

Champ Moyen Nucléaire dans le formalisme de Dirac

Nicolas Schunck

▶ **To cite this version:**

Nicolas Schunck. Champ Moyen Nucléaire dans le formalisme de Dirac. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Louis Pasteur - Strasbourg I, 2001. Français. NNT : . tel-00001557

HAL Id: tel-00001557
https://theses.hal.science/tel-00001557

Submitted on 13 Aug 2002

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

No. Bibl. : 01-10

UNIVERSITÉ LOUIS PASTEUR

THÈSE

Présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Louis Pasteur de Strabourg

Spécialité : Physique Nucléaire Théorique

par

Nicolas SCHUNCK

Champ moyen nucléaire dans le formalisme de Dirac

Directeur de thèse

P. Jerzy DUDEK

Soutenue de 13 juillet 2001 devant le jury :

P.	P. Chomaz	Président du jury
M.	J.-F. Berger	Rapporteur externe
P.	K. Pomorski	Rapporteur externe
P.	J.-P. Vivien	Rapporteur interne
P.	J. Dudek	

Table des matières

Introduction **17**

1 La théorie du champ moyen relativiste **21**

1.1 Le lagrangien de la RMF 22

1.1.1 Quelques rappels élémentaires 22

1.1.2 Principes de construction des lagrangiens 23

1.1.3 lagrangiens d'interaction 25

1.1.4 Choix des mésons 26

1.1.5 lagrangien de la théorie RMF 27

1.1.6 Discussion - Notion de lagrangien effectif 28

1.1.7 Le terme de couplage non-linéaire 30

1.2 Les équations du champ moyen relativiste 31

1.2.1 Equations générales 31

1.2.2 Equations stationnaires 32

1.2.3 Résolution des équations de la RMF 34

1.3 Extensions de la théorie RMF 34

1.3.1 Modèle CRMF - Description des noyaux en rotation 35

1.3.2 Description de l'appariement dans la théorie RMF 36

2 Champ moyen nucléaire de Dirac **39**

2.1 Champ moyen de Dirac 40

2.1.1 Formes alternatives de l'équation de Dirac 40
2.1.2 Potentiels nucléaires 42
2.1.3 Une paramétrisation étendue 47
2.2 Géométries des potentiels 48
2.2.1 Le potentiel central 49
2.2.2 Le potentiel spin-orbite 51
2.2.3 La masse effective « indépendante » 57
2.3 Implémentation - Le code WS-ODD 60
2.3.1 La base cartésienne de l'oscillateur harmonique 60
2.3.2 Calcul des élements de matrice - Exemple 62

3 Paramétrisation du champ de Dirac 67

3.1 Détermination des paramètres des potentiels 67
3.1.1 Position du problème 68
3.1.2 Quelques difficultés supplémentaires... 69
3.2 Résultats pour les noyaux sphériques doublement magiques 73
3.2.1 Niveaux d'énergie à une particule 74
3.2.2 Rayons carrés moyens et petite composante 81
3.2.3 Paramètres des potentiels 81
3.3 Passage vers la déformation 82
3.3.1 Dépendance en isospin des paramètres 83
3.3.2 Densités de charge 84
3.3.3 Têtes de bandes rotationnelles 87
3.4 Résultats de la paramétrisation avec masse effective indépendante 93

4 Rotation collective 101

4.1 Quelques aspects théoriques de la physique des hauts-spins 102

4.1.1 Introduction 102
4.1.2 L'approximation de cranking 103
4.2 Symétries 108
4.2.1 Parité 109
4.2.2 Signature $\hat{\mathcal{R}}_y$ 109
4.2.3 Simplex $\hat{\mathcal{S}}_y$ 110
4.2.4 Renversement du temps 111
4.3 Résultats dans la région de masse $A \sim 150$ 111
4.3.1 Routhiens dans le noyau ^{152}Dy 111
4.3.2 Moment $\mathfrak{J}^{(2)}$ 115
4.3.3 Moment $\mathfrak{J}^{(1)}$ 116
4.3.4 Interprétation des différences relativiste/non-relativiste 117
4.3.5 Comparaison avec la théorie RMF 120
4.4 Résultats avec la masse effective indépendante 126

5 Déformations d'équilibre **129**

5.1 Modèle de la goutte liquide 130
5.2 Corrections de couche - Procédure de Strutinsky 131
5.2.1 Justification de la méthode 132
5.2.2 Cas des noyaux statiques 132
5.2.3 Comment inclure l'appariement ? 136
5.2.4 Cas des noyaux en rotation 138
5.3 Résultats 140
5.3.1 Quelques détails pratiques 141
5.3.2 Recherche de déformations octupolaires exotiques 142
5.3.3 De nouvelles perspectives pour les noyaux super-lourds 161

Conclusion **167**

ANNEXES **169**

A Le couplage « Particle+Rotor » **171**

A.1 Introduction 171

A.2 Hypothèses générales 171

A.2.1 Hamiltonien du système 172

A.2.2 Notations 172

A.3 Bandes rotationnelles et symétries 174

A.3.1 Parité et signature 174

A.3.2 Simplex 176

B Fonctions d'onde des nucléons **179**

B.1 Introduction 179

B.2 Polynômes de Laguerre généralisés 179

B.3 Amplitude de probabilité au point r 180

B.3.1 Fonctions d'onde en coordonnées sphériques 180

B.3.2 La partie radiale de la fonction d'onde 181

B.3.3 Décomposition d'un état quelconque dans la base sphérique 182

C Bases cartésiennes **183**

C.1 Introduction 183

C.2 Opérateur de renversement du temps 183

C.3 Définition de la base B 184

C.3.1 Notation 185

C.3.2 Principale propriété 185

C.4 Définition de la base T 186

C.4.1 L'opérateur de simplex 186
C.4.2 Propriétés de la base T 187
C.5 Base T et matrices de Pauli 189
C.5.1 Action des matrices de Pauli sur les états propres de spin 189
C.5.2 Action des matrices de Pauli sur la base B 190
C.5.3 Action des matrices de Pauli sur la base T 190
C.6 Eléments de matrice du spin dans la base T 191
C.7 Eléments de matrice d'un opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ 192
C.7.1 Action de $\hat{\mathcal{O}}$ dans la base B 192
C.7.2 Action de $\hat{\mathcal{O}}$ sur les vecteurs de la base T 193
C.8 Eléments de matrice de $\hat{\mathcal{O}}\sigma_\mu$ 194
C.9 Structure en blocs dans la base T 195
C.9.1 Opérateur de simplex et base T 195
C.9.2 Opérateur de renversement du temps et base T 196
C.9.3 Résumé 197
C.9.4 Structure matricielle de certains opérateurs 197

D Traitement de l'appariement **201**

D.1 Théorie BCS 202
D.1.1 Cadre général 202
D.1.2 La fonction d'onde BCS 203
D.1.3 Equations BCS 205
D.1.4 Les quasi-particules 207
D.1.5 Interprétation des équations BCS 209
D.2 Projection du nombre de particules 210
D.2.1 Fonction d'onde projetée 211
D.2.2 Application à la théorie BCS 214

Bibliographie **215**

Index **218**

Table des figures

2.1 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la profondeur du potentiel central* 49

2.2 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction du rayon du potentiel central* . 50

2.3 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la diffusivité du potentiel central* 50

2.4 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la profondeur du potentiel spin-orbite* 51

2.5 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la diffusivité du potentiel spin-orbite* 52

2.6 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction du rayon du potentiel spin-orbite* 53

2.7 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction du rayon du potentiel spin-orbite - Woods-Saxon universel* 53

2.8 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction du rayon du potentiel de masse effective (égal au rayon du potentiel spin-orbite)* 56

2.9 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la profondeur du potentiel de masse effective (égal à celle du potentiel spin-orbite)* 57

2.10 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la diffusivité du potentiel de masse effective (égal à celle du potentiel spin-orbite)* 58

2.11 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la profondeur du potentiel de masse effective (différente de celle du potentiel spin-orbite)* 58

2.12 *Evolution des niveaux d'énergie en fonction drayon du potentiel de masse effective (différent de celui du potentiel spin-orbite)* 59

3.1 *Algorithme de minimisation et pas du gradient* 71

3.2 *Algorithme de minimisation et conditions initiales* 72

3.3 *Niveaux individuels dans* ^{208}Pb 74

3.4 *Niveaux individuels dans ^{40}Ca* 75

3.5 *Niveaux individuels dans ^{48}Ca.* 77

3.6 *Niveaux individuels dans ^{56}Ni.* 77

3.7 *Niveaux individuels dans ^{90}Zr.* 78

3.8 *Niveaux individuels dans ^{100}Sn.* 78

3.9 *Niveaux individuels dans ^{132}Sn.* 79

3.10 *Niveaux individuels dans ^{146}Gd.* 79

3.11 *Densités de charge* 85

3.12 *Densités de charge* 86

3.13 *Principe de construction des histogrammes* 88

3.14 *Prédictions des spin-parité des têtes de bande (modèle relativiste) - Protons* 89

3.15 *Prédictions des spin-parité des têtes de bande (modèle relativiste) - Neutrons* 90

3.16 *Prédictions des spin-parité des têtes de bande (modèle non relativiste) - Neutrons* 91

3.17 *Prédictions des spin-parité des têtes de bande (modèle non relativiste) - Protons* 92

3.18 *Niveaux individuels dans ^{40}Ca.* 96

3.19 *Niveaux individuels dans ^{48}Ca.* 96

3.20 *Niveaux individuels dans ^{56}Ni.* 97

3.21 *Niveaux individuels dans ^{90}Zr.* 97

3.22 *Niveaux individuels dans ^{100}Sn.* 98

3.23 *Niveaux individuels dans ^{132}Sn.* 98

3.24 *Niveaux individuels dans ^{146}Gd.* 99

3.25 *Niveaux individuels dans ^{208}Pb.* 99

4.1 *Rotation d'un noyau déformé « prolate »* 103

4.2 *Routhiens neutrons dans ^{152}Dy avec l'hamiltonien de Dirac* 113

4.3 *Routhiens protons dans ^{152}Dy avec l'hamiltonien de Dirac* 113

4.4 *Routhiens neutrons dans ^{152}Dy avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon* 114

4.5 *Routhiens protons dans ^{152}Dy avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon* 114

4.6 *Moment $\mathfrak{J}^{(2)}$ dans ^{152}Dy* 115

4.7 *Moment $\mathfrak{J}^{(1)}$ dans ^{152}Dy* 117

4.8 *Différence entre les fonctions d'onde radiales - Relativiste/Universel pour les neutrons* 118

4.9 *Fonctions d'onde radiale dans ^{208}Pb - Neutrons* 119

4.10 *Comparaison des moments $\mathfrak{J}^{(2)}$ pour différentes géométries des potentiels.* . . 122

4.11 *Routhiens individuels neutrons dans ^{152}Dy - Paramètrisation équivalente à la théorie* RMF. 124

4.12 *Routhiens individuels neutrons dans ^{152}Dy - Paramètrisation optimale.* . . 124

4.13 *Routhiens individuels protons dans ^{152}Dy - Paramètrisation équivalente à la théorie* RMF. 125

4.14 *Routhiens individuels protons dans ^{152}Dy - Paramètrisation optimale.* . . . 125

4.15 *Moment $\mathfrak{J}^{(1)}$ dans ^{152}Dy (masse effective indépendante)* 126

4.16 *Moment $\mathfrak{J}^{(2)}$ dans ^{152}Dy (masse effective indépendante)* 127

4.17 *Alignement effectif dans la région de masse $A \sim 150$.* 128

5.1 *Symétries existant pour des déformations purement quadrupolaires dans le plan (β, γ).* 142

5.2 *Illustration de la classification des niveaux d'énergie en fonction des représentations irréductibles d'un groupe de symétrie* 144

5.3 *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{208}Pn en fonction de la déformation octupolaire α_{30} avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon.* 146

5.4 *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{208}Pb en fonction de la déformation octupolaire α_{31} avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon.* 146

5.5 *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{208}Pb en fonction de la déformation octupolaire α_{32} avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon.* 147

5.6 *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{208}Pb en fonction de la déformation octupolaire α_{33} avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon.* 147

5.7 *Evolution des niveaux d'énergie individuels neutrons dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{30} avec l'hamiltonien de Dirac.* 149

5.8 *Evolution des niveaux d'énergie individuels protons dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{30} avec l'hamiltonien de Dirac.* 149

5.9 *Evolution des niveaux d'énergie individuels neutrons dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{32} avec l'hamiltonien de Dirac.* 150

5.10 *Evolution des niveaux d'énergie individuels protons dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{32} avec l'hamiltonien de Dirac.* 150

5.11 *Evolution des niveaux d'énergie individuels neutrons dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{33} avec l'hamiltonien de Dirac.* 151

5.12 *Evolution des niveaux d'énergie individuels protons dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{33} avec l'hamiltonien de Dirac.* 151

5.13 *Surface d'énergie totale pour ^{80}Zr. Les déformations prises en compte sont α_{20}, α_{30} et α_{32}.* 152

5.14 *Surface d'énergie totale $(\alpha_{30}, \alpha_{32})$ pour ^{80}Zr.* 153

5.15 *Surface d'énergie totale $(\alpha_{31}, \alpha_{32})$ pour ^{80}Zr.* 154

5.16 *Surface d'énergie totale $(\alpha_{33}, \alpha_{32})$ pour ^{80}Zr.* 154

5.17 *Surface d'énergie totale $(\alpha_{30}, \alpha_{31})$ pour ^{80}Zr.* 155

5.18 *Surface d'énergie totale $(\alpha_{30}, \alpha_{33})$ pour ^{80}Zr.* 155

5.19 *Surface d'énergie totale $(\alpha_{31}, \alpha_{33})$ pour ^{80}Zr.* 156

5.20 *Surface d'énergie totale pour ^{82}Zr.* 158

5.21 *Surface d'énergie totale pour ^{84}Zr.* 158

5.22 *Surface d'énergie totale pour ^{86}Zr.* 159

5.23 *Surface d'énergie totale pour ^{88}Zr.* 159

5.24 *Surface d'énergie totale pour le noyau doublement magique ^{90}Zr.* 160

5.25 *Carte (β, γ) du noyau $Z = 114, N = 184$ avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon.* 162

5.26 *Carte (β, γ) du noyau $Z = 120, N = 184$ avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon.* 163

5.27 *Carte (β, γ) du noyau $Z = 126, N = 184$ avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon.* 163

