

**THESE**  
PRESENTEE A  
L'ECOLE NORMALE SUPEREURE KOUBA-ALGER

POUR OBTENIR LE GRADE DE  
**MAGISTER**  
OPTION: PHYSIQUE THEORIQUE

PAR

AIT NAMANE HOURIA

SUJET :

APPLICATION DE LA METHODE DE LA  
FONCTIONNELLE DE LA DENSITE A L'ETUDE DES  
NOYAUX PAIR-PAIRS

SOUTENUE LE : 26 Janvier 2006

DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN :

MM. C. E. KHIARI	(M. C. ENS, KOUBA)	Président
S. KESSAL	(prof. USTHB)	Examineur
M. BENTAIBA	(prof. USD, BLIDA)	Examineur
D. E. MEDJADI	(prof. ENS, KOUBA)	Rapporteur

# Table des matières

<b>1</b>	<b>INTRODUCTION</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>LA METHODE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITE</b>	<b>7</b>
2.1	L'APPROXIMATION DU CHAMP MOYEN ET CORRELATIONS D'APPARIEMENT . . . . .	7
2.1.1	L'approximation de Hartree-Fock . . . . .	8
2.1.2	Interaction effective: forces de Skyrme . . . . .	12
2.1.3	Corrélations d'appariement . . . . .	16
2.2	METHODE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITE . . . . .	20
2.2.1	Théorème de Hohenberg et Kohn et le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité . . . . .	21
2.2.2	Paramétrisation des densités . . . . .	23
2.2.3	Les profils de la densité proposés . . . . .	25
<b>3</b>	<b>APPROXIMATION DE THOMAS-FERMI ETENDUE (ETF)</b>	<b>28</b>
3.1	DEVELOPPEMENT DE WIGNER-KIRKWOOD (WK) . . . . .	29
3.1.1	Cas simple . . . . .	29
3.1.2	Cas d'un Hamiltonien comportant un terme spin-orbite . . . . .	37
3.1.3	Cas d'un Hamiltonien de Hartree-Fock dérivant d'une interaction effective de Skyrme . . . . .	39
3.2	LE PROBLEME DES POINTS TOURNANTS . . . . .	40
3.3	LES FONCTIONNELLES " $\tau$ " ET "J" . . . . .	41
<b>4</b>	<b>INCLUSION DES EFFETS DE COUCHES</b>	<b>43</b>
4.1	LA METHODE DE STRUTINSKY . . . . .	44
4.1.1	Calculs des corrections de couches . . . . .	46
4.1.2	Théorème de Strutinsky . . . . .	50
4.1.3	Relation entre la méthode (ETF) et le lissage numérique de Strutinsky . . . . .	53
4.2	EXPECTATION VALUE METHOD (EVM) . . . . .	54
4.3	CONCLUSION . . . . .	55

<b>5</b>	<b>DETAIL DE CALCUL</b>	<b>57</b>
5.1	CHOIX DE LA BASE . . . . .	57
5.2	SYMETRIE DU HAMILTONIEN DE HARTREE-FOCK . . . . .	58
5.3	PROJECTION DES ETATS INDIVIDUELS SUR LA BASE DE L'OSCILLATEUR . . . . .	61
<b>6</b>	<b>QUELQUES PRECISIONS SUR LES METHODES</b>	<b>67</b>
6.1	INTEGRATION NUMERIQUE . . . . .	67
6.2	STABILITE DE L'ENERGIE EN FONCTION DES PARAMETRES DE LA BASE . . . . .	68
6.2.1	Choix de la taille de la base $N_0$ . . . . .	68
6.2.2	Optimisation du paramètre $a_0$ de la base . . . . .	69
6.3	OPTIMISATION DES PARAMETRES DU CALCUL ETF . . . . .	71
6.3.1	Asymétrie de la surface . . . . .	71
6.3.2	Stabilité des paramètres ETF en fonction de la déformation . . . . .	72
6.4	CONTRIBUTION D'APPARIEMENT . . . . .	73
<b>7</b>	<b>RESULTATS ET DISCUSSIONS</b>	<b>81</b>
<b>8</b>	<b>CONCLUSION</b>	<b>96</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>98</b>
<b>A</b>	<b>CALCUL DES ELEMENTS DE MATRICE DE L'HAMILTONIEN DE SKYRME</b>	<b>102</b>
<b>B</b>	<b>EXPRESSIONS DES DENSITES DANS L'ESPACE DES COORDON- NEES</b>	<b>109</b>
<b>C</b>	<b>TRAITEMENT DE L'INTERACTION COULOMBIENNE</b>	<b>113</b>
<b>D</b>	<b>CORRECTION DU CENTRE DE MASSE</b>	<b>117</b>

