme aux systèmes spécifiques du béryllium, ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ et ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, a permis de caractériser finement l'impact structural de l'étrangeté. Nos résultats corroborent de manière quantitative le rôle de « ciment » (glue-like role) de l'hypéron Λ , qui se manifeste par une augmentation marquée de la densité centrale, une contraction globale du rayon nucléaire (shrinkage) et une atténuation de la structure en clusters α - α par comblement de la région inter-amas. Toutefois, malgré cette compression interne, la déformation allongée du cœur ${}^8\text{Be}$ démontre une remarquable stabilité géométrique. Il ressort de notre étude que la prise en compte explicite de cette déformation auto-cohérente est une condition indispensable pour reproduire quantitativement les énergies de liaison expérimentales, apportant un gain de précision décisif de l'ordre de plusieurs centaines de keV par rapport aux approximations sphériques usuelles.

Sur le plan énergétique, la confrontation systématique aux données expérimentales a permis de discriminer les performances des différentes paramétrisations de l'interaction effective. La fonctionnelle DF-NSC89+EmpC s'impose comme la description la plus cohérente pour reproduire simultanément les énergies de liaison simples (B_{Λ}) et doubles ($B_{\Lambda\Lambda}$) dans ces systèmes déformés, contrairement à la fonctionnelle DF-NSC97a qui tend à surestimer l'attraction. De plus, notre modèle capture avec succès la subtilité de l'énergie d'interaction $\Delta B_{\Lambda\Lambda}$ dans le ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$, dont la valeur négative s'ex-

plique physiquement par la compétition entre l'attraction $\Lambda\Lambda$ et le coût énergétique de réarrangement nécessaire à la contraction du cœur nucléaire.

En conclusion, les travaux présentés dans ce manuscrit soulignent l'importance cruciale de la déformation dans la modélisation des hypernoyaux et démontrent que les systèmes légers constituent des laboratoires privilégiés pour contraindre les interactions hypéron-nucléon et hypéron-hypéron. Les perspectives ouvertes par cette thèse sont vastes, invitant à l'exploration future de la rupture de symétrie axiale (triaxialité), à l'extension du formalisme vers les hypernoyaux lourds et multi-étranges, ainsi qu'à l'introduction de corrélations au-delà du champ moyen pour affiner la spectroscopie théorique de la matière baryonique étrange.

Bibliographie

- [1] E. RUTHERFORD : The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom. *Philos. Mag.*, 21:669–688, 1911.
- [2] R. MACHLEIDT : The meson theory of nuclear forces and nuclear structure. *Adv. Nucl. Phys.*, 19:189–376, 1989.
- [3] R. MACHLEIDT et D. R. ENTEM : Chiral effective field theory and nuclear forces. *Phys. Rep.*, 503:1–75, 2011.
- [4] C. F. von WEIZSÄCKER : Zur theorie der kernmassen. *Z. Phys.*, 96:431–458, 1935.
- [5] M. G. MAYER et J. H. D. JENSEN : *Elementary Theory of Nuclear Shell Structure*. Wiley, 1955.
- [6] S. C. PIEPER et R. B. WIRINGA : Quantum monte carlo calculations of light nuclei. *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.*, 51:53–90, 2001.
- [7] J. DECHARGÉ et D. GOGNY : Hartree-fock-bogolyubov calculations with the d1 effective interaction on spherical nuclei. *Phys. Rev. C*, 21:1568–1593, 1980.
- [8] J. MENG, H. TOKI, S.-G. ZHOU, S.-Q. ZHANG, W.-H. LONG et L.-S. GENG : Relativistic continuum hartree-bogoliubov theory for ground-state properties of exotic nuclei. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, 57:470–563, 2006.
- [9] S. G. NILSSON : Binding states of individual nucleons in strongly deformed nuclei. *Mat. Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk.*, 29:16, 1955.
- [10] D. VAUTHERIN et D. M. BRINK : Hartree-fock calculations with skyrme’s interaction. ii. axially deformed nuclei. *Phys. Rev. C*, 7:296–316, 1973.
- [11] D. R. HARTREE : The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. part i. theory and methods. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 24:89–110, 1928.
- [12] V. FOCK : Näherungsmethode zur lösung des quantenmechanischen mehrkörperproblems. *Z. Phys.*, 61:126–148, 1930.
- [13] J. C. SLATER : Note on hartree’s method. *Phys. Rev.*, 35:210, 1930.