5.28 *Evolution des niveaux d'énergie individuels protons autour de* $Z = 126, N = 184$ *en fonction de la déformation octupolaire* α_{32} *avec l'hamiltonien de Dirac.* 164

5.29 *Evolution des niveaux d'énergie individuels neutrons autour de* $Z = 126, N = 184$ *en fonction de la déformation octupolaire* α_{32} *avec l'hamiltonien de Dirac.* 165

5.30 *Carte* (β, γ) *de l'énergie totale du noyau* ${}^{322}_{126}X_{196}$ 166

5.31 *Carte de l'énergie totale du noyau* ${}^{322}_{126}X_{196}$ *en fonction de l'élongation quadrupolaire* α_{20} *et de la déformation octupolaire* α_{32} 166

A.1 *Signification des différents nombres quantiques associés au couplage entre mouvement individuel et rotation collective.* 173

D.1 *Occupation des niveaux individuels avec et sans appariement* 207

Liste des tableaux

3.1 *Rayons carrés moyens des noyaux sphériques doublement magiques* 76

3.2 *Etats à une particule (protons) profondément liés dans* ^{40}Ca 80

3.3 *Etats à une particule (protons) profondément liés dans* ^{90}Zr 80

3.4 *Influence de la petite composante sur les rayons carrés moyens* 81

3.5 *Paramètres de l'hamiltonien de Dirac-Woods-Saxon pour les protons* . . . 82

3.6 *Paramètres de l'hamiltonien de Dirac-Woods-Saxon pour les neutrons* . . . 83

3.7 *Coefficients de la régression linéaire pour les neutrons* 84

3.8 *Coefficients de la régression linéaire pour les protons* 84

3.9 *Paramètres de l'hamiltonien de Dirac-Woods-Saxon pour les neutrons (masse effective indépendante)* 93

3.10 *Paramètres de l'hamiltonien de Dirac-Woods-Saxon pour les protons (masse effective indépendante)* 94

3.11 *Rayons carrés moyens des noyaux sphériques doublement magiques* 94

3.12 *Coefficients de la régression linéaire pour les protons* 95

3.13 *Coefficients de la régression linéaire pour les neutrons* 95

5.1 *Résultats de la minimisation de l'énergie totale sur* α_{20}, α_{30} *et* α_{32}, α_{40}, α_{42} *et* α_{44}. 152

5.2 *Résultats de la minimisation de l'énergie totale sur* α_{30}, α_{31}, α_{32} *et* α_{33}. . 157

C.1 *Structure d'un opérateur* $\mathcal{O}$ *dans la base* T *en fonction de ses relations de commutation et d'anti-commutation avec* $\hat{T}$ *et* $\hat{S}_y$ 198

Celui qui ignore qu'il ne sait pas est un fou ; fuis-le.
Celui qui sait qu'il ne sait pas est un enfant ; apprends-lui.
Celui qui ignore qu'il sait est endormi ; réveille-le.
Celui qui sait qu'il sait, celui-là est un sage : suis-le.

Proverbe arabe (ça fait bien, je trouve)

Remerciements

Les remerciements sont assez souvent la partie de la thèse la plus agréable à écrire. D'abord, comme c'est la moins importante, on la garde généralement pour la fin - étrange coïncidence : c'est souvent la première (et seule) chose que lisent les lecteurs d'une thèse, et justement, la fin de la rédaction de thèse, je parle de la toute fin, le dernier soir, quand tout ou presque est écrit, rédigé, corrigé, vérifié, imprimé, empaqueté, etc, eh bien ce moment-là, il est très très agréable.

Mais naturellement, les remerciements ont une fonction, et cette fonction, pour l'auteur de la thèse, c'est de montrer ostensiblement sa reconnaissance éperdue à toutes celles et tous ceux qui l'ont aidé dans son travail, à toutes celles et ceux qui ne l'ont pas aidé, c'est pas grave, merci quand-même, et même à toutes celles et tous ceux qui n'ont rien à voir avec tout ça, et qui se demandent de quoi on les remercie. Il me faut donc sacrifier à ce rite et donner en pature aux lecteurs avides de cet épais manuscrit les remerciements qu'ils attendent. D'aucuns mettent à profit cette tribune qu'on leur offre pour exposer leurs conceptions élevées de la science et du monde, de la société, de tout ce qui leur passe par la tête et qu'ils exposent avec une condescendance modeste et satisfaite. A tel point qu'on ne voie plus très bien qui ils remercient. D'autres s'adressent à un public plus restreint, celui de leurs ami(e)s, de leur petit clan et de leur petite tribu, et seuls les membres de cette confrérie privilégiée peuvent en général décrypter le sens assez sybillin du texte, rempli de codes et d'allusions impénétrables au commun des mortels.

Pour ma part, après avoir lu plusieurs de ces intéressantes proses, je me suis longtemps demandé comment j'allais m'y prendre pour remplir une ou deux pages de remerciements, alors que je n'ai pas grand monde à remercier. Entendons-nous : il me semble que ces effusions littéraires doivent s'adresser en premier lieu à qui les mérite, c'est-à-dire à ceux et celles qui m'ont réellement aidé dans mon travail (par exemple, je ne vois pas pourquoi je remercierai mon boulanger, une personne pourtant remarquable, mais dont l'influence sur ma thèse est loin d'être évidente). Or je ne vois guère que deux personnes à remercier. D'abord Erice, dont la présence démontre chaque jour brillamment combien la vie est plus facile lorsqu'on dispose d'une secrétaire rapide, efficace et intelligente, et dont les absences occasionnelles démontrent de façon tout aussi éclatante le contraire. Les scientifiques, qu'ils soient étudiants en thèse ou professeurs émérites, sont des gens distraits et qui n'ont pas toujours un sens pratique très évolué. Il est rassurant de savoir qu'on peut se reposer sur des gens comme Erice. Qu'elle soit donc ici remerciée comme elle le doit, c'est-à-dire chaleureusement.

Passons maintenant à mon cher directeur de thèse. Isaac Newton disait : « Si j'ai vu un peu plus loin que les autres, c'est que j'étais juché sur les épaules de géants. » Je ne suis

pas Isaac Newton, et je n'oserai pas dire que j'ai vu plus loin que les autres (vu que je ne suis même pas sur d'avoir vu quoi que ce soit), mais j'étais sûrement juché sur les épaules d'un géant. Enfin peut-être pas un vrai géant, sa modestie en soufrirait, et puis il ne faut rien exagérer, mais disons que sans lui, je n'aurais rien vu du tout, je n'aurai pas compris grand-chose, et je ne m'en rendrais peut-être même pas compte.

Alors que maintenant, si.

Il possède, pour ceux qui ne le connaissent pas, une qualité rare chez un scientifique : l'ouverture d'esprit. Il n'est pas de ces sectaires que l'on croise parfois dans les laboratoires, qui défendent depuis l'aube des temps leur haute vision de la science comme la seule digne d'estime en se fermant consciencieusement aux idées nouvelles. Ayant un peu touché à tout ce qui se faisait dans notre vaste domaine, il en a gardé une certaine humilité (qui peut prétendre détenir la vérité ?), et une culture scientifique tout aussi certaine. Alors bien sûr, lorsqu'on lui pose une question, on n'est pas tout à fait certain, après deux heures de discussion, d'avoir reçu la réponse ; bien sûr, il arrive que des « Dans 5 mn... » se transforment, deux heures plus tard en un coup de téléphone désolé d'excuses. Mais je ne me suis jamais senti livré à ces deux extrèmes que tout thésard redoute inconsciemment : être abandonné à soi-même d'un côté, jouer les nègres de l'autre. Loin de m'avoir cantonné à un seul type de travail, si fascinant qu'il eût pu être, Jerzy a pris soin de me proposer des problématiques variées qui m'ont permis de construire le début de ma culture scientifique. Mieux : il a toujours été d'une patience véritablement angélique, ne s'est jamais mis en colère, a toujours accueilli mes suggestions avec respect, et alla même jusqu'à nettoyer mes codes informatiques de leurs bugs (tout en en ajoutant d'autres, fruits de sa distraction, pour faire bonne mesure).

Ma dette a son égard sera longue à rembourser.

Pour terminer, je souhaiterai également remercier un ensemble de personnes qui ont formé ce qu'on pourrait appeller mon environnement scientifique. Ces personnes, qui se reconnaîtront (ce qui m'évitera d'avoir à les citer nommément), avec qui je prenais mes repas, ou avec qui je voyageai dans de lointains pays exotiques et mystérieux (tels que la Pologne) m'ont grandement aidé à progresser. J'ai réalisé que je n'avais pas toujours les réponses aux questions - naïves et innocentes, disaient-ils - qu'ils me posaient, et l'appréhension d'être taxé d'incompétence me poussait à rechercher ces réponses au lieu de me reposer sur le contentement satisfait d'un savoir superficiel. Finalement, c'est comme ça qu'on progresse.

Introduction

Il n'est pas exagéré de dire que la physique nucléaire est arrivée à un tournant de son histoire. Les programmes de recherche des grands détecteurs de la génération Eurogam et Euroball sont en phase de renouvellement, et diverses perspectives pour les remplacer sont envisagées. Cette génération de détecteurs (auxquels il convient d'ajouter leur cousin américain Gammasphere, qui lui est en pleine activité) a permis une accumulation de données expérimentales sans équivalent portant sur nombre de propriétés des noyaux. Qui plus est, la précision de ces dispositifs a permis de mettre en évidence des phénomènes très curieux et inattendus, comme la rotation magnétique, les bandes « identiques » ou bien encore l'additivité des moments quadrupolaires. La plus mystérieuse de toutes ces découvertes reste probablement le « staggering » (oscillation $\Delta I = 4$ des énergies de transition γ). Les développements en cours dans différents laboratoires européens sur le « gamma tracking » laissent à penser que la prochaine génération de détecteurs permettra d'augmenter par un facteur 10 environ la précision et la sensibilité des mesures. Ce « grand bond en avant » rendra possible l'exploration de nouveaux territoires, tels que, entre autres, la spectroscopie avec des faisceaux radioactifs, l'étude des noyaux aux conditions extrêmes : d'isospin, de forme, d'excitation, les noyaux super-lourds, etc.

Dans ce très bref aperçu de la physique nucléaire d'aujourd'hui et de demain, quelle est donc la place de la théorie ? Comme il vient d'être mentionné, les années 90 ont vu la découverte de mécanismes nouveaux dans les noyaux dont quelques-uns n'avaient été prévus par aucune des nombreuses approches théoriques de la structure nucléaire, et dont certains mêmes, comme les oscillations $\Delta I = 4$, manquent encore d'une explication entièrement convaincante. *A contrario*, les preuves expérimentales de la triaxialité (« wobbling motion »), de l'hyperdéformation, de la rotation magnétique ou de la chiralité ne sont pas elles non plus dénuées de toute incertitude. Dans l'ensemble, on peut ainsi tracer un parallèle entre la physique des particules et la physique nucléaire : on y dispose d'un « modèle standard », dont le rôle est joué en physique nucléaire par l'ensemble des théories de champ moyen, ce modèle standard est très performant et assez bien connu, mais on sait qu'il faut aller au-delà, et toutes les voies de recherches dépassant ce modèle standard doivent donc être explorées.

Il y a naturellement plusieurs chemins pour aller « au-delà » du champ moyen. Les modèles inspirés par la dynamique moléculaire en constituent l'un des plus récents et semblent aujourd'hui trouver une application concrète dans les travaux portant sur l'hyperdéformation : dans ces systèmes très allongés, les nucléons peuvent se répartir en deux « molécules » juste avant que le système ne fissionne. Dans les noyaux légers, le modèle

dit des « clusters » est probablement l'une des avancées les plus originales parmi les approches modernes : le concept sur lequel il repose (la fonction d'onde du noyau comme une décomposition - proprement anti-symétrisée - de fonctions d'onde de noyaux légers) est réellement original. Des développements théoriques et des résultats expérimentaux récents ont permis de rappeler la pertinence et la validité de ce modèle. Dans un registre à peine plus classique, l'exploration de nouvelles symétries représente également un axe possible pour le futur. La théorie des groupes de symétrie a été abondamment utilisée et avec un succès certain dans le contexte de la physique moléculaire pour traiter les symétries géométriques des molécules, mais ses applications en physique nucléaire ne sont pas encore très nombreuses (et pourtant, nombre de situations que l'on y rencontre se prêteraient bien à de telles études). Les symétries exotiques des noyaux ont des implications fascinantes sur les orbitales individuelles : par exemple, plusieurs prédictions théoriques, dont quelques unes dans cette thèse, indiquent que dans un noyau présentant la symétrie tétraédrale, les états individuels sont des mélanges presque parfaits d'états de parité positive et négative. L'adaptation des techniques de la physique des hautes énergies est également un axe de recherche prometteur, peut-être moins en vue d'applications pratiques que sur un plan purement théorique. Il reste beaucoup à faire pour comprendre comment « adapter » la chromodynamique quantique à basse énergie. Dans cet esprit, les théories relativistes du noyau représentent certainement une avancée majeure, mais elles appellent encore de nombreux développements.

En effet, jusqu'à ce jour, les approches relativistes se sont grossièrement séparées en deux grandes classes : les théories hadrodynamiques et les théories de champ moyen. On appelle généralement hadrodynamique quantique (QHD) la branche de la théorie des champs qui s'intéresse au problème à N corps, et plus précisément au problème de N fermions en interaction. De nombreux obstacles surgissent lorsqu'on cherche à appliquer les méthodes de la théorie des champs quantiques au système nucléaire, le principal étant que les constantes de couplage des champs sont trop grandes pour que les techniques perturbatives classiques puissent être appliquées. Aussi, depuis les travaux originels de Walecka, de nouvelles méthodes ont dû être inventées pour pouvoir faire progresser nos connaissances dans ce domaine.

Néanmoins, les techniques de la QHD ne peuvent guère s'appliquer que dans des systèmes très particuliers, tels que la matière nucléaire infinie ou à la rigueur les noyaux sphériques doublement magiques. Or de telles situations représentent des exceptions en physique nucléaire, ou la plupart des noyaux sont déformés, ou un apport d'énergie d'excitation se traduit par de la rotation, de la vibration, des changements de forme, etc. Ainsi, dés les premières tentatives de construction d'une théorie quantique des champs appliquée à N fermions en interaction, de nouvelles voies étaient explorées, la principale étant l'approximation de champ moyen, dans laquelle les opérateurs de champs sont remplacés par leur valeur moyenne. Cette approximation a permis de construire des théories auto-cohérentes qui ont été appliquées dans les calculs soit sous l'approximation de Hartree-Fock (mais uniquement dans les noyaux sphériques doublement magiques), soit sous l'approximation Hartree. Cette dernière approche a donné naissance à ce qui est maintenant communément appelé la théorie du champ moyen relativiste (Relativistic Mean-Field, RMF).

