

## Proposition de thèse – 2023-2026

**Thématique : Physique nucléaire théorique**

**Sujet de thèse : Ajustement des paramètres d'une interaction effective généralisée pour la modélisation des noyaux lourds**

**Directeur de thèse :** Michael BENDER

**Téléphone :** 04 72 44 84 50

**Email :** [bender@ipnl.in2p3.fr](mailto:bender@ipnl.in2p3.fr)

**Adresse :** IP2I Lyon – Bureau 338

Domaine Scientifique de la Doua – Bât. Paul Dirac

4 rue Enrico Fermi – 69622 Villeurbanne Cedex - France

Ce projet de thèse s'inscrit dans un programme de recherche qui a comme ambition d'atteindre un niveau de précision sans précédente pour la description théorique des propriétés spectroscopiques des noyaux lourds et super lourds. Ces systèmes présentent une grande variété de modes d'excitation et de désintégration qui font l'objet d'expériences dans des laboratoires du monde entier. Les données expérimentales déjà disponibles pour ces noyaux mettent en évidence une interaction subtile entre les effets de couches quantiques et les modes de déformation et qui, jusqu'à présent, ne peut pas encore être reproduit de manière satisfaisante par les approches théoriques basées sur une fonctionnelle de la densité d'énergie (EDF) nucléaire qui modélise l'interaction effective dans le milieu nucléaire.

L'une des insuffisances des EDFs modernes, et pertinente pour la description des effets de couches dans les noyaux lourds, concerne la description de la position précise des niveaux d'énergie des particules individuelles au voisinage des énergies de Fermi respectives des protons et des neutrons. La modélisation fiable de ces niveaux devient particulièrement décisive pour les noyaux atomiques les plus lourds qui présentent une grande densité d'états, de sorte qu'un petit déplacement d'un tel niveau peut complètement changer le spectre d'excitation du noyau. Il a été démontré que les formes standard de l'EDF nucléaire ne permettent pas d'améliorer de manière significative la description du spectre des particules individuelles. Ceci implique que des formes généralisées de l'EDF sont nécessaires.

Étant donné que le couplage des états à une seule particule à des degrés de liberté collectifs est de la plus haute importance pour de nombreux phénomènes qui concernent les noyaux très lourds, la question reste ouverte de savoir si un traitement explicite des corrélations quantiques par des techniques dites « au-delà du champ moyen » qui restaurent les symétries de l'hamiltonien nucléaire et traitent les fluctuations dans les degrés de liberté de forme dans le cadre de la méthode des coordonnées génératrices devient obligatoire pour une description précise de ces systèmes. Les outils numériques permettant de décrire ces types de corrélations ont été développés, mais à l'heure actuelle il n'existe pas une paramétrisation prédictive de l'EDF nucléaire qui puisse être utilisée de manière fiable dans de tels calculs sans ambiguïtés formelles liées au traitement des dépendances phénoménologiques de la densité des constantes de couplage de l'EDF.

L'objectif de cette thèse est de comprendre comment les degrés de liberté supplémentaires offerts par des généralisations de l'EDF nucléaire qui incluent des termes d'ordre supérieur dans les impulsions et qui remplacent les dépendances de la densité par des interactions à trois corps rigoureuses peuvent être utilisés pour résoudre les problèmes mentionnés ci-dessus.

Au cours de sa thèse, l'étudiant travaillera sur l'implémentation et la validation des termes additionnels de l'EDF généralisée dans des codes numériques existants, sur la définition d'un protocole d'ajustement approprié qui fixe sans ambiguïté les constantes de couplage des termes additionnels, et effectuera des calculs de structure nucléaire sur des plates-formes de calcul à haute performance.

## PhD thesis proposal – 2023-2026

**Research field:** Theoretical nuclear structure physics

**Thesis title:** Parameter adjustment of a generalized effective interaction for the description of heavy nuclei

**Supervisor:** Michael BENDER

**Phone:** 04 72 44 84 50

**Email:** [bender@ipnl.in2p3.fr](mailto:bender@ipnl.in2p3.fr)

**Address:** IP2I Lyon – Bureau 338  
Domaine Scientifique de la Doua – Bât. Paul Dirac  
4 rue Enrico Fermi – 69622 Villeurbanne Cedex - France

This thesis project is in the context of ongoing efforts that aim at an improved theoretical description of the properties of heavy and superheavy atomic nuclei. These systems exhibit a large variety of excitation and decay modes that are the subject of experiments at laboratories around the globe. The experimental data available for these nuclei point to a subtle interplay between quantal shell effects and deformation modes that up to now cannot yet be satisfyingly reproduced by state-of-the-art theoretical approaches for nuclear structure based on a so-called nuclear energy density functional (EDF) that models the effective interaction in the nuclear medium. The shell effects leave their fingerprint on excitations of individual nucleons, whereas a nucleus' deformation is imprinted on its collective excitation modes such as rotations and vibrations in shape degrees of freedom.

One of the shortcomings of modern nuclear EDFs with respect to shell effects concerns the description of the precise position of single-particle levels in the vicinity of the respective Fermi energies of protons and neutrons. Their reliable modelling becomes particularly decisive for the heaviest known atomic nuclei that exhibit a large density of single-particle states, such that a small shift of a level can alter the excitation pattern of a nucleus. It has been shown that the standard forms of modern nuclear energy density functionals do not allow for a further significant improvement of the description of single-particle spectra. Instead, generalized forms of the EDF are needed.

As the coupling of single-particle states to collective degrees of freedom is of utmost importance for many very heavy nuclei, there also is the yet open question if an explicit treatment of quantum correlations through so-called beyond-mean-field techniques that restore the symmetries of the nuclear Hamiltonian and treat fluctuations in shape degrees of freedom within the framework of the generator coordinate method become mandatory for an accurate description of such systems. The numerical tools to describe such correlations have been developed, but at present there does not exist a predictive parametrization of the nuclear EDF that can be reliably employed in such calculations without formal ambiguities that are related to the treatment of the phenomenological density dependences of the EDFs' coupling constants.

The goal of this thesis is to understand how the additional degrees of freedom offered by recently proposed generalisations of the nuclear EDF that include higher-order terms in momenta and replace the density-dependences by formally unambiguous three-body interactions can be used to solve the two problems mentioned above.

During his thesis, the student will work on the implementation and validation of the additional terms of the generalised EDF into existing numerical codes, the definition of a suitable adjustment protocol that unambiguously fixes the coupling constants of the additional terms, and perform nuclear structure calculations on high-performance computing platforms.