## RESUME

L'approximation de Hartree-Fock (HF) a permis de reproduire, avec succès, les propriétés de l'état fondamental des noyaux dans toutes les régions de la table périodique. Cependant, la mise en œuvre de cette approximation nécessite un temps de calcul très important, ce qui a motivé le développement et l'utilisation d'autres approximations permettant d'obtenir des résultats acceptables en un temps raisonnable. La méthode de la fonctionnelle de la densité peut servir ce but.

Selon les théorèmes de Hohenberg et Kohn, l'énergie d'un système de fermions en interaction est une fonctionnelle uniquement de la densité locale. Il s'ensuit que la densité d'énergie cinétique s'exprime comme fonctionnelle de la densité locale et que cette fonctionnelle est universelle.

La méthode de Thomas-Fermi étendue (ETF) nous permet d'obtenir une forme approchée pour cette fonctionnelle, ensuite de calculer l'énergie moyenne du système par un calcul variationnel.

Pour obtenir l'énergie totale du système, nous devons ajouter la contribution des effets de couches. Cette contribution peut être calculée soit en perturbation par la méthode de Strutinsky soit par une autre méthode dite « Expectation Value Method » (EVM).

Notre travail s'appuie sur l'approximation EVM, Celle-ci consiste à calculer l'Hamiltonien à un corps de Skyrme à partir des densités semi-classiques variationnelles, et de faire ensuite une itération HF.

Dans notre travail nous avons utilisé la base de l'oscillateur harmonique. De même, nous avons tenu compte des corrélations d'appariement à la BCS, ainsi que des corrections dues aux effets de centre de masse et coulombiens.

Les calculs effectués sur les trois noyaux transitionnels mi-lourds et lourds  $^{110}\text{Cd}$ ,  $^{154}\text{Sm}$  et  $^{186}\text{Pt}$  ont permis de vérifier que cette approche reproduit, les énergies obtenues par les calculs Hartree-Fock, à moins d'un MeV près. Le seul défaut systématique observé est lié à la taille de la base.

Il n'en demeure pas moins que l'approche présentée dans ce travail, qui n'a nulle prétention de supplanter les indispensables calculs Hartree-Fock, constitue une aide précieuse pour de tels calculs.

A priori, elle permet de déceler les régions de noyaux intéressants à étudier. Obtenir en effet une surface d'énergie potentielle d'oscillateur harmonique par exemple, est un résultat dont la portée faible est sans commune mesure avec l'effort numérique engagé. Bien entendu, il est très intéressant d'avoir une méthode simple pour avoir une première idée des résultats avant d'effectuer des calculs longs et coûteux. Si l'on veut s'éviter en outre de déterminer toute la surface d'énergie potentielle mais seulement la région du minimum, par exemple pour ensuivre l'évolution isotopique, il est très utile de pouvoir localiser rapidement cette région, ce que permet l'approche développée dans notre travail.

## ABSTRACT

The Hartree-fock approximation (HF) permitted to reproduce, with success, the ground state properties of nuclei in all regions of the periodic table. However, the use of this approximation requires a very important calculation time, what motivates the development and use of other approximations permitting to get acceptable results in a reasonable time. The density functional method can serve this goal.

According to Hohenberg and Kohn's theorems, the energy of interacting fermions system is a functional of the local density alone. It follows that the kinetic energy density is expressed like local density functional which is universal.