La première partie de cette thèse sera tout entière consacrée à une discussion de la

théorie du champ moyen relativiste (RMF). Nous essaierons de présenter de la façon la plus compacte possible cette approche en mettant notamment l'accent sur les différentes hypothèses et approximations qui y sont faites. En effet, l'idée à la base de ce modèle est d'appliquer aux noyaux atomiques les méthodes de la théorie quantique des champs. Malheureusement, en raison essentiellement de l'intensité de l'interaction forte, les traitements perturbatifs sont quasiment impossibles à mettre en œuvre, ce qui rend les équations particulièrement difficiles à résoudre. Pour passer outre ces difficultés, plusieurs approximations sont faites, et dans la perspective de développements et d'améliorations futurs, il est important de les mentionner toutes ainsi que les justifications sur lesquelles elles reposent.

Avec les notions développées dans la présentation de la théorie RMF, il sera plus facile de présenter les calculs sur lesquels reposent notre approche. Rappelons que le but est de fournir une description la plus complète possible du mouvement des nucléons dans le noyau en s'appuyant sur le formalisme relativiste centré sur l'équation de Dirac. Nous présenterons ainsi, dans le chapitre 2 de cette thèse nos principales hypothèses et la façon dont les potentiels sont paramétrisés. Nous examinerons à cette occasion les conséquences de la géométrie des différents potentiels sur les niveaux individuels, en mettant notamment l'accent sur les aspects purement relativistes. Cette analyse mettra en lumière quelques unes des différentes marquantes entre les théories relativistes et les théories non-relativistes.

Les résultats concernant les niveaux de particules individuelles dans les noyaux doublement magiques, aussi bien près du niveau de Fermi que dans l'ensemble du puits de potentiel seront présentés dans le chapitre 3, ainsi que les rayons carrés moyens de ces noyaux : ce sont ces observables qui nous ont servi à choisir les paramètres de notre hamiltonien. Contrairement aux arguments avancés par le groupe de Münich, qui soutient que les mauvaises densités de niveaux près du niveau de Fermi obtenues par la théorie RMF sont des conséquences de la présence de la masse effective dans les équations, nos résultats démontrent que cet argument n'est pas recevable, puisque notre approche contient également la masse effective, mais reproduit très bien ces densités de niveaux. Pour vérifier que le modèle restait stable lors du passage vers la déformation, nous avons également calculé les spins et parités des têtes de bandes rotationnelles, et comparé ces grandeurs avec l'expérience. Les résultats, sous forme d'histogrammes, s'avèrent très satisfaisants.

Ces calculs de niveaux individuels et de rayons carrés moyens n'ont été effectués que dans les noyaux doublement magiques, donc sphériques. Le passage à la déformation *via* les têtes de bandes ne renseigne que sur les aspects statiques des noyaux. Or nous souhaiterions naturellement pouvoir faire des calculs portant sur la dynamique des noyaux, par exemple la rotation. L'extension de notre modèle pour décrire les bandes rotationnelles se fait par l'intermédiaire de l'approximation de « cranking ». Dans le chapitre 4, nous rappellerons les principales caractéristiques de ce modèle et donnerons les résultats obtenus principalement dans la région de masse $A \sim 150$ où l'appariement est supposé être relativement faible. Les calculs portant sur des observables tels que le moment dynamique $\mathfrak{J}^{(2)}$ où l'alignement effectif inter-bandes montrent un accord avec l'expérience soit comparable en qualité aux résultats de modèles traditionnels, soit meilleur. D'autre part, les calculs permettent de montrer que même sans le terme dit de « magnétisme nucléaire » (avancé comme la seule explication des résultats moyens de l'approche RMF), l'accord avec l'expérience est très correct. Nous montrerons notamment que la *géométrie* du potentiel spin-orbite se révèle

un paramètre crucial et que l'on ne peut se contenter simplement de reproduire les écarts énergétiques entre niveaux $\ell \pm \frac{1}{2}$.

Une autre des applications possibles de notre hamiltonien réaliste est le calcul des surfaces d'énergie totale en fonction de la déformation. L'avantage des approches semi-empiriques dans ce contexte réside dans la (relative) simplicité des équations à résoudre, qui permet d'inclure de très nombreux paramètres de déformation sans se heurter à des problèmes de convergence tels que ceux rencontrés dans les théories auto-cohérentes. Nous avons donc appliqué la procédure dite « macro+micro » de calcul d'énergie totale (l'énergie totale du noyau se décompose en une partie macroscopique, calculée avec un modèle de goutte liquide, et une partie microscopique provenant des orbitales nucléaires). Dans le chapitre 5, nous rappelons la méthodologie de la procédure de Strutinsky pour l'énergie microscopique ainsi que les principales formules concernant l'énergie macroscopique. Deux types d'applications ont été envisagées : d'une part la recherche de déformations octupolaires exotiques (telles que α_{32} qui caractérise la symétrie T_d) dans l'état fondamental de certains noyaux, d'autre part les calculs relatifs aux éléments super-lourds. A ce sujet, nous montrerons qu'il est fort possible que ces noyaux super-lourds aient de fortes déformations exotiques dans leur état fondamental.

1. La théorie du champ moyen relativiste

La théorie du champ moyen relativiste s'inscrit dans le cadre plus général de l'hadrodynamique quantique, i.e. l'étude des interactions entre hadrons. Dans cette approche, les nucléons, en tant que fermions, sont décrits par des bi-spineurs de Dirac, et interagissent *via* l'échange de mésons. La description des interactions nucléon-méson se fait par le biais de la théorie quantique des champs. On peut démontrer que les modèles construits selon ces prescriptions sont des théories de jauge locales renormalisables [Ser86]. Cependant, contrairement à ce qui se passe en électrodynamique quantique ou en chromodynamique quantique à haute énergie, les constantes de couplages des champs sont trop grandes pour que les approches perturbatives classiques puissent être utilisées [Ser86, Rin96]. De façon générale d'ailleurs, toutes les tentatives pour élaborer une théorie des champs quantique et relativiste appliquée au noyau atomique se sont heurtées à des obstacles qui, jusqu'ici, sont restés insurmontables.

Aussi est-il nécessaire de faire certaines approximations. La principale, qui n'apparaît d'ailleurs pas seulement dans les théories relativistes, est celle dite du champ moyen. L'idée consiste à remplacer dans le lagrangien les opérateurs de champ (quantiques) mésoniques par des fonctions (ayant un caractère scalaire, vectoriel ou tensoriel suivant la nature des mésons considérés et de leur interaction avec les nucléons) qui représentent la valeur moyenne de ces opérateurs. De cette façon, on se ramène en partie à une théorie des champs classiques, ce qui facilite la résolution du problème. En partie seulement parce que les bi-spineurs de Dirac décrivant les nucléons restent des opérateurs (au sens de la seconde quantification).

Avec cette hypothèse de champ moyen, plus quelques autres (stationnarité notamment), la théorie devient une théorie Hartree-Fock Relativiste (RHF), telle qu'exposée par exemple dans [Ser86, Bou87], ainsi que dans [Gre72, Mil72] bien que l'approche lagrangienne n'y soit pas utilisée explicitement. Bien que faisables en principe, les calculs sont relativement complexes et n'ont été effectués en pratique que dans les cas très particuliers des noyaux sphériques doublement magiques, voir par exemple [Bou87, Gre72, Mil72].

En physique nucléaire, de tels noyaux sont des exceptions. Si l'on peut certes beaucoup apprendre de leur structure, on ne peut s'en contenter. Pour pouvoir utiliser l'approche relativiste dans un contexte nucléaire réaliste, où les noyaux peuvent avoir un nombre impair de nucléons, où ils peuvent être déformés, en rotation ou en vibration, etc, il était donc nécessaire de faire quelques approximations supplémentaires. La théorie dite du champ moyen relativiste, Relativistic Mean Field (RMF) en anglais, représente l'effort le plus si-

gnificatif pour essayer de donner une description complètement relativiste du mouvement des nucléons dans les noyaux réalistes.

Dans cette première partie, nous allons donc brièvement rappeler les principales hypothèses sur lesquelles repose cete approche, ainsi que les équations que l'on est amené à résoudre. Nous verrons dans un premier temps à la section 1.1 les bases de la théorie, dans le cas des noyaux sphériques doublement magiques, où de nombreuses simplifications peuvent être appliquées eu égard aux différentes symétries existant dans ces cas. La section 1.3 traitera des extensions du modèle aux cas des noyaux en rotation d'une part et du traitement de l'appariement d'autre part. Nous ne présenterons aucun résultat, le lecteur éventuellement intéressé pouvant aisément se référer aux nombreuses publications parues à ce jour sur le sujet (entre autres : [Rin90] et [Lal99] pour les propriétés des états fondamentaux des noyaux pair-pair, [Afa96, Afa98] pour les noyaux en rotation, [Rin96] pour une revue complète, [Rei86, Sha93, Lal93] pour les diverses paramétrisations des interactions nucléon-méson, etc.)

1.1 LE LAGRANGIEN DE LA RMF

Cette partie s'appuie en grande partie sur les articles de revue de Serot et Walecka pour la partie hadrodynamique quantique QHD, c'est-à-dire principalement [Ser86, Ser92], ainsi que sur ceux de P. Reinhardt [Rei89] et P. Ring [Rin96] pour les aspects généraux spécifiques à la théorie RMF. Il nous a semblé important de détailler, peut-être plus qu'il n'eût été nécessaire, certains points clefs, et notamment toutes les hypothèses qui amènent une simplification des équations en raison de l'existence de symétries.

1.1.1 Quelques rappels élémentaires

Le point de départ de toute théorie des champs classiques est la donnée d'un certain nombre de champs φ_i dépendant des variables x^μ. A partir de ces champs, on construit une densité de lagrangien $\mathcal{L}(\varphi_i, \partial_\mu \varphi_i, t)$ qui dépend des champs, de leurs dérivées par rapport aux variables x^μ et du temps. L'*action* s'obtient ensuite en intégrant la densité de lagrangien sur le temps :

$$S = \int \mathcal{L}(\varphi_i, \partial_\mu \varphi_i, t) dt \tag{1.1}$$

Le principe de moindre action, ou principe de Hamilton, stipule que l'action doit être minimale, ce qui entraîne que la variation de l'action doit être nulle :

$$\delta S = 0 \tag{1.2}$$

Le calcul explicite de (1.2) conduit aux équations d'Euler-Lagrange[1] :

$$\boxed{\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi_i)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_i} = 0} \qquad \forall i \tag{1.3}$$

Ces équations sont exactement équivalentes au principe de moindre action. Une fois le lagrangien déterminé, elles fournissent les équations du mouvement régissant l'évolution du système.

La densité de lagrangien et les champs φ_i permettent également de construire un certain nombre d'autres grandeurs caractéristiques du système, dont l'intérêt dépend du problème traité. Le tenseur d'énergie-impulsion est donné par :

$$T^{\mu\nu} = -g^{\mu\nu}\mathcal{L} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi_i)} \partial^\nu \varphi_i \tag{1.4}$$

et satisfait l'équation de continuité :

$$\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0 \tag{1.5}$$

De cette équation, il découle que le 4-moment :

$$P^\nu = \int d^3\vec{r}\, T^{0\nu} \tag{1.6}$$

est conservé. L'énergie du système est la composante P^0, et correspond donc à l'intégrale sur l'espace de la densité d'Hamiltonien du système :

$$E = P^0 = \int d^3\vec{r}\, T^{00} = \int d^3\vec{r}\, \mathcal{H} \tag{1.7}$$

avec donc :

$$\boxed{\mathcal{H} = T^{00} = -\mathcal{L} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_i} \dot{\varphi}_i} \tag{1.8}$$

1.1.2 Principes de construction des lagrangiens

La construction des lagrangiens se fait en respectant un certain nombre de principes élémentaires. Un exposé très détaillé de cette construction dans le cadre de la physique hadronique se trouve dans [Sch62]. On trouvera également dans [Bel90] un exposé assez succint de divers aspects liés à l'équation de Dirac et à sa quantification, ainsi qu'aux théories de jauge.

Le principe fondamental à respecter est que la densité de lagrangien totale du système doit satisfaire la covariance relativiste, i.e. qu'il doit être invariant par transformation de

[1] **Dans la suite, on utilisera toujours, sauf mention contraire, les conventions de sommation d'Einstein : un indice deux fois répété sous-entend une sommation sur cet indice.**

Lorentz. En d'autres termes : le lagrangien est un scalaire de Lorentz. De plus, ce lagrangien se décompose de façon très générale en :

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_P + \mathcal{L}_C + \mathcal{L}_I \tag{1.9}$$

où $\mathcal{L}_P$ est la densité de lagrangien décrivant les particules libres (dans notre cas, les nucléons du noyau), $\mathcal{L}_C$ le lagrangien décrivant le champ (dans le cas de la théorie RMF, c'est le lagrangien des mésons), et $\mathcal{L}_I$ est le lagrangien d'interaction particule-champ.

Dans le cadre de la théorie RMF, les nucléons sont représentés par des bi-spineurs de Dirac, et le lagrangien $\mathcal{L}_P$ correspondant est :

$$\boxed{\mathcal{L}_P = \bar{\psi}\left(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m\right)\psi} \tag{1.10}$$

où ψ est un bi-spineur de Dirac, $\bar{\psi} = \psi^{\dagger}\gamma^{0}$ est son adjoint, les γ^{μ} sont les matrices de Dirac et m est la masse du nucléon. On peut vérifier facilement que cette expression est effectivement invariante par transformation de Lorentz. A partir des bi-spineurs et des matrices de Dirac, il est possible de construire des formes bilinéaires en ψ et $\bar{\psi}$ dont les propriétés de transformation de Lorentz aideront par la suite à déterminer les interactions méson-nucléon possibles. On peut ainsi montrer que :

- $\bar{\psi}\psi$ est un scalaire ;
- $\bar{\psi}\gamma^{5}\psi$ est un pseudoscalaire ;
- $\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi$ est un 4-vecteur (contravariant) ;
- $\bar{\psi}\gamma^{5}\gamma^{\mu}\psi$ est un 4-pseudovecteur (contravariant)[2].

