

## Développement des calculs ab initio pour les noyaux atomiques

**Spécialité** Physique théorique, mécanique quantique

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [DPhN/LENA](#)

**Candidature avant le** 05/05/2021

**Durée** 5 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

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

### Résumé

Le projet porte sur les simulations ab initio de noyaux atomiques et vise des développements formels et / ou numériques (selon la préférence de l'étudiant) qui contribueront à pousser l'une des approches de pointe vers une plus grande précision.

### Sujet détaillé

La description théorique "ab initio" des noyaux atomiques est devenue possible que récemment grâce à des progrès décisifs en théorie à N corps et à la disponibilité de super-ordinateurs de plus en plus puissants. Ces techniques ab initio sont appliquées avec succès à l'étude de la structure des noyaux les plus légers. En revanche, les extensions aux éléments plus lourds et aux réactions nucléaires posent des difficultés considérables.

L'objectif du projet est de contribuer à ce progrès en théorie à N corps. L'étude sera centré sur une technique ab initio en cours de développement au CEA Saclay (l'approche dite de fonction Gorkov-Green) qui a permis pour la première fois l'application de méthodes ab initio aux systèmes à couche ouverte ou, autrement dit, superfluides (la majorité des noyaux atomiques). Après les premières applications pour des noyaux légers et de masse moyennes, l'approche face au défi d'un upgrade crucial pour atteindre le niveau de précision et compétitivité des méthodes de pointe. Le travail proposé visera à développer les premiers outils pour aller dans ce direction.

Plus précisément, l'étudiant effectuera (selon sa préférence) soit des développements formels de la théorie des fonctions de Gorkov-Green, soit contribuera à l'écriture d'un code numérique capable de générer automatiquement des expressions pour des contributions d'ordre supérieur dans la théorie. Une thèse où ces développements seront incorporés dans le code numérique pour des simulations ab initio des noyaux atomiques peut être envisagée.

### Mots clés

Physique nucléaire, structure nucléaire, techniques à N corps, calcul haute-performance

---

**Compétences**

**Logiciels**

---

## Advancing the ab initio description of atomic nuclei

### Summary

The project concerns ab initio simulations of atomic nuclei and aims at formal and/or numerical developments (depending on the taste of the student) that will contribute to pushing one of the state-of-the-art approaches to higher precision.

### Full description

The theoretical description of atomic nuclei from first principles, or in a so-called ab initio fashion, has become possible only recently thanks to crucial advances in many-body theory and the availability of increasingly powerful high-performance computers. Such ab initio techniques are being successfully applied to study the structure of nuclei starting from the lighter isotopes. Still, extensions to heavy elements and nuclear reactions are posing considerable difficulties.

The objective of the project is to contribute to this on-going progress in nuclear many-body theory. The study will focus on a developing ab initio technique (the so-called Gorkov-Green function approach, devised at CEA Saclay) designed to describe open-shell or superfluid systems (the majority of atomic nuclei). After the first promising applications to light and medium-mass nuclei, the method faces crucial upgrades to reach the precision and competitiveness of state-of-the-art approaches. The proposed work will aim to put in place the first necessary tools towards this direction.

More specifically, the student will perform (depending on his/her preference) either formal developments of Gorkov-Green's function theory or contribute to the writing of a numerical code able to automatically generate expressions for higher-order contributions in the theory. A PhD thesis where such developments will be implemented in the numerical code for full-fledged ab initio simulations of atomic nuclei can be envisaged.

### Keywords

Nuclear physics, nuclear structure, many-body techniques, high-performance computing

### Skills

### Softwares