The extended Thomas-Fermi method (ETF) permits us to get an approximated form for this functional, in order to calculate the mean energy of the system by variational calculations.

To get the total energy of the system we must add the shell effects contribution, which can be calculated either as perturbation by the Strutinsky method or by another method the "Expectation Value Method" (EVM).

Our work handles with the EVM approximation; which consists to calculate a one body Skyrme Hamiltonian from semi-classical variational densities, and make then one HF iteration.

The harmonic oscillator basis has been used in our work. We include the pairing correlations in the BCS framework, as well as Coulomb and center of mass corrections.

We have performed calculations on the three semi-heavy and heavy transitional nuclei  $^{110}\text{Cd}$ ,  $^{154}\text{Sm}$  and  $^{186}\text{Pt}$ . These calculations permitted to verify that this approach reproduces, the energies obtained by Hartree-fock calculations, to 1 MeV. The only systematic drawback observed is in relation, with the basis size.

The approach presented in our work constitutes a precious help for HF calculations. It permits to reveal interesting nuclei regions to study.

If one wants to avoid determining the entire potential energy surface but only the region of the minimum, to follow isotopic evolution for example it is very useful to be able to localize this region, and this is what the approach developed in our work permits to do, quickly.

## ملخص

إن طريقة تقريب هارترى-فوك ((Hartree-Fock (HF)) مكنت من إعطاء بنجاح خصائص الحالات الأساسية لمختلف الأنوية الموجودة في الجدول الدوري. غير أن استعمال هذا الترتيب يستلزم وقت طويل من الحساب. الشيء الذي أدى إلى ضرورة تطوير و استعمال تقريبات أخرى تسمح بالحصول على نتائج مرضية خلال وقت معقول. طريقة تابعة الكثافة (Méthode de la fonctionnelle de la densité) تفي بالغرض.

حسب نظريات هوهنبرغ و كوهن (Hohenberg et Kohn) طاقة جملة الفرميونات المتفاعلة هي تابعة الكثافة المحلية فقط. ينتج أن كثافة الطاقة الحركية يعبر عنها كتابعة الكثافة المحلية و أن هذه التابعة عامة.

طريقة تومس-فارمي (Thomas-Fermi étendue (ETF)) سمحت لنا بإيجاد شكل تقريبي لهذه التابعة. ثم بحساب الطاقة المتوسطة للجملة بطريقة مبدأ التغيرات. لإيجاد الطاقة الكلية لجملة علينا أن نضيف حد تأثير الطبقات (correction de couche). هذا الحد يمكن حسابه إما بطريقة الإضطرابات لشروتانسكي (strutinsky) أو بطريقة أخرى هي "Expectation Value Method" (EVM).

إن عملنا يركز على التقريب EVM الذي يتضمن حساب هاملتوتي لسكيرم (Skyrme) لجسيم واحد انطلاقاً من حساب شبه كلاسيكي تغييري للكثافة ثم القيام بتكريرة واحدة ل HF. في دراستنا هذه استعملنا أساس الهزاز التوافقي. كما أخذنا بعين الاعتبار الربط الزوجي (corrélacion d'appariement) بطريقة BCS وكذلك التصحيحات الناتجة عن التأثيرات الكولومبية و مركزا لكتلة.

الحسابات المنجزة على الأنوية الثلاثة الإنتقالية  $^{186}\text{Pt}$  و  $^{154}\text{Sm}$ ,  $^{110}\text{Cd}$  سمحت لنا بمراقبة أن هذا التقريب يمكن من الحصول على الطاقات بحساب هارترى-فوك بارتياح أقل من 1 MeV النقص الوحيد يتعلق ببعده الأساس المستعمل.

إن هذه الطريقة تقدم مساعدة ثمينة لحساب هارترى-فوك حيث أنها تسمح بملاحظة المناطق المهمة للدراسة للأنوية.

إذا أردنا فقط تحديد المنطقة الدنيا دون تحديد كل سطح الطاقة الكامنة من المهم حصر هذه المنطقة في وقت قصير. وهذا ما يسمح به التقريب المستعمل في عملنا هذا.