De leur coté, les mésons peuvent se classifier en fonction de :

- leur masse ;
- leur caractère (pseudo)scalaire ou (pseudo)vectoriel ;
- leur charge. Un méson neutre sera représenté par un scalaire dans l'espace d'isospin (on l'appellera isoscalaire) tandis que des mésons chargés seront eux modélisés par un multiplet d'isospin (= un vecteur dans l'espace d'isospin, on l'appellera donc isovectoriel).

Les champs mésoniques interviennent sous deux formes différentes dans le lagrangien total : d'une part sous la forme d'un terme de champ libre $\mathcal{L}_C$, qui représente la densité d'énergie du champ en l'absence d'interaction, d'autre part sous celle d'un terme d'interaction $\mathcal{L}_I$. Avant de discuter la structure du terme d'interaction, donnons brièvement les règles de formation du terme de champ libre. Puisque ce dernier décrit la propagation d'un méson libre, il doit également être invariant par transformation de Lorentz, autrement dit ce doit être un scalaire. Deux cas sont à distinguer selon que le méson est scalaire ou vectoriel :

- s'il est scalaire, le terme de champ libre sera de la forme $\partial_{\mu}\phi\,\partial^{\mu}\phi$;

[2]**Rappelons qu'un pseudoscalaire est invariant sous l'effet des transformations de Lorentz, mais change de signe sous l'action de l'opérateur d'inversion d'espace (parité négative). De façon similaire, un pseudovecteur suit les règles de transformation des vecteurs sous l'effet des transformation de Lorentz, et au signe près sous celui de l'inversion d'espace.**

- s'il est vectoriel, V_μ, il est nécessaire de définir au préalable un tenseur de champ $F_{\mu\nu}$ par :

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu \tag{1.11}$$

  et la densité d'énergie du champ libre prendra alors la forme : $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$. Cette construction qui peut apparaître inutilement compliquée n'a en fait pour but que de satisfaire la covariance relativiste en faisant intervenir un nombre minimal de termes dérivés.

Par ailleurs, pour les mésons massifs, il faut ajouter un terme scalaire proportionnel à la masse de la forme : $m\phi^2$ pour les mésons scalaires et $mV_\mu V^\mu$ pour les mésons vectoriels.

1.1.3 lagrangiens d'interaction

La covariance relativiste impose que la densité de lagrangien finale soit invariante par transformation de Lorentz ce qui contraint de façon très précise la forme des interactions nucléon-méson. En effet, pour former un scalaire on ne peut coupler un méson neutre scalaire ϕ qu'avec un terme nucléonique également scalaire. Le seul couplage possible est donc de la forme :

$$\mathcal{L}_I = g\,\bar{\psi}\psi\,\phi \tag{1.12}$$

De même, un méson vectoriel V_μ ne peut se coupler qu'avec un terme nucléonique également vectoriel, de sorte que le produit soit un scalaire. On ne peut donc avoir qu'un couplage de la forme :

$$\mathcal{L}_I = g\,\bar{\psi}\,\gamma^\mu\psi\,V_\mu \tag{1.13}$$

Si de surcroît, on souhaite obtenir une théorie invariante par symétrie d'isospin (ce qui est le cas des forces méson-nucléon), on imposera que le lagrangien soit également un isoscalaire, i.e. un scalaire dans l'espace d'isospin. Cette condition s'obtiendra en considérant des produits du type $\vec{\tau}\cdot\vec{M}$ où $\vec{M}$ est le champ mésonique isovectoriel et $\vec{\tau}$ est l'opérateur d'isospin.

Pour être tout à fait précis, il existe d'autre formes de couplage méson-nucléon que ceux mentionnés ci-dessus. Les *couplages dérivatifs* font intervenir les dérivées des champs mésoniques. Par exemple :

$$g\,\bar{\psi}\,\gamma^\mu\psi\,\frac{\partial\phi}{\partial x^\mu} \tag{1.14}$$

est un couplage dérivatif avec un champ mésonique neutre. Dans le cas d'un champ mésonique vectoriel (par exemple les mésons ω ou ρ, voir paragraphe suivant), le terme de couplage comprendra des expressions du type $\partial\phi_\mu/\partial x^\nu$. Il paraît donc assez naturel de faire intervenir les quantités $F^{\mu\nu}$ définies par la relation (1.11). Le terme de couplage prendra alors la forme suivante :

$$g\,\bar{\psi}\,\sigma_{\mu\nu}\psi\;F^{\mu\nu} \tag{1.15}$$

où $\sigma_{\mu\nu} = [\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ est le commutateur des matrices de Dirac, et l'on parlera de *couplage tenseur*. L'inconvénient majeur des couplages dérivatifs vis-à-vis de la théorie des pertubations est qu'il produisent des termes divergents : en d'autre termes, une théorie *quantique* des champs contenant des couplages dérivatifs n'est pas renormalisable. Pourtant, on sait qu'il existe une partie tensorielle dans l'interaction nucléon-nucléon. Nous reviendrons sur ce point dans la section 1.1.6.

1.1.4 Choix des mésons

Dans tous les articles de revue traitant des bases conceptuelles de la théorie RMF se trouve une discussion plus ou moins détaillée du nombre de mésons à incorporer dans la théorie, du rôle de ceux-ci ainsi que de leurs caractéristiques. En particulier, on trouvera dans [Rei89] et dans [Rin96] un bref descriptif des principaux mésons utilisés. Dans [Ser86, Ser92, Ser97] sont en revanche présentés de façon plus rigoureuse les différents ingrédients d'une « hadrodynamique quantique » (QHD) respectant les préceptes d'une théorie quantique des champs renormalisable, et le rôle des mésons nécessaires y est discuté en détail.

Dans la théorie RMF, les champs φ_i de la section 1.1.1 seront donnés d'une part par les spineurs des nucléons $\psi_i(x^\mu, \tau)$, où l'index i fait référence au nucléon numéro i et τ représente la dépendance en isospin, d'autre part par les champs des mésons. En principe, un grand nombre de mésons est susceptible d'être pris en compte dans la théorie, pourvu qu'il vérifient les régles énoncées à la section précédente. Chaque méson sera caractérisé par les nombres quantiques intrinsèques (J, T, P) respectivement son moment angulaire total, son isospin et sa parité. A basse énergie, on s'attend à ce que les mésons de plus bas J et T dominent l'interaction nucléon-nucléon. Il s'ensuit que l'on va prioritairement ne tenir compte que des mésons *scalaires* $(J = 0)$ ou *vectoriels* $(J = 1)$, ainsi que des mésons *isoscalaires* $(T = 0)$ et *isovectoriels* $(T = 1)$ [Rei89]. Un premier choix de mésons à inclure dans la théorie pourrait donc être :

- ω : champ vectoriel isoscalaire $\Omega_\nu(x^\mu)$ $(J = 1, T = 0, P = -1)$;
- ρ : champ vectoriel isovecteur $\vec{R}_\nu(x^\mu)$ $(J = 1, T = 1, P = +1)$. Le champ $\vec{R}_\nu(x^\mu)$ est « doublement » vectoriel : la flèche représente le caractère vectoriel dans l'espace d'isospin, tandis que l'indice ν fait référence à la composante numéro ν dans l'espace-temps normal.
- γ : champ vectoriel sans masse $A_\nu(x^\mu)$ $(J = 0, T = 0, P = +1)$, le photon.

Jusqu'ici, il n'a pas été fait mention du pion π qui est certainement le méson le plus important. Ses nombres quantiques sont $J = 0$, $T = 1$ et $P = -1$, et il est relié de façon très étroite aux propriétés chirales de la chromodynamique quantique. Cependant, comme il emporte une parité négative, le champ moyen correspondant (c'est-à-dire la valeur moyenne du champ ionique prise sur la fonction d'onde du système) brise la symétrie par rapport à la parité. Or il a été vérifié, avec une très grande précision, que le champ moyen dans les noyaux atomiques réalistes conserve la parité. Par conséquent, les nucléons ne peuvent interagir en échangeant un nombre impair de pions. Par contre, rien n'empêche *a priori* qu'ils échangent un nombre pair de pions, puisqu'en ce cas, la parité sera bien conservée. Cependant, la construction d'un champ moyen à partir de paires de pions, quoique possible

en principe, est une opération qui complique significativement le modèle, et il a été jugé préférable d'introduire à la place le méson « phénoménologique » (c'est-à-dire qui n'existe pas dans la nature) σ qui puisse tenir compte d'éventuelles résonances à deux pions (voir la section 1.1.6 pour une discussion du caractère effectif de l'approche RMF).

Chacun des mésons qui sera pris en compte dans le modèle final permet d'expliquer certaines des caractéristiques de la force nucléon-nucléon. Ainsi l'attraction inter-nucléons est-elle due à l'échange d'un méson scalaire, le méson σ. De la même façon, le méson ω (un méson vectoriel) rends compte de la répulsion que subissent deux nucléons à courte distance l'un de l'autre, rôle tenu par la composante temporelle (« time-like ») du champ ω. Le photon est naturellement indispensable pour rendre compte du potentiel coulombien. Enfin, la dépendance en isospin de la force nucléaire sera modélisée par le méson ρ.

Considérer l'interaction nucléon-nucléon comme se faisant via l'échange de quelques mésons bien choisis représente naturellement une approximation de la réalité : d'abord parce que l'interaction nucléon-nucléon est une conséquence de l'interaction forte qui s'exerce entre les quarks, et qui est gouvernée par les règles de la chromodynamique quantique, ensuite parce que parmi les quelques 300 mésons dont l'existence a été prouvée expérimentalement, seuls quelques uns (moins de 5!) sont utilisés pour construire la théorie.

1.1.5 lagrangien de la théorie RMF

A la section précédente, nous avons évoqué quelques aspects élémentaires de la théorie des champs classiques, et nous avons déterminé quels étaient les principaux ingrédients physiques de la théorie RMF. En suivant les règles rappelées à cette occasion, on peut écrire le lagrangien de la RMF sous la forme :

$$\boxed{\mathcal{L}_{RMF} = \mathcal{L}_P + \mathcal{L}_C + \mathcal{L}_I} \tag{1.16}$$

où chacun des trois termes s'écrit [Rin96] :

$$\mathcal{L}_P = \bar{\psi}\left(i\,\gamma^{\,\mu}\,\partial_\mu - m\right)\psi \tag{1.17}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_C &= \frac{1}{2}\left(\partial_\mu\sigma\,\partial^\mu\sigma - m_\sigma^2\sigma^2\right) - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\ &- \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} - m_\omega^2\,\omega_\mu\omega^{\,\nu}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\vec{R}_{\mu\nu}\vec{R}^{\mu\nu} - m_\rho^2\,\vec{\rho}_\mu\vec{\rho}^{\,\nu}\right)\end{aligned} \tag{1.18}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_I &= -g_\sigma\bar{\psi}\,\sigma\,\psi - g_\omega\bar{\psi}\,\gamma_\mu\omega^{\,\mu}\,\psi - g_\rho\bar{\psi}\,\gamma_\mu\vec{\tau}.\vec{\rho}^{\,\mu}\,\psi \\ &\quad -e\bar{\psi}\,\gamma_\mu A^\mu\,\psi - U(\sigma)\end{aligned} \tag{1.19}$$

m est la masse du nucléon et m_σ, m_π, m_ω et m_ρ sont les masses des mésons ; g_σ, g_π, g_ω et g_ρ sont les constantes de couplage méson-nucléon (e est la charge électrique élémentaire, qui est aussi dans ce modèle la constante de couplage avec le champ électromagnétique[3]). Les tenseurs de champ pour les mésons ω, ρ et pour le photon sont donnés respectivement par :

[3] **Dans toute cette partie, on travaille dans le système d'unités $\hbar = c = 1$.**

$$\begin{aligned} \Omega_{\mu\nu} &= \partial_\mu \omega_\nu - \partial_\nu \omega_\mu \quad (1.20) \\ \vec{R}_{\mu\nu} &= \partial_\mu \vec{\rho}_\nu - \partial_\nu \vec{\rho}_\mu \quad (1.21) \\ F_{\mu\nu} &= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (1.22) \end{aligned}$$

Comme indiqué précédemment, la flèche indique un vecteur dans l'espace d'isospin.

1.1.6 Discussion - Notion de lagrangien effectif

Si l'on examine de près la forme du lagrangien (1.16), on s'aperçoit qu'il dépend de 10 paramètres libres : les quatre masses des quatre mésons pris en compte, ainsi que les quatre constantes de couplage correspondantes, plus les deux paramètres du potentiel non-linéaire. En toute rigueur, on s'attend à ce que les masses des mésons soient égales à leur valeur expérimentale, lorsque ces dernières ont été déterminées (par exemple pour le méson ω). Cependant, dans l'esprit de leurs fondateurs, la théorie du champ moyen relativiste était une théorie dite *effective* : en ce sens, on s'accorde une certaine liberté dans le choix de la valeur des paramètres. La motivation principale est d'obtenir une théorie la plus *efficace* possible, même si cette efficacité s'obtient au prix d'un certain manque de rigueur *stricto sensu*. L'argument pourrait sembler insuffisant si l'on ne devait également remarquer que les théories effectives interviennent presque toujours lorsque le problème posé est tellement complexe qu'il en devient absolument impossible à résoudre : respecter à tout prix les contraintes de la théorie s'avèrerait une démarche plus stérile qu'autre chose. Par exemple, dans les théories Hartree-Fock classiques, il est abondamment fait usage d'interactions effectives, qui simulent l'interaction réelle nucléon-nucléon dans le milieu nucléaire. Des calculs plus rigoureux devraient faire appel aux développements en perturbation (du type Brueckner-Hartree-Fock), mais ces derniers sont difficiles à mettre en oeuvre et leur pouvoir prédictif s'en trouve affaibli d'autant[Rin80].

La situation est analogue dans une théorie quantique et relativiste des champs : dans le lagrangien (1.16), chacun des termes de champ devrait, selon les règles de la seconde quantification, être un opérateur. Malheureusement, il est impossible dans l'état actuel de nos connaissances de résoudre l'équation du mouvement (i.e. appliquer le principe de moindre action et résoudre toutes les équations qui en découlent) dans ce cas, car les techniques nécessaires font appel aux développements perturbatifs [Ser92]. Or les constantes de couplage mésons-nucléons sont trop fortes pour que ces approches restent valides. Pour cette raison, on remplace les opérateurs des divers champs mésoniques par des nombres complexes, en fait des fonctions dépendant de $\vec{r}$ et t. Cette approximation conduit aux théorie Hartree-Fock relativistes (RHF) [Bou87]. Dans cette approche, les champs mésoniques sont des fonctions, mais les champs nucléoniques restent des opérateurs. Les contributions venant des termes d'échange (termes de Fock) demeurent néanmoins assez complexes [Bro78, Bou87] : en particulier, les effets de retard des champs mésoniques entraîne que les potentiels dépendent de l'état individuel des nucléons.

