



## Connecter la méthode de la fonctionnelle de la densité d'énergie aux méthodes ab initio du problème à N corps

**Spécialité** Physique théorique, mécanique quantique

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil**

**Candidature avant le** 30/03/2018

**Durée** 3 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [SOMA Vittorio](mailto:Vittorio.SOMA@cea.fr)  
+33 1 69 08 32 36  
[vittorio.soma@cea.fr](mailto:vittorio.soma@cea.fr)

### Résumé

Notre compréhension des noyaux atomiques est en cours de révision grâce au développement d'approches «ab initio». Cependant, leur applicabilité à travers la carte des noyaux est limitée en raison des coûts de calcul élevés. En fusionnant ces techniques avec des méthodes traditionnelles, nous visons une description globale mais systématique des systèmes à plusieurs nucléons.

### Sujet détaillé

Les phénomènes mettant en jeu les noyaux atomiques, des réacteurs nucléaires à la coalescence d'étoiles à neutrons, font intervenir diverses propriétés de quantités de noyaux, dont beaucoup restent inaccessibles aux expériences. Des modèles théoriques sont donc nécessaires pour extrapoler et prédire de façon robuste leurs comportements. Cependant, le noyau de l'atome, un système quantique à plusieurs corps régi par l'interaction forte, est un des objets les plus complexes à modéliser en physique : il n'existe aujourd'hui aucune théorie unifiée des noyaux. Leur description est effectuée soit par des méthodes ab initio, soit par des approches plus effectives, telle que la méthode de la fonctionnelle d'énergie (EDF). Les premières fournissent une description élémentaire enracinée dans la théorie sous-jacente de l'interaction forte et leurs prédictions sont par construction plus robustes, avec des erreurs davantage maîtrisées. Les secondes sont applicables à un nombre beaucoup plus grand de noyaux en raison d'un coût numérique plus faible, mais les implémentations actuelles de la méthode EDF sont hautement phénoménologiques et n'ont pas la fiabilité des méthodes ab initio. Dans le cadre d'un programme de recherche de long terme entre le CEA/Saclay et le CEA/Bruyères-le-Chatel, le projet consiste à encren la méthode EDF dans les méthodes ab initio de telle sorte que celle-ci devienne fiable et perfectible selon une procédure systématique. Ceci présente un intérêt tant pour les études fondamentales de structure nucléaire de prochaine génération que pour rendre les ingrédients des modèles de réactions, par exemple pour la diffusion inélastique neutron-noyaux, plus cohérents et plus fiables sur le long terme. S'appuyant sur une première étape qui se limitait aux noyaux semi magiques, l'objectif est d'étendre l'approche aux noyaux à double couche ouverte qui constituent la grande majorité des systèmes (connus ou encore inconnus) sur la carte de noyaux. Le travail consistera en des développements formels, des développements numériques et l'application de la nouvelle technologie à des cas d'intérêt expérimental.

---

Le stage de 3/4 mois est vu comme une mise en place du projet en vue de la thèse qui s'y rapporte.

**Mots clés**

Systemes à N corps, structure et reactions nucléaires, théories effectives des champs

**Compétences**

Développements formels en mécanique quantique, développements numériques

**Logiciels**

C/C++

---

# Bridging ab initio and energy density functional methods for atomic nuclei

## Summary

Our understanding of atomic nuclei is being revised thanks to the development of "ab initio" approaches. Still, their applicability across the nuclear chart is limited due to high computational costs. By merging such techniques with traditional, more effective methods we aim at a global yet systematic description of many-nucleon systems.

## Full description

Phenomena involving atomic nuclei, from nuclear reactors to neutron star coalescence, involve various properties of nuclei, many of which remain inaccessible to experiments. Theoretical models are therefore needed to extrapolate and predict in a robust way their behaviors. However, the atomic nucleus, a many-body quantum system governed by the strong interaction, is one of the most complex objects to model in physics: Today there is no unified theory of atomic nuclei. Their description is carried out either by ab initio methods or by more effective approaches, such as the energy functional Method (EDF). The former provide an elementary description rooted in the underlying theory of the strong interaction and their predictions are more robust by construction, with better controlled errors. The latter are applicable to a much larger number of nuclei due to a lower numerical cost, but the current implementations of the EDF method are highly phenomenological and do not have the reliability of ab initio methods. Taking place within the frame of a long-term research program between CEA Saclay and CEA Bruyères-le-Chatel, the project consists of developing an "ab initio-driven energy density functional method" that is meant to be eventually reliable and systematically improvable. This is of interest both for fundamental nuclear structure studies of next generation and to render ingredients of reaction models, e.g. for neutron-nucleus inelastic scattering, more consistent and reliable on the long run. Building on a first step that was restricted to semi-magic nuclei, the goal of the present project is to extend the approach to doubly open-shell nuclei that constitute the vast majority of (known or yet unknown) systems over the nuclear chart. The work will consist in formal developments, computational tasks and application of the new technology to cases of experimental interest. The internship is meant to be a jumpstart to the following PhD thesis.

## Keywords

Many-body methods, nuclear structure and reactions, effective field theory

## Skills

Formal developments in quantum many-body theory, scientific programming

## Softwares

C/C++