- [14] D. VAUTHERIN et D. M. BRINK : Hartree-fock calculations with skyrme's interaction. i. spherical nuclei. *Phys. Rev. C*, 5:626–647, 1972.
- [15] T. HAMADA et I. D. JOHNSTON : A potential model representation of two-nucleon data. *Nucl. Phys.*, 34:382–403, 1962.
- [16] G. BREIT : The effect of retardation on the interaction of two electrons. *Rev. Mod. Phys.*, 34:766–777, 1962.
- [17] R. V. REID : Local phenomenological nucleon-nucleon potentials. *Ann. Phys.*, 50:411–448, 1968.
- [18] H. TAMURA : Spectroscopy of λ hypernuclei by the $(e, e'k^+)$ reaction. *Prog. Theor. Exp. Phys.*, 2012:02B012, 2012.
- [19] C. F. POWELL : Nuclear emulsions and meson physics (nobel lecture). *Rev. Mod. Phys.*, 22:352–364, 1950.
- [20] C. M. G. LATTES, H. MUIRHEAD, G. P. S. OCCHIALINI et C. F. POWELL : Processes involving charged mesons. *Nature*, 159:694–697, 1947.
- [21] P. E. HODGSON, E. GADIOLI et E. GADIOLI ERBA : *Introductory Nuclear Physics*. Oxford University Press, 1997.
- [22] M. DANYSZ et J. PNIEWSKI : Delayed disintegration of a heavy nuclear fragment and observations pointing to hypernuclei. *Philos. Mag.*, 44:348–350, 1953.
- [23] M. DANYSZ *et al.* : Observation of a double hyperfragment. *Phys. Rev. Lett.*, 11:29–31, 1963.
- [24] D. J. PROWSE : Double hyperfragment. *Phys. Rev. Lett.*, 17:782–785, 1966.
- [25] H. TAKAHASHI *et al.* : Observation of a ${}^6_{\Lambda\Lambda}\text{he}$ double hypernucleus (nagara event). *Phys. Rev. Lett.*, 87:212502, 2001.
- [26] E. HIYAMA et T. YAMADA : Few-body systems with strangeness. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, 63:339–395, 2009.
- [27] A. REUBER, K. HOLINDE et J. SPETH : Meson-exchange hyperon-nucleon interactions in free scattering and nuclear matter. *Nucl. Phys. A*, 570:543–577, 1994.
- [28] T. INOUE *et al.* : Two-baryon potentials and h-dibaryon from lattice qcd near the physical point. *Phys. Rev. Lett.*, 117:022002, 2016.
- [29] J. SCHAFFNER-BIELICH : Hypernuclear physics and compact stars. *Nucl. Phys. A*, 804:309–321, 2008.
- [30] O. HASHIMOTO et H. TAMURA : Spectroscopy of λ hypernuclei. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, 57:564–653, 2006.

- [31] I. N. FILIKHIN, A. GAL et V. M. SUSLOV : Three-body calculations of light λ hypernuclei. *Nucl. Phys. A*, 743:194–207, 2004.
- [32] E. HIYAMA, K. KAMIMURA, T. MOTOKA, T. YAMADA et Y. YAMAMOTO : Four-body cluster structure of ${}_{\Lambda\Lambda}^{10}\text{be}$ and ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{he}$. *Nucl. Phys. A*, 738:175–181, 2004.
- [33] M. SHOEB, A. MAMO et A. FESSAHATSION : Cluster models of light hypernuclei. *Pramana*, 68:6–12, 2007.
- [34] M. KAMIMURA : Transition-matrix method for three-body systems with gaussian expansion. *Phys. Rev. A*, 38:621–624, 1988.
- [35] J. CUGNON, A. LEJEUNE et H.-J. SCHULZE : Microscopic calculation of hyperon potentials in nuclear matter. *Phys. Rev. C*, 62:064308, 2000.
- [36] I. VIDAÑA, A. POLLS, A. RAMOS et H.-J. SCHULZE : Hyperon interactions in nuclear matter within the brueckner–hartree–fock approach. *Phys. Rev. C*, 64:044301, 2001.
- [37] S.-Y. DING, Z. QIAN, B.-Y. SUN et W.-H. LONG : Relativistic brueckner–hartree–fock calculations for hypernuclear systems. *Phys. Rev. C*, 106:054311, 2022.
- [38] Y. TANIMURA : Time-dependent density functional description of nuclear collective dynamics. *Phys. Rev. C*, 99:034324, 2019.
- [39] H.-F. LÜ : Study on nuclear structure within the relativistic mean-field theory. *Chin. Phys. Lett.*, 25:3613–3616, 2008.
- [40] F. MINTO et K. HAGINO : Hypernuclear structure in the particle-core coupling model. *Phys. Rev. C*, 85:024316, 2012.
- [41] M. RUFA, J. SCHAFFNER, J. MARUHN, H. STÖCKER, W. GREINER et P.-G. REINHARD : Hypernuclei in the relativistic mean-field theory. *Phys. Rev. C*, 42:2469–2479, 1990.
- [42] J. SCHAFFNER, C. GREINER et H. STÖCKER : Metastable exotic multistrange objects. *Phys. Rev. C*, 46:322–329, 1992.
- [43] J. MAREŠ et J. ŽOFKA : Hypernuclei in the relativistic mean-field theory. *Z. Phys. A*, 347:227–232, 1993.
- [44] E. N. E. VAN DALEN, G. COLUCCI et A. D. SEDRAKIAN : Equation of state of hypernuclear matter within relativistic hartree–fock theory. *Phys. Lett. B*, 734:383–387, 2014.
- [45] D. LONARDONI, S. GANDOLFI et F. PEDERIVA : Effects of three-body forces on hypernuclei. *Phys. Rev. C*, 87:041303, 2013.