Il est donc souvent procédé à des approximations supplémentaires. L'une des plus courantes est l'hypothèse de *stationnarité* : la dépendance en temps des champs mésoniques est négligée, et les bi-spineurs ont une dépendance temporelle en $\exp(iE_\alpha t)$. Cette approxima-

tion n'a pas d'influence sur le terme Hartree (terme direct), mais est équivalente à négliger les effets de retard dans la propagation des mésons. Par voie de conséquence, on supprime de la sorte cette dépendance des potentiels par rapport aux états individuels.

Une autre approximation consiste à négliger l'apport des anti-particules. Il est bien connu en effet que l'équation de Dirac admet des solutions avec énergie positive (les particules) et avec énergie négative (les anti-particules). Ces anti-particules interviennent naturellement dans tous les modèles RHF, par exemple dans l'expression des bi-spineurs $\psi(x^\mu, t)$:

$$\psi(x^\mu, t) = \sum_\alpha f_\alpha(x^\mu)\, e^{-iE_\alpha t} b_\alpha + g_\alpha(x^\mu)\, e^{+iE'_\alpha t} d^\dagger_\alpha$$

les $\{b_\alpha, b^\dagger_\alpha\}$ sont les opérateurs de destruction/création de particules tandis que les $\{d_\alpha, d^\dagger_\alpha\}$ sont les opérateurs équivalents pour les anti-particules. Négliger ces termes revient à travailler dans l'approximation « no-sea », i.e. que la mer de Dirac (formée par toutes les anti-particules) est négligée. A l'aide de ces deux approximations, il devient possible de résoudre les équations du mouvement avec le lagrangien (1.16) selon une procédure Hartree-Fock, mais les calculs n'ont été faits jusqu'ici de façon intensive que dans les noyaux sphériques doublement magiques [Mil72, Gre72, Bou87]. Quelques tentatives ont également été faites dans les noyaux déformés légers (proches des noyaux sphériques doublement magiques) [Zha91, Zha94].

A la lumière de ces quelques remarques, il apparaît évident que la plupart des théories QHD ou RHF, en leur état actuel, ne peuvent pas être appliquées dans la plupart des problématiques actuelles de la physique nucléaire à basse énergie. La raison principale en est l'extrême complexité des équations à résoudre, qui ne peuvent l'être que dans des cas très précis, tels que la matière nucléaire infinie ou à la rigueur les noyaux sphériques doublement magiques. C'est l'un des avantages certains de l'approche RMF que de proposer un modèle inspiré par les théories QHD, mais suffisamment simplifié pour qu'il puisse être utilisable dans de nombreuses situations concrètes et cela de façon rapide et efficace.

En effet, dans le modèle RMF, on utilise le lagrangien (1.16) en faisant les approximations suivantes :

- les champs sont tous des champs classiques, c'est-à-dire des fonctions dépendant de $\vec{r}$ et de t ;
- les contributions des anti-particules aux courants baryoniques (voir plus loin, équation (1.32)) sont négligées ;
- les bi-spineurs ont une dépendance temporelle en $\exp(iE_\alpha t)$ et les mésons ne dépendent pas du temps (stationnarité) ;
- les termes d'échange sont négligés (termes de Fock) ;
- les termes d'interaction tenseur (ceux de la forme $g\,\bar{\psi}\,\sigma_{\mu\nu}\psi\,F^{\mu\nu}$) sont négligés ;
- les constantes de couplage ainsi que certaines des masses des mésons sont des paramètres libres, et sont donc ajustées sur les propriétés expérimentales des noyaux atomiques (selon une procédure sur laquelle nous reviendrons).

Pour toutes ces raisons, l'approche RMF ne peut être considérée comme une théorie fondamentale des noyaux atomiques, mais plutôt comme une théorie effective. En d'autres

termes, il s'agit d'un outil, pratique et efficace, possédant un fort pouvoir prédictif, et qui a l'immense avantage de reposer sur une théorie sous-jacente relativiste. Néanmoins, il peut être pertinent de remarquer dès maintenant quelques unes des faiblesses du modèle. Si dans la liste précédente, la plupart des approximations faites n'ont pour but que d'obtenir un modèle utilisable dans les diverses situations rencontrées en physique du noyau, ce qui est entièrement justifié, deux d'entre elles sont plus difficiles à défendre :

- négliger les termes d'échange simplifie naturellement grandement les équations à résoudre, mais il n'y a pas véritablement de raisons autres que techniques de le faire. Il pourrait être intéressant d'estimer l'influence des termes d'échange sur certaines propriétés des noyaux. Une telle comparaison a déjà été faite pour quelques noyaux statiques, sphériques, et doublement magiques [Ser86, Bou87], mais de telles études manquent pour les noyaux déformés, par exemple.
- de la même façon, négliger l'interaction tensorielle ne se justifie plus vraiment (en dehors d'arguments pratiques) puisque dans la théorie RMF, par définition, les champs sont des champs classiques. La compatibilité avec la renormalisation n'est plus aussi nécessaire, et l'on peut par conséquent envisager de rajouter des couplages dérivatifs dans le lagrangien (1.16). La principale motivation serait de reproduire la composante tensorielle de l'interaction nucléon-nucléon libre.

1.1.7 Le terme de couplage non-linéaire

Le lecteur n'aura pas manqué de remarquer dans l'expression (1.16) la présence dans le lagrangien d'interaction d'un terme $U(\sigma)$ sur lequel rien n'a encore été dit. En dehors de ce terme, le lagrangien de la RMF ne contient que des termes linéaires en champs (que ce soit en champs nucléoniques ou mésoniques). Dans sa version dite de « couplage minimal », c'est-à-dire avec uniquement un méson scalaire σ et un méson vecteur ω, il correspond au lagangien du modèle de Walecka originel [Ser86]. Ce modèle linéaire est capable de donner une description qualitative correcte des noyaux : en particulier, il décrit correctement la saturation nucléaire. En ajustant convenablement les constantes de couplage sur des propriétés expérimentales telles que l'énergie de liaison ou le rayon carré moyen, on obtient une valeur correcte de l'intensité du couplage spin-orbite (« spin-orbit splitting »). Cependant, des propriétés essentielles telles que l'incompressibilité de la matière nucléaire ou les propriétés de surface ne peuvent être décrites correctement avec ce modèle simple. A l'instar des théories Hartree-Fock classiques, une sorte de dépendance en densité doit d'une façon ou d'une autre être incorporée dans le modèle avant d'aborder la description de noyaux atomiques réalistes. La façon la plus simple et la plus pratique de faire cela consiste à inclure dans le lagrangien effectif un terme d'autocouplage du méson σ, par analogie avec les modèles dits en ϕ^3 et ϕ^4 de la théorie quantique des champs. Ainsi le lagrangien d'auto-interaction s'écrira :

$$U(\sigma) = \frac{1}{3} g_2 \sigma^3 + \frac{1}{4} g_3 \sigma^4 \tag{1.23}$$

Cette forme de lagrangien garantit que le modèle adopté, dans sa version quantique, reste renormalisable. Dans sa version champ-moyen, c'est-à dire lorsque les champs sont des champs classiques et non des opérateurs, tenir compte du « potentiel » (1.23) améliore grandement la capacité prédictive du modèle.

1.2 LES EQUATION DU CHAMP MOYEN RELATIVISTE

Nous avons présenté dans les paragraphes précédents la forme du lagrangien de la théorie RMF en détaillant les divers champs mésoniques qui y sont inclus. Dans le paragraphe 1.1.6, nous avons resitué la théorie RMF dans le cadre plus général de l'hadrodynamique quantique et discuté les différentes approximations qui sont faites dans le but d'obtenir un modèle relativiste capable d'être appliqué dans les situations courantes de la physique nucléaire. Nous allons maintenant introduire les équations qui dérivent de l'application du principe de moindre action sur le lagrangien 1.16.

1.2.1 Equations générales

Rappelons une fois encore que nous ne nous traiterons ici que des champs classiques, i.e. non quantifiés. Pour déduire les équations du mouvement à partir du lagrangien (1.16), il « suffit » d'appliquer le principe de moindre action vu à la section 1.1.1. Il est inutile ici de détailler les calculs, qui sont assez longs et ne présentent pas d'intérêt en soi, contentons-nous des résultats. L'équation de propagation des nucléons s'écrit :

$$\boxed{\{\gamma_\mu \left(i\,\partial^\mu + V^\mu\right) + m + S\}\,\psi_i = 0} \tag{1.24}$$

Il s'agit là de l'équation de Dirac pour des nucléons en présence des potentiels :

$$S = g_\sigma \sigma \tag{1.25}$$
$$V^\mu = g_\omega \omega^\mu + g_\rho \vec{\tau}.\vec{\rho}^{\,\mu} + eA^\mu \tag{1.26}$$

Il va de soi que toutes ces expressions dépendent de la position $\vec{r}$ et du temps t.

Pour les mésons, les équations de propagation sont l'équation de Klein-Gordon pour les mésons scalaire et pseudoscalaire, et l'équation de Proca pour les mésons vectoriels. L'utilisation de la jauge de Lorentz pour cette dernière permet de la transformer en équation de Klein-Gordon :

$$\{\Box + m_\sigma\}\,\sigma = -g_\sigma \rho_s - g_2\sigma^2 - g_3\sigma^3 \tag{1.27}$$
$$\{\Box + m_\omega\}\,\omega^\mu = g_\omega j^\mu \tag{1.28}$$
$$\{\Box + m_\rho\}\,\vec{\rho}^{\,\mu} = g_\omega \vec{j}^{\,\mu} \tag{1.29}$$
$$\Box A^\mu = e j_c^\mu \tag{1.30}$$

Dans ces équations le $\Box$ signifie naturellement l'opérateur d'Alembertien. Les termes de source, qu'il soient scalaires (les densités) ou vectoriels (les courants), s'écrivent en fonction des bi-spineurs et des matrices de Dirac. La densité scalaire n'est autre que la densité classique des nucléons à l'intérieur du noyau :

$$\rho_s = \sum_{i=1}^{A} \bar{\psi}_i\,\psi_i \tag{1.31}$$

Le courant baryonique (vecteur isoscalaire) s'écrit :

$$j^{\mu} = \sum_{i=1}^{A} \bar{\psi}_i \, \gamma^{\mu} \, \psi_i \tag{1.32}$$

l'isocourant (vecteur isovecteur) est :

$$\vec{j}^{\mu} = \sum_{i=1}^{A} \bar{\psi}_i \, \gamma^{\mu} \vec{\tau} \, \psi_i \tag{1.33}$$

et enfin le courant associé au champ électromagnétique a l'expression classique :

$$j_c^{\mu} = \sum_{i=1}^{A} \bar{\psi}_i \frac{1}{2} \left(1 + \tau_3\right) \gamma^{\mu} \, \psi_i \tag{1.34}$$

Il n'est peut-être pas inutile de rappeler que, puisque la théorie RMF satisfait par construction au principe de relativité restreinte, les vecteurs (attention, pas les isovecteurs) dont il est question ici ou là dans le texte doivent être entendus comme des quadrivecteurs dans l'espace-temps de Minkowski. En particulier, le vecteur courant baryonique j^{μ} peut s'écrire comme :

$$j^{\mu} = (\rho_v, \vec{j})$$

où ρ_v est la densité normale de nucléons. Ce ρ_v est la composante temporelle du quadrivecteur et ne doit pas être confondu avec ρ_s, la densité scalaire (1.31).

1.2.2 Equations stationnaires

On peut simplifier un petit peu les équations présentées à la section précédente en utilisant quelques approximations. Certaines ont d'ailleurs déjà été présentées lors de la discussion sur le lagrangien effectif. On supposera donc que :

- les champs de mésons sont indépendants du temps et les bi-spineurs ont une dépendance temporelle en $\exp(i\varepsilon_i t)$. C'est l'hypothèse de *stationnarité*.
- l'état fondamental des noyaux sphériques, qui nous intéresse pour l'instant conserve la symétrie par renversement du temps : il s'ensuit que toutes les composantes spatiales des courants s'annulent (voir paragraphe suivant) ;
- les états nucléoniques sont des états purs proton ou neutron (si l'on préfère : les états individuels sont états propres de la troisième composante de l'opérateur d'isospin, $\hat{\tau}_3$, avec la valeur propre $\pm 1/2$). Il s'ensuit que les isovecteurs se réduisent à leur troisième composante.

Dans ces conditions, et en notant $\vec{p} = -i\vec{\nabla}$, nous obtenons les équations stationnaires de la RMF :

$$\left\{\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta(m + S) + V^0\right\} \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \tag{1.35}$$

$$\left\{\Delta + m_\sigma\right\} \sigma = -g_\sigma \rho_s - g_2 \sigma^2 - g_3 \sigma^3 \tag{1.36}$$

$$\left\{\Delta + m_\omega\right\} \omega^0 = g_\omega \rho_v \tag{1.37}$$

$$\left\{\Delta + m_\rho\right\} \rho^0 = g_\omega \rho_3 \tag{1.38}$$

$$\Delta \rho_c^0 = e \rho_c \tag{1.39}$$

Les termes de source se simplifient grandement puisque toutes les composantes spatiales s'annullent. On obtient donc :

$$\rho_s = \sum_{i=1}^{A} \bar{\psi}_i \psi_i \tag{1.40}$$

$$\rho_v = \sum_{i=1}^{A} \psi_i^\dagger \psi_i \tag{1.41}$$

$$\rho_3 = \sum_{i=1}^{A} \psi_i^\dagger \tau_3 \psi_i \tag{1.42}$$

$$\rho_c = \sum_{i=1}^{A} \psi_i^\dagger \frac{1}{2}(1+\tau_3)\,\psi_i \tag{1.43}$$

Dans ces équations, $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ où $\psi^\dagger$ est le bi-spineur adjoint de ψ.

Dans l'équation de Dirac se trouvent deux potentiels, respectivement appelés potentiel « vecteur » :

$$\boxed{V^0(\vec{r}) = g_\omega\, \omega^{\,0}(\vec{r}) + g_\rho\, \tau_3\, \rho_3^0(\vec{r}) + eA^0(\vec{r})} \tag{1.44}$$

et potentiel « scalaire » :

$$\boxed{S(\vec{r}) = g_\sigma\, \sigma(\vec{r})} \tag{1.45}$$

sur lesquels nous reviendrons plus longuement dans la deuxième partie de cette thèse. Par ailleurs, il peut être intéressant de montrer comment passer de l'équation de Dirac générale (1.24) à l'équation de Dirac stationnaire (1.35) : cette démarche nous servira dans le troisième chapitre, pour dériver le modèle de cranking dans l'approche RMF.

L'équation de Dirac générale s'écrit :

$$\{\gamma_\mu (i\,\partial^\mu + V^\mu) + m + S\}\,\psi_i = 0 \tag{1.46}$$

Exprimons les quadri-vecteurs :

$$\partial^\mu = (\partial_t, -\vec{\nabla}) \tag{1.47}$$

$$V^\mu = (V^0, \vec{V}) \tag{1.48}$$

$$\gamma_\mu = (\beta, \beta\,\vec{\alpha}) \tag{1.49}$$

L'équation de Dirac se réécrit :

$$\left\{ i\beta\frac{\partial}{\partial t} + \beta\, V^0 - \beta\,\vec{\alpha}\cdot(i\vec{\nabla} - \vec{V}) + m + S \right\} \psi_i(\vec{r}, t) = 0 \tag{1.50}$$

Utilisons maintenant l'hypothèse de stationnarité :

$$\psi_i(\vec{r}, t) = e^{i\varepsilon_i t}\phi_i(\vec{r}) \tag{1.51}$$

on en déduit :

$$i\beta\frac{\partial\psi_i}{\partial t}(\vec{r},t) = -\varepsilon_i\beta\psi_i(\vec{r},t) \tag{1.52}$$

ce qui nous conduit naturellement à :

$$\left\{-\beta\,\vec{\alpha}\cdot(i\vec{\nabla}-\vec{V}) + \beta\,V^0 + m + S\right\}\psi_i(\vec{r},t) = \varepsilon_i\beta\psi_i(\vec{r},t) \tag{1.53}$$

et on peut maintenant simplifier par $\exp(i\varepsilon_i t)$ puisque l'opérateur de gauche ne dépend plus du temps. En multipliant à gauche par β, et en utilisant à nouveau la notation $\vec{p} = -i\vec{\nabla}$, on obtient :

$$\boxed{\left\{\vec{alpha}\cdot(\vec{p}+\vec{V}) + V^0 + \beta(m+S)\right\}\phi_i(\vec{r},t) = \varepsilon_i\phi_i(\vec{r},t)} \tag{1.54}$$

Dans le cas des noyaux statiques, la symétrie de renversement du temps est conservée, ce qui entraîne que les composantes spatiales des mésons s'annullent (donc ici le terme $\vec{\alpha}\cdot\vec{V}$). Mais pour les noyaux en rotation, cette symétrie est brisée, et l'hamiltonien à considérer doit donc inclure les composantes spatiales des mésons.

1.2.3 Résolution des équations de la RMF

Les équations (1.35)-(1.39) et (1.40)-(1.43) forment un ensemble d'équations différentielles non-linéaires (à cause des deux termes en σ^2 et σ^3) couplées. La résolution de ces équations se fait selon une procédure auto-cohérente (i.e. en anglais « self-consistent ») : on part d'un choix initial pour les potentiels V et S, ce qui permet de résoudre l'équation de Dirac, et donc d'obtenir une première expression des bi-spineurs ψ. Ceux-ci permettent de calculer les termes de source (1.40)-(1.43), qui à leur tour permettent de résoudre les équations de Klein-Gordon pour les mésons, ce qui fournit un deuxième jeu de potentiels V et S avec lequel résoudre l'équation de Dirac, etc. La procédure est répétée jusqu'à ce que la convergence soit obtenue. Je ne m'étendrais pas sur les détails techniques de la résolution d'un tel système d'équations, le lecteur intéressé pourra avantageusement consulter par exemple [Rin90].

1.3 EXTENSIONS DE LA THÉORIE RMF

Nous avons jusqu'ici présenté la théorie RMF dans le cadre restrictif des noyaux statiques (qu'il soient sphériques ou déformés, pair-pair ou impair-pair), ainsi que dans l'hypothèse de champ moyen. Pour l'instant, nous ne pouvons pas appliquer ce formalisme aux noyaux en rotation par exemple,noyaux qui sont pourtant riches en données expérimentales très variées, et nous ne pouvons pas plus tenir compte des corrélations d'appariement (qui représentent la correction la plus importante au champ moyen). Il serait donc intéressant de réfléchir à d'éventuelles extensions du modèle pour inclure la description de ces phénomènes.

La principale difficulté que l'on rencontre alors vient de ce que la symétrie par renversement du temps n'est plus conservée lorsque la fréquence de rotation $\omega \neq 0$. Cela a pour

conséquence que les équations à résoudre se compliquent notablement, les composantes spatiales des mésons devant être prises en compte.

1.3.1 Modèle CRMF - Description des noyaux en rotation

La théorie du champ moyen relativiste a été étendue au cas des noyaux tournants, *via* l'approximation de cranking, qui sera présentée plus en détail au chapitre 4.1.2. Dans cette optique, le passage de RMF vers CRMF se fait en transformant le lagrangien effectif (1.16) vers le référentiel accéléré lié au noyau en rotation à la vitesse Ω. On suppose que la rotation du noyau se fait autour d'un axe Oy perpendiculaire à l'axe de symétrie du noyau (voir la partie 4.1.2 pour une présentation générale du modèle de cranking et ses principales hypothèses). Comme le référentiel tournant n'est pas galiléen mais accéléré, la transformation du lagrangien (1.16) nécessite de faire appel à des techniques de relativité générale [Koe89].

Les objets qui constituent le lagrangien et que nous devons transformer sont de plusieurs types :

- les coordonnées x^μ ;
- le tenseur métrique $g^{\mu\nu}$;
- les champs mésoniques ω^μ, $\vec{\rho}^\mu$ et A^μ ;
- les spineurs ψ_i ;
- les matrices de Dirac γ^μ.

Chacun de ces objets obéit à des règles de transformations bien précises. Nous n'avons pas l'intention ici de donner une présentation exhaustive de ces règles de transformation, le lecteur intéressé est renvoyé à [Koe89] et aux références qui y sont mentionnées.

Le nouveau lagrangien ressemble au lagrangien (1.16) où toutes les quantités seraient « tildées », et la dérivée simple ∂^μ remplacée par la dérivée covariante D^μ qui incorpore la métrique du référentiel tournant. L'application du principe de moindre action sur ce lagrangien conduit à l'ensemble d'équations (nous avons omis par souci de simplicité les équations concernant le méson ρ) :

$$\left\{-i\,\vec{\alpha}\cdot(\vec{\nabla}-\vec{V})+V^0+\beta(m+S)-\vec{\Omega}\cdot\vec{J}\right\}\psi_i = \mathcal{E}_i\psi_i \tag{1.55}$$

$$\left\{-\Delta+m_\sigma+(\vec{\Omega}\cdot\vec{L})^2\right\}\tilde{\sigma} = -g_\sigma\tilde{\rho}_s-g_2\tilde{\sigma}^2-g_3\tilde{\sigma}^3 \tag{1.56}$$

$$\left\{-\Delta+m_\omega+(\vec{\Omega}\cdot\vec{L})^2\right\}\tilde{\omega}^0 = g_\omega\tilde{\rho}_v \tag{1.57}$$

$$\left\{-\Delta+m_\omega+(\vec{\Omega}\cdot\vec{J})^2\right\}\tilde{\vec{\omega}} = g_\omega\tilde{\vec{j}} \tag{1.58}$$

Ces équations ressemblent beaucoup à l'ensemble d'équations (1.35-(1.39), les différences étant les suivantes :

- dans l'équation de Dirac, le terme $\vec{V}$ qui représente en fait la somme des composantes spatiales des mésons vecteurs ne s'annule pas car la symétrie par renversement du

temps n'est pas conservée[4].

- des termes proportionnels à la fréquence de rotation se rajoutent, à la fois dans les équations de Klein-Gordon pour les mésons et dans l'équation de Dirac.

Les différents opérateurs de moment angulaire intervenant dans les équations de Dirac et de Klein-Gordon n'ont pas la même signification selon que l'on a affaire aux nucléons (des fermions de spin 1/2) ou aux mésons (des bosons de spin entier $0, 1, \ldots$). En effet, les *représentations* associées à l'opérateur individuel de moment angulaire total (incluant le spin intrinsèque donc) ont la dimension $2s+1$, où s est le spin intrinsèque de la particule considérée. Pour des bosons de spin 1, les matrices $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$ seront donc des matrices 3×3, tandis que pour des spineurs, des matrices 2×2 (et donc 4×4 pour des bi-spineurs).

La théorie CRMF est présentée dans [Koe89]. Dans cet article, les auteurs ont dans un premier temps négligé l'influence du terme $\vec{\alpha} \cdot \vec{V}$, appelé *magnétisme nucléaire*, dans l'équation de Dirac, et leurs résultats n'étaient pas satisfaisants. Dans [Afa96], une étude de l'influence de cette contribution, notamment sur les moments d'inertie, a été présentée pour la première fois. Les auteurs ont analysé plus particulièrement la région de masse $A \sim 150$, et ils ont constaté que sans ce terme de magnétisme nucléaire, les moments dynamiques $\mathfrak{J}^{(2)}$ étaient 20 à 30 % plus faibles qu'indiqué par l'expérience. En tenant compte de ce terme, l'accord obtenu était comparable avec les théories non-relativistes. Dans un article récent [Afa00], l'effet microscopique du terme $\vec{\alpha} \cdot \vec{V}$ a été analysé en détail : il est montré que les valeurs moyennes individuelles des moments angulaires intrinsèque $\langle \hat{s}_y \rangle$, angulaire $\langle \hat{\ell}_y \rangle$ et total $\langle \hat{j}_y \rangle$ sont fortement influencées par la présence ou non du terme de magnétisme nucléaire. Les auteurs concluaient que ce terme était indispensable pour reproduire correctement les résultats expérimentaux.

Néanmoins, nous verrons au chapitre 4.1.2 que même sans magnétisme nucléaire, il est possible, d'atteindre un excellent accord avec l'expérience, comparable et même souvent meilleur que celui obtenu dans les approches non-relativistes, et cela tout en restant dans le cadre du formalisme de Dirac.

1.3.2 Description de l'appariement dans la théorie RMF

Un autre des phénomènes importants qu'il a fallu inclure dans la théorie du champ moyen relativiste est l'appariement. Les corrélations d'appariement ont été incluses dans l'approche RMF de deux façons nettement différentes.

Dans un premier temps, le modèle BCS dans l'approximation dite de « gap » constant a été utilisé ([Rin90, Rin96]). Le paramètre de gap Δ (voir annexe D) était extrait des différences de masse entre noyaux pairs et impairs selon la relation :

$$\Delta = \frac{1}{2}\{[E(N+2) - E(N+1)] - [E(N+1) - E(N)]\} \tag{1.59}$$

[4] **Peut-être est-il judicieux de rappeler que le terme $\vec{V}$ est en fait équivalent à : $\vec{V} \equiv \langle \phi | \hat{\vec{V}} | \phi \rangle$ où ϕ est la fonction d'onde du noyau et $\hat{\vec{V}}$ l'*opérateur* associé aux mésons.**

et les probabilités d'occupation des niveaux individuels étaient calculées selon :

$$v_k^2 = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{e_k - \lambda}{\sqrt{(e_k - \lambda)^2 + \Delta^2}}\right] \tag{1.60}$$

où les e_k sont les énergies individuelles calculées en résolvant l'équation de Dirac et λ est le niveau de Fermi (simplement égal à $Z/2$ ou $N/2$ où Z est le nombre de protons, N celui de neutrons). La prise en compte de l'appariement selon ce modèle très simplifié se ramène en fait à introduire dans toutes les sommations sur les états individuels les nombres v_k^2. Par exemple, la densité scalaire s'écrira :

$$\rho_s = \sum_{i=1}^{A} \bar{\psi}_i \, \psi_i \longrightarrow \rho_s = \sum_{i=1}^{A} v_i^2 \, \bar{\psi}_i \, \psi_i \tag{1.61}$$

Cette approche permettait d'inclure quelques uns des effets de l'appariement dans le formalisme, mais restait très en deçà des théories de l'appariement moderne (par exemple l'approche Hartree-Fock-Bogoliubov HFB).

Aussi, dans un deuxième temps, un modèle plus évolué a été élaboré, très similaire dans sa formulation finale au modèle HFB. Il est bien au-dela de l'objectif de ces paragraphes d'introduction de donner une présentation exhaustive du formalisme du modèle Dirac-Hartree-Fock-Bogoliubov : le lecteur pourra se référer à [Rin96] où sont données les principales dérivations. Nous ne souhaitons mentionner ici que quelques points d'importance :

- quoique les équations présentées dans [Rin96] correspondent à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov (avec l'hamiltonien de Dirac comme champ moyen), le terme d'échange est systématiquement négligé dans tous les calculs.
- la conservation du nombre de particules, qui est l'un des problèmes majeurs de toute description réaliste de l'appariement est prise en compte *via* la prescription de Lipkin-Nogami. Autrement dit, il n'y a projection du nombre de particules ni avant ni après la variation de la fontionnelle, mais seulement une contrainte portant sur le nombre de particule moyen $\langle \hat{N} \rangle$ et son « écart type » $\langle \Delta \hat{N} \rangle$.

2. Champ moyen nucléaire de Dirac

La théorie RMF présentée dans la section précédente repose initialement sur le formalisme de la théorie quantique des champs. Néanmoins, nous avons vu qu'il était nécessaire d'effectuer un certain nombre d'approximations pour pouvoir étudier des noyaux dans des cas généraux (i.e. des noyaux qui ne soient pas seulement doublement magiques). Les calculs effectués précisément dans ces noyaux doublement magiques ont montré, par exemple dans [Gre72, Mil72, Bou87, Ser86], que ces approximations modifiaient de façon importante les résultats obtenus : par rapport à la version Hartree par exemple, l'ajout du terme d'échange (« Fock term ») modifie substantiellement, d'une part les caractéristiques des interactions mésons-nucléons, d'autre part les résultats obtenus. Certes, ces travaux ont également montré que, le plus souvent, on pouvait par une renormalisation judicieuse des constantes de couplage, se contenter des versions simplifiées de type Hartree. De telles considérations ont conduit aux théories dites de *lagrangien effectif*, dont la théorie RMF est l'exemple le plus abouti.