- [46] D. LONARDONI, F. PEDERIVA et S. GANDOLFI : Accurate variational calculations of hypernuclei with realistic two- and three-body interactions. *Phys. Rev. C*, 89:014314, 2014.
- [47] D. LONARDONI, A. LOVATO, S. GANDOLFI et F. PEDERIVA : Hyperon puzzle : Hints from quantum monte carlo calculations. *Phys. Rev. Lett.*, 114:092301, 2015.
- [48] H.-J. SCHULZE, M. BALDO, U. LOMBARDO, J. CUGNON et A. LEJEUNE : Hyperon contributions to the equation of state of neutron star matter. *Phys. Lett. B*, 355:21–26, 1995.
- [49] H.-J. SCHULZE, M. BALDO, U. LOMBARDO, J. CUGNON et A. LEJEUNE : Hyperon-hyperon interactions and properties of neutron star matter. *Phys. Rev. C*, 57:704–718, 1998.
- [50] M. BALDO, G. F. BURGIO et H.-J. SCHULZE : Hyperon formation in neutron star matter. *Phys. Rev. C*, 61:055801, 2000.
- [51] H.-J. SCHULZE et T. RIJKEN : Hyperon potentials from chiral effective field theory interactions. *Phys. Rev. C*, 84:035801, 2011.
- [52] E. KHAN, J. MARGUERON, F. GULMINELLI et Ad. R. RADUTA : Thermal properties of nuclear matter with cluster correlations. *Phys. Rev. C*, 92:044313, 2015.
- [53] J. MARGUERON, E. KHAN et F. GULMINELLI : Equation of state for dense nucleonic matter from metamodeling. i. foundational aspects. *Phys. Rev. C*, 96:054317, 2017.
- [54] P. RING et P. SCHUCK : *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer, 1980.
- [55] J. MENG et S.-G. ZHOU : Nuclear mass and radius systematics : Mean-field and beyond. *J. Phys. G*, 42:093101, 2015.
- [56] N. HIYAMA, Y. YAMAMOTO et T. MOTOKA : Three-body structure of light λ hypernuclei based on baryon–baryon interactions in chiral effective field theory. *Phys. Rev. C*, 100:025202, 2019.
- [57] K. BOUTAMI et M. BELABBAS : Study of deformed light hypernuclei with a ^8Be core. *Indian J. Phys.*, 2025.
- [58] W. RYSENS, V. HELLEMANS, M. BENDER et P.-H. HEENEN : Solution of the skyrme hf+bcs equation on a 3d mesh. *Comput. Phys. Commun.*, 190:131–137, 2015.
- [59] P. BONCHE, H. FLOCARD et P.-H. HEENEN : Solution of the skyrme hf+bcs equation on a 3d mesh. *Comput. Phys. Commun.*, 171:49–62, 2005.