Néanmoins, il demeure que les corrections à apporter au modèle RMF pour tenir compte des termes d'échange et des anti-particules, notamment, sont importantes. Si dans les noyaux sphériques doublement magiques on peut se débarrasser de ces corrections (en utilisant une approche de lagrangien effectif), rien ne garantit que cela reste vrai dans le cas des noyaux déformés, ou bien des noyaux en rotation. Ce manque de contrôle sur certaines des approximations faites est une des lacunes actuelles de cette théorie. Un inconvénient supplémentaire, mais qui lui n'est pas lié aux bases conceptuelles du modèle, vient de la complexité des équations à résoudre. Malgré les immenses progrés de la science informatique, les équations RMF, qui sont rappelons-le des équations aux dérivées partielles non-linéaires couplées, restent encore difficiles à résoudre. Dans certains cas d'ailleurs, la convergence du processus itératif ne peut être atteinte (inconvénient rencontré par ailleurs dans toutes les théories auto-cohérentes).

Pour ces deux principales raisons, nous souhaiterions élaborer un modèle relativiste du mouvement des nucléons mais qui, d'une part repose sur des hypothèses clairement identifiées et dont la validité reste sous contrôle, et d'autre part qui apporte une simplification d'ordre pratique par rapport à l'approche existante. Comme par ailleurs, il n'existait pas encore d'équivalent relativiste des méthodes semi-phénoménologiques de type Nilsson ou Woods-Saxon, dont le succès n'est plus à démontrer, il nous a semblé tout naturel de construire notre modèle sur une paramétrisation des potentiels figurant dans l'équation de Dirac.

Ce chapitre présentera donc de façon détaillée les principaux aspects d'un tel modèle. Dans la section 2.1, nous montrerons comment mettre en évidence dans l'équation de Dirac (1.35), page 32, les différent termes du champ moyen : potentiel central et potentiel spin-orbite, et la façon dont on peut paramétriser ces potentiels. Nous verrons que par rapport aux approches non-relativistes, un potentiel supplémentaire apparaît naturellement, qui est linéaire en terme de l'opérateur impulsion. Ce terme n'a aucun équivalent dans les théories non-relativistes. Dans la partie 2.2 nous discuterons en détail la géométrie de chacun de ces potentiels et leur influence sur les niveaux individuels. Enfin, dans la section 2.3 nous donnerons un aperçu des techniques numériques de pointe mises en oeuvre dans le code WS-ODD, qui accélérent de façon substantielle la diagonalisation de l'hamiltonien.

2.1 CHAMP MOYEN DE DIRAC

L'équation de Dirac (1.35) page 32 fait intervenir deux potentiels $\hat{S}(\vec{r})$ et $\hat{V}(\vec{r})$ respectivement appelés potentiels scalaire et vecteur. Les fonctions d'onde des nucléons sont des bi-spineurs, c'est-à-dire des objets mathématiques à quatre composantes. Dans sa forme (1.35), l'équation de Dirac n'offre guère de ressemblances avec une équation de Schrödinger classique. Or il est possible de mettre en évidence une telle ressemblance qui permet de mieux comprendre tant les analogies que les différences entre les cas relativiste et non-relativiste.

Dans cette partie nous allons présenter la forme dite de Pauli-Schrödinger de l'équation de Dirac. La structure de cette équation fera clairement apparaître les potentiels central et spin-orbite, ainsi que de nouveaux termes d'origine purement relativiste. La forme de ces potentiels permettra de discuter la forme optimale de leur paramétrisation.

2.1.1 Formes alternatives de l'équation de Dirac

Rappelons la forme stationnaire de l'équation de Dirac en présence d'interactions (chapitre 1, équation (1.35) page 32) pour des noyaux *statiques* :

$$\left\{\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+\beta(m_0+\hat{S})+\hat{V}\right\}\psi_i=\mathcal{E}_i\psi_i \tag{2.1}$$

Le potentiel $\hat{S}$ est appelé potentiel scalaire, et $\hat{V}$ est appelé potentiel vecteur[1]. Ces dénominations, couramment utilisées quoiqu'imprécises, viennent de ce que $\hat{S}$ est un scalaire de Lorentz, et $\hat{V}$ est la composante « time-like » d'un vecteur de Lorentz. Nous pouvons introduire explicitement dans l'équation (2.1) la structure en bi-spineur des fonctions d'ondes, ainsi qu'une représentation des matrices de Dirac en termes de matrices de Pauli. Nous

[1]**Nous avons quelque peu modifié les notations : le terme $\hat{V}$ correspond en fait à ce que nous avions noté V^0 au chapitre 1. Le chapeau rappelle ici qu'il s'agit d'un opérateur au sens de la mécanique quantique, mais il s'agit toujours de la valeur moyenne d'un opérateur de champ quantique.**

choisissons la convention suivante :

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

et les bi-spineurs s'écrivent traditionnellement sous la forme :

$$\psi_i = \begin{pmatrix} \xi_i \\ \eta_i \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

où ξ_i est appelée la *grande composante* du bi-spineur de Dirac et η_i la *petite composante* du bi-spineur. Les relations (2.2) et (2.3) permettent de réécrire (2.1) sous la forme :

$$\boxed{\begin{pmatrix} [m_0 + (\hat{S} + \hat{V})] & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -[m_0 + (\hat{S} - \hat{V})] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_i \\ \eta_i \end{pmatrix} = \mathcal{E}_i \begin{pmatrix} \xi_i \\ \eta_i \end{pmatrix}} \tag{2.4}$$

Exprimons maintenant explicitement le système des deux équations couplées vérifiées par les spineurs ξ et η. Il vient :

$$[m_0 + (\hat{S} + \hat{V})]\xi_i + \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\,\eta_i = \mathcal{E}_i\,\xi_i \tag{2.5}$$

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\,\xi_i - [m_0 + (\hat{S} - \hat{V})]\eta_i = \mathcal{E}_i\,\eta_i \tag{2.6}$$

Avant de découpler ces deux équations, il est intéressant d'introduire une nouvelle façon de mesurer les énergies propres. Comme nous sommes intéressés par la limite basse-énergie du problème (c'est-à-dire les énergies des nucléons à l'intérieur du noyau), il est plus avantageux d'introduire ε_i, l'énergie du niveau numéro i par rapport à l'énergie de repos, selon :

$$\mathcal{E}_i = m_0 + \varepsilon_i \tag{2.7}$$

On peut maintenant réécrire l'équation (2.6) comme :

$$\eta_i = \frac{1}{2m_0 + \varepsilon_i + (\hat{S} - \hat{V})} \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\,\xi_i \tag{2.8}$$

et en insérant cette dernière expression dans l'équation (2.6), on obtient :

$$\boxed{\left\{ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \frac{1}{2m_0 + \varepsilon_i + (\hat{S} - \hat{V})} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} + (\hat{S} + \hat{V}) \right\} \xi_i = \varepsilon_i \xi_i} \tag{2.9}$$

Il est tout à fait possible de procéder au même type de dérivation pour exprimer cette fois le spineur η en fonction du spineur ξ et l'on trouve :

$$\boxed{\left\{ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \frac{1}{\varepsilon_i - (\hat{S} + \hat{V})} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} + [2m_0 + (\hat{S} + \hat{V})] \right\} \eta_i = \varepsilon_i \eta_i} \tag{2.10}$$

Parvenu en ce point, quelques remarques élémentaires s'imposent :

- notons d'abord que les équations (2.9) et (2.10) sont *strictement équivalentes* à l'équation de Dirac (2.1) initiale : aucune approximation particulière n'a été faite, seule a été exploitée la structure des matrices de Dirac choisies.
- cependant, ces deux équations font intervenir l'énergie propre ε_i de façon non-linéaire, contrairement à l'équation de Dirac initiale.

2.1.2 Potentiels nucléaires

Après avoir montré comment l'équation de Dirac se réécrivait pour chacun des deux spineurs, nous allons étudier plus particulièrement l'équation du mouvement pour la grande composante. Il est possible de décomposer le premier terme de l'hamiltonien dans (2.9) - celui qui contient $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ deux fois, de manière à ce qu'apparaissent les termes habituels, i.e. l'énergie cinétique et le potentiel spin-orbite. Nous verrons cependant que dans le formalisme de l'équation de Dirac d'autres termes apparaissent, qui n'ont pas d'équivalents non-relativistes.

a) Linéarisation des équations de spineurs

Jusqu'ici, aucune approximation particulière n'avait été faite. Rappelons le but : nous souhaitons résoudre l'équation de Dirac pour les nucléons par le biais d'une paramétrisation des potentiels. Jusqu'ici, les seuls potentiels que nous avons rencontrés sont les potentiels $\hat{V}$ et $\hat{S}$. Les calculs effectués dans le cadre strict de la théorie RMF permettent d'obtenir un ordre de grandeur des valeurs moyennes de ces opérateurs dans le noyau, qui correspondent aux profondeurs des potentiels associés [Koe91] :

$$\langle \hat{S} \rangle \sim -400 \text{ MeV} \tag{2.11}$$
$$\langle \hat{V} \rangle \sim +350 \text{ MeV} \tag{2.12}$$

ce qui conduit aux valeurs suivantes pour les termes $\hat{S}+\hat{V}$ et $\hat{S}-\hat{V}$ intervenant dans les équations pour les spineurs ξ et η (équations (2.9) et (2.10)) :

$$\langle \hat{S}+\hat{V} \rangle \sim -50 \text{ MeV} \tag{2.13}$$
$$\langle \hat{S}-\hat{V} \rangle \sim -750 \text{ MeV} \tag{2.14}$$

Examinons le dénominateur de (2.9) à l'aune de ces ordres de grandeur des potentiels. Le dénominateur s'écrit :

$$2m_0 + \varepsilon_i + (\hat{S}-\hat{V}) = \varepsilon_i + 2\left[m_0 + \frac{1}{2}(\hat{S}-\hat{V})\right] = \varepsilon_i + 2m_0^*(\vec{r}) \tag{2.15}$$

où nous avons noté $m^*(\vec{r})$ la quantité :

$$\boxed{m^*(\vec{r}) = m_0 + \frac{1}{2}(\hat{S}-\hat{V})} \tag{2.16}$$

Nous appellerons cette quantité *masse effective*. La valeur de la masse effective dans le noyau est de l'ordre de 700 MeV (à comparer avec la masse au repos du nucléon qui vaut environ 1000 MeV). *A contrario*, les énergies nucléoniques ε_i sont de l'ordre de -5 à -10 MeV dans la région du niveau de Fermi, et peuvent aller jusqu'à environ -50 MeV pour les états profondément liés (du type $1s_{1/2}$ ou $1p_{3/2}$). La quantité $\varepsilon_i/2m^*(\vec{r})$ est donc environ égale à 0.5% pour les états voisins du niveau de Fermi et vaut à peu près 3,5% pour les états les plus profonds. Un tel ordre de grandeur, combiné au fait que ce

terme apparaît au dénominateur d'une fraction et rend les équations non-linéaires, suggère fortement d'effectuer un développement limité :

$$\frac{1}{\varepsilon_i + 2m^*(\vec{r})} = \frac{1}{2m^*(\vec{r})} \cdot \frac{1}{1 + \dfrac{\varepsilon_i}{2m^*(\vec{r})}} \simeq \frac{1}{2m^*(\vec{r})} \left(1 - \frac{\varepsilon_i}{2m^*(\vec{r})} + ...\right) \tag{2.17}$$

Compte tenu des ordres de grandeurs mentionnés plus haut, le développement limité peut même s'arrêter à l'ordre 0 (la correction d'ordre 2 est inférieure à 10^{-5} pour les états les plus profonds !), et nous supposerons par conséquent que :

$$\frac{1}{2m_0 + \varepsilon_i + (\hat{S} - \hat{V})} \simeq \frac{1}{2m^*(\vec{r})} \tag{2.18}$$

cette approximation nous permet de simplifier grandement l'équation vérifiée par le spineur ξ :

$$\boxed{\left\{\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \frac{1}{2m^*(\vec{r})} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} + (\hat{S} + \hat{V})\right\} \xi_i = \varepsilon_i \xi_i} \tag{2.19}$$

Cette équation représente la forme approximative (à environ 10^{-5} près) de l'équation de Dirac pour les nucléons d'un noyau atomique.

b) Hamiltonien de Dirac et potentiels

L'expression (2.19) n'est pas encore très satisfaisante au regard de son interprétation physique, en ce sens qu'elle diffère significativement dans sa forme de l'équation de Schrödinger classique. Pour pouvoir comparer plus facilement le formalisme relativiste avec son équivalent non-relativiste, il faut encore faire un petit effort, et transformer une dernière fois l'équation (2.19). L'idée consiste à développer le terme d'énergie cinétique, pour faire apparaître les différents potentiels qui y sont en fait cachés. On a :

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \left(\frac{1}{2m^*(\vec{r})} \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\right) = \frac{1}{2m^*(\vec{r})} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 + \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \frac{1}{2m^*(\vec{r})}\right) \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \tag{2.20}$$

Or : $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = \vec{p}^{\,2}$ en vertu des propriétés des matrices de Pauli, et de plus :

$$\vec{p} \frac{1}{2m^*(\vec{r})} = -\frac{1}{[2m^*(\vec{r})]^2} \vec{p}[2m^*(\vec{r})] \tag{2.21}$$

enfin, d'après l'équation (2.16), on a :

$$\vec{p}[2m^*(\vec{r})] = \vec{p}(\hat{S} - \hat{V}) \tag{2.22}$$

d'où l'on tire finalement :

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \frac{1}{2m^*(\vec{r})} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} = \frac{1}{2m^*(\vec{r})} \vec{p}^{\,2} + \frac{1}{[2m^*(\vec{r})]^2} [\,\vec{\sigma} \cdot \vec{p}(\hat{V} - \hat{S})\,][\,\vec{\sigma} \cdot \vec{p}] \tag{2.23}$$

Nous allons maintenant utiliser une identité vectorielle faisant intervenir les matrices de Pauli, valable pour tous vecteurs $\vec{A}$ et $\vec{B}$ quelconques qui commutent avec ces matrices [Hey90] :

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) = \vec{A}\cdot\vec{B} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\wedge\vec{B}) \tag{2.24}$$

En appliquant cette identité aux vecteurs :

$$\vec{A} = \vec{p}(\hat{V}-\hat{S}) \qquad \text{et} \qquad \vec{B} = \vec{p} \tag{2.25}$$

on obtient l'identité suivante :

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\frac{1}{2m^*(\vec{r})}\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \hat{T} + \hat{V}_{so}(\vec{r}) + \hat{V}_p(\vec{r}) \tag{2.26}$$

avec : :

$$\hat{T} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m^*(\vec{r})} \tag{2.27}$$

$$\hat{V}_{so}(\vec{r}) = \frac{i}{[2m^*(\vec{r})]^2}\vec{\sigma}\cdot[\,\vec{p}\,(\hat{V}-\hat{S})\wedge\vec{p}\,] \tag{2.28}$$

$$\hat{V}_p(\vec{r}) = \frac{1}{[2m^*(\vec{r})]^2}[\,\vec{p}\,(\hat{V}-\hat{S})\cdot\vec{p}\,] \tag{2.29}$$

L'opérateur $\hat{T}$ est l'analogue de l'énergie cinétique en mécanique quantique non-relativiste, mais remarquons qu'il contient à la place de la masse du nucléon, la masse effective qui est une fonction de $\vec{r}$. De même, $\hat{V}_{so}$ est le potentiel spin-orbite, qui ne diffère de son expression non-relativiste que par la présence du terme de masse effective en lieu et place de la masse au repos du nucléon (voir [Dud78] pour l'expression du terme spin-orbite avec un potentiel de Woods-Saxon). Il est important de noter que contrairement aux théories non-relativistes, le potentiel spin-orbite découle naturellement des équations du mouvement. Enfin, le troisième terme $\hat{V}_p$ est un potentiel qui n'a pas d'équivalent non-relativiste, et qui est linéaire par rapport à l'opérateur impulsion mais ne dépend pas du spin. L'hamiltonien final se met donc sous la forme :

$$\boxed{\left\{\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m^*(\vec{r})} + \hat{V}_{cen}(\vec{r}) + \hat{V}_{so}(\vec{r}) + \hat{V}_p(\vec{r})\right\}\xi_i = \varepsilon_i\xi_i} \tag{2.30}$$

avec donc :

$$\boxed{\begin{aligned} m^*(\vec{r}) &= m_0 + \frac{1}{2}(\hat{S}-\hat{V}) && (2.31)\\ \hat{V}_{cen}(\vec{r}) &= \hat{V}+\hat{S} && (2.32)\\ \hat{V}_{so}(\vec{r}) &= \frac{i}{[2m^*(\vec{r})]^2}\vec{\sigma}\cdot[\,\vec{p}\,(\hat{V}-\hat{S})\wedge\vec{p}\,] && (2.33)\\ \hat{V}_p(\vec{r}) &= \frac{1}{[2m^*(\vec{r})]^2}[\,\vec{p}\,(\hat{V}-\hat{S})\cdot\vec{p}\,] && (2.34) \end{aligned}}$$

A cela s'ajoute naturellement le potentiel Coulombien pour les protons. Il s'écrit de façon générale :

$$V_{cou}(\vec{r}) = \iiint d^3\vec{r}\,' \frac{\rho(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} \tag{2.35}$$

et possède la géométrie du noyau. Ainsi, pour les noyaux sphériques, ayant une distribution de charge homogène, l'expression (2.35) se simplifie et se ramène à :

$$V_{cou}(\vec{r}) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}(Z-1)e^2 \left[3 - \left(\dfrac{r}{R_0}\right)^2\right] & \text{pour } r \leq R_0 \\ \dfrac{(Z-1)e^2}{r/R_0} & \text{pour } r \geq R_0 \end{cases} \tag{2.36}$$

c) Commentaires sur le potentiel spin-orbite

La résolution directe de l'équation de Pauli-Schrödinger (2.30) nécessite de connaître les potentiels (2.32)-(2.34). Il est intéressant de remarquer que tous ces potentiels dépendent exclusivement de deux termes seulement : $\hat{V}+\hat{S}$ et $\hat{V}-\hat{S}$. Par conséquent, si nous choisissons de paramétriser ces deux termes, d'une façon qui reste encore à déterminer, nous serons en mesure de diagonaliser l'hamiltonien de Pauli-Schrödinger. Remarquons que le terme de potentiel central est donné par $\hat{V}+\hat{S}$. Il est connu depuis longtemps que le puits de potentiel nucléaire a *grosso modo* la forme d'un potentiel de Woods-Saxon. Nous sommes donc tentés de paramétriser $\hat{V} + \hat{S}$ par une fonction de Woods-Saxon. Par ailleurs, le potentiel spin-orbite fait lui intervenir $\hat{V} - \hat{S}$ *via* sa dérivée. Pour clarifier un peu la situation, prenons le cas particulier d'un système qui possède la symétrie sphérique. Alors le potentiel est un potentiel central, et l'on a :

$$\vec{p}[\hat{V}(r) - \hat{S}(r)] = -i\frac{\vec{r}}{r}\frac{d}{dr}[\hat{V}(r) - \hat{S}(r)] \tag{2.37}$$

ce qui conduit à l'expression suivante pour le potentiel spin-orbite :

$$\hat{V}_{so} = \frac{1}{[2m^*(\vec{r})]^2}\frac{1}{r}\frac{d}{dr}[\hat{V}(r) - \hat{S}(r)](\vec{r} \wedge \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \tag{2.38}$$

Comme on a : $\vec{\sigma} = 2\vec{s}$ et $\vec{\ell} = \vec{r} \wedge \vec{p}$, le potentiel spin-orbite devient en fait :

$$\hat{V}_{so} = \frac{1}{2[m^*(\vec{r})]^2}\frac{1}{r}\frac{d}{dr}[\hat{V}(r) - \hat{S}(r)]\ \vec{\ell} \cdot \vec{s} \tag{2.39}$$

ce qui est bien l'expression « classique » du potentiel spin-orbite (en coordonnées sphériques). Précisément, au sujet de cette expression, il est connu que le gradient du potentiel doit être similaire au gradient d'un potentiel de Woods-Saxon. Nous nous attendons donc à ce que, de façon analogue, le potentiel $\hat{V} - \hat{S}$ ait la forme d'une fonction de Woods-Saxon.

Par ailleurs, on peut également écrire le potentiel spin-orbite de façon un peu différente que (2.4). Notons :

$$V_{ls}(r) = \frac{m_0}{m^*(\vec{r})}[\hat{V}(r) - \hat{S}(r)] \tag{2.40}$$

Introduisons également la fonction auxiliaire suivante :

$$F_{ls}(r) = \frac{1}{4m_0^2}\vec{\nabla}V_{ls} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\sigma}) \tag{2.41}$$

Le calcul explicite de $F_{ls}(r)$ donne :

$$\begin{aligned} F_{ls}(r) = \frac{1}{4m_0^2}\vec{\nabla}\left\{\frac{m_0}{m^*(\vec{r})}[\hat{V}(r) - \hat{S}(r)]\right\} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\sigma}) &= \frac{1}{4m_0}\vec{\nabla}\left(\frac{\hat{V}(r) - \hat{S}(r)}{m^*(\vec{r})}\right) \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\sigma}) \\ &= \frac{1}{4m_0}\left\{-\frac{\vec{\nabla}m^*}{(m^*)^2}(\hat{V} - \hat{S}) + \frac{1}{m^*}\vec{\nabla}(\hat{V} - \hat{S})\right\} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\sigma}) \end{aligned} \tag{2.42}$$

Utilisons maintenant le fait que la masse effective est donnée par :

$$m^*(\vec{r}) = m_0 - \frac{1}{2}(\hat{V} - \hat{S}) \tag{2.43}$$

d'où il suit que :

$$\vec{\nabla}m^* = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}(\hat{V} - \hat{S}) \tag{2.44}$$

En utilisant (2.43) et (2.44) dans (2.42), on arrive à :

$$\begin{aligned} F_{ls}(r) = \frac{1}{m_0}\frac{1}{[2m^*]^2}\Big\{&+\frac{1}{2}(\hat{V} - \hat{S})\vec{\nabla}(\hat{V} - \hat{S}) + m_0\vec{\nabla}(\hat{V} - \hat{S}) \\ &-\frac{1}{2}(\hat{V} - \hat{S})\vec{\nabla}(\hat{V} - \hat{S})\Big\} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\sigma}) \end{aligned} \tag{2.45}$$

Soit :

$$F_{ls}(r) = \frac{1}{[2m^*(\vec{r})]^2}\vec{\nabla}(\hat{V} - \hat{S}) \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\sigma}) \tag{2.46}$$

L'équation (2.46) est exactement identique à l'équation (2.34) définissant le potentiel spin-orbite. Par conséquent, nous avons trouvé une nouvelle expression pour le potentiel spin-orbite qui se met sous la forme « gradient d'une fonction $\times\ \vec{p}\wedge\vec{\sigma}$ ». Cette forme particulière nous sera utile un peu plus loin. En résumé, on peut écrire :

$$\boxed{\hat{V}_{so}(\vec{r}) = \frac{1}{4m_0^2}\vec{\nabla}V_{ls} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\sigma})} \tag{2.47}$$

avec :

$$\boxed{\hat{V}_{ls}(\vec{r}) = \frac{m_0}{m^*(\vec{r})}[\hat{V}(r) - \hat{S}(r)]} \tag{2.48}$$

d) Paramétrisation des potentiels

Nous avons vu à la section précédente que le terme $\hat{V}_{so}$ défini par (2.34) avait bien la structure d'un potentiel spin-orbite et, dans les modèles phénoménologiques, un tel potentiel est souvent paramétrisé par une fonction de Woods-Saxon. Dans le même esprit, le terme de potentiel central est lui aussi simulé par une telle fonction. Faisons quelques rappels sur les potentiels de Woods-Saxon. La surface du noyau peut être décrite à l'aide de la formule suivante :

$$\boxed{\Sigma : R(\theta,\varphi) = r_0 A^{1/3} c(\alpha) \left\{ 1 + \sum_{\lambda} \sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda} \alpha_{\lambda\mu}\, Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi) \right\}} \tag{2.49}$$

car l'ensemble des harmoniques sphériques $Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)$ forme une base. $R(\theta,\varphi)$ est la valeur du rayon du noyau en un point de coordonnées sphériques (θ,φ), R_0 correspond à la valeur du rayon pour le même noyau mais avec la symétrie sphérique et $c(\alpha)$ est un facteur dépendant des paramètres de déformation $\alpha_{\lambda\mu}$ qui permet la conservation du volume du noyau lors du passage noyau sphérique $\rightarrow$ noyau déformé. Un potentiel de Woods-Saxon ayant la même symétrie que la surface (symétrie caractérisée par les paramètres de déformation $\alpha_{\lambda\mu}$) s'écrira sous la forme :

$$U(r,\theta,\varphi) = -\frac{V_0}{1+\exp[\mathrm{dist}_\Sigma(\vec{r},r_0)/a_0]}; \qquad V_0 \geq 0 \tag{2.50}$$

où $\mathrm{dist}_\Sigma(\vec{r},r_0)$ désigne la *distance* d'un point $\vec{r}$ au point de la surface[2], caractérisée par r_0.

Dans notre cas, nous avons deux potentiels à déterminer, qui *a priori* peuvent avoir une forme non sphérique. Nous allons donc poser :

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{V}+\hat{S} &= -\frac{V_0^+}{1+\exp[\mathrm{dist}_\Sigma(\vec{r},r_0^+)/a_0^+]}; \qquad V_0^+ \geq 0 \qquad (2.51)\\ \hat{V}-\hat{S} &= -\frac{V_0^-}{1+\exp[\mathrm{dist}_\Sigma(\vec{r},r_0^-)/a_0^-]}; \qquad V_0^- \geq 0 \qquad (2.52) \end{aligned}}$$

Pour connaître entièrement les potentiels, il nous faut déterminer deux jeux de 3 paramètres, un pour chacun des potentiels. De plus, la procédure doit être appliquée pour les protons et les neutrons. Au total, ce sont 12 paramètres qui sont à déterminer.

2.1.3 Une paramétrisation étendue

Les motivations à la base de ce travail sont multiples : d'une part, nous souhaitons aborder le problème d'une théorie relativiste de la structure du noyau sous un angle original par rapport à ce que l'on peut trouver dans la littérature, et permettre de ce fait de jeter

[2]**Par distance, il faut entendre distance d'un point à une surface au sens mathématique du terme.**

un nouvel éclairage sur la théorie RMF. D'autre part, dans une perspective plus générale, nous souhaitons également produire un modèle fiable et utilisable par tous pour décrire les principales propriétés des noyaux. Dans cet esprit, il est indispensable d'atteindre à la meilleure précision possible dans les comparaisons avec les données expérimentales. Les résultats que nous avons obtenus et que nous présenterons au chapitre 3 sont déjà très satisfaisants sur ce point, mais est-il possible de faire encore mieux ?

Nous avons déjà fait la remarque que tous les « potentiels » intervenant dans l'équation de Dirac ne s'exprimaient qu'en fonction des termes $\hat{V} + \hat{S}$ et $\hat{V} - \hat{S}$. Supposons que nous déconnections arbitrairement la masse effective du potentiel spin-orbite. En d'autres termes, nous décidons de poser, pour la masse effective :

$$m^*(\vec{r}) = m_0 - \frac{1}{2}U_{eff}(r) \tag{2.53}$$

et pour le potentiel spin-orbite :

$$\hat{V}_{so}(\vec{r}) = \frac{i}{[2m^*(\vec{r})]^2}\vec{\sigma} \cdot [\vec{p}U_{so}(r) \wedge \vec{p}] \tag{2.54}$$

En toute rigueur, nous devrions avoir :

$$U_{so}(r) = U_{eff}(r) = \hat{V}(r) - \hat{S}(r) \tag{2.55}$$

Néanmoins, introduire une différence entre les deux potentiels peut se révéler très instructif. D'abord, en faisant tendre U_{eff} vers 0, nous nous ramenons à un hamiltonien non-relativiste classique. Ce « passage à la limite » n'est pas aussi simple lorsque les deux potentiels sont liés. Ensuite, nous introduisons également des degrés de liberté supplémentaires dans notre procédure (trois degrés de liberté pour être exact : la profondeur, le rayon et la diffusivité du potentiel U_{eff}) : dans la perspective d'atteindre, en qualité, les limites ultimes de cette approche de champ moyen relativiste, cette approximation peut se justifier.

Par ailleurs, nous avons mentionné dans le chapitre 1 que la théorie RMF comprenait nombre d'approximations, dont certaines n'étaient pas suffisamment contrôlées. On peut s'attendre à ce que l'approximation d'une masse effective indépendante du potentiel spin-orbite