- [60] J.-F. BERGER : Approches de champ moyen et au-delà. In *École Internationale Joliot-Curie*, page 1, 1991.
- [61] G. F. BERTSCH : Time-dependent variational principle for nuclear dynamics. *Z. Phys. A*, 289:103–108, 1978.
- [62] W. RITZ : Über eine neue methode zur lösung gewisser variationsprobleme der mathematischen physik. *J. Reine Angew. Math.*, 135:1–82, 1909.
- [63] P. HOHENBERG et W. KOHN : Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136:B864–B871, 1964.
- [64] E. CHABANAT, P. BONCHE, P. HAENSEL, J. MEYER et R. SCHAEFFER : A skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities. *Nucl. Phys. A*, 627:710–746, 1997.
- [65] E. CHABANAT, P. BONCHE, P. HAENSEL, J. MEYER et R. SCHAEFFER : A skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities. part ii : Nuclei far from stabilities. *Nucl. Phys. A*, 635:231–256, 1998.
- [66] M. BEINER, H. FLOCARD, N. VAN GIAI et P. QUENTIN : Nuclear ground-state properties and self-consistent calculations with the skyrme interaction. i. spherical description. *Nucl. Phys. A*, 238:29–69, 1975.
- [67] N. VAN GIAI et H. SAGAWA : Spin-isospin and pairing properties of skyrme interactions. *Phys. Lett. B*, 106:379–382, 1981.
- [68] J. BARTEL, P. QUENTIN, M. BRACK, C. GUET et H.-B. HÅKANSSON : Towards a better parametrisation of skyrme-like effective forces : A critical study of the skm force. *Nucl. Phys. A*, 386:79–100, 1982.
- [69] X.-R. ZHOU, H.-J. SCHULZE, H. SAGAWA, C.-X. WU et E.-G. ZHAO : Hypernuclei in skyrme-hartree-fock approach. *Phys. Rev. C*, 76:034312, 2007.
- [70] M. T. WIN et K. HAGINO : Deformation of λ hypernuclei. *Phys. Rev. C*, 78:054311, 2008.
- [71] Y. ZHANG, H. SAGAWA, D. YOSHINO, K. HAGINO et J. MENG : Pairing correlations in neutron-rich nuclei near the drip line. *Prog. Theor. Phys.*, 120:129–140, 2008.
- [72] C. A. BERTULANI : *Nuclear Physics in a Nutshell*. Princeton University Press, 2007.
- [73] M. TANABASHI *et al.* : Review of particle physics. *Phys. Rev. D*, 98:030001, 2018.
- [74] T. A. RIJKEN, M. M. NAGELS et Y. YAMAMOTO : Baryon-baryon interactions : Nijmegen extended-soft-core models. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 185:14–71, 2010.

- [75] T. A. RIJKEN, V. G. J. STOKS et Y. YAMAMOTO : Soft-core hyperon–nucleon potentials. *Phys. Rev. C*, 59:21–40, 1999.
- [76] V. G. J. STOKS et T. A. RIJKEN : Soft-core baryon–baryon potentials for the complete baryon octet. *Phys. Rev. C*, 59:3009–3020, 1999.
- [77] J. K. AHN *et al.* : Double- λ hypernuclei observed in the e373 experiment. *Phys. Rev. C*, 88:014003, 2013.
- [78] N. GULERIA, S. K. DHIMAN et R. SHYAM : Relativistic mean-field study of hypernuclei. *Nucl. Phys. A*, 886:71–86, 2012.
- [79] D. J. ROWE : *Nuclear Collective Motion*. Methuen, 1970.
- [80] D. L. HILL et J. A. WHEELER : Nuclear constitution and the interpretation of fission phenomena. *Phys. Rev.*, 89:1102–1145, 1953.
- [81] H. BANDŌ, T. MOTOBA et J. ŽOFKA : Production, structure and decay of hypernuclei. *Int. J. Mod. Phys. A*, 5:4021–4075, 1990.
- [82] S. AJIMURA *et al.* : Spectroscopy of λ hypernuclei by the (π^+, k^+) reaction. *Nucl. Phys. A*, 585:173–186, 1995.
- [83] T. HASEGAWA *et al.* : Spectroscopy of λ hypernuclei by the (π^+, k^+) reaction. *Phys. Rev. C*, 53:1210–1219, 1996.
- [84] H. TAMURA *et al.* : Spin-dependent forces studied by γ -ray spectroscopy of hypernuclei. *Phys. Rev. Lett.*, 84:5963–5966, 2000.
- [85] T. HARADA et Y. HIRABAYASHI : Structure of light hypernuclei with λn interactions. *Nucl. Phys. A*, 759:143–170, 2005.
- [86] M. ISAKA, M. KIMURA, A. DOTÉ et A. OHNISHI : Structure of be hypernuclei within the antisymmetrized molecular dynamics model. *Phys. Rev. C*, 83:054304, 2011.
- [87] T. YAMADA : Cluster structure in light hypernuclei. *J. Phys. Conf. Ser.*, 668:012030, 2016.
- [88] D. H. DAVIS : 50 years of hypernuclear physics. *Nucl. Phys. A*, 754:3–13, 2005.
- [89] K. NAKAZAWA et H. TAKAHASHI : Experimental search for double- λ hypernuclei at kek-ps. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 185:335–343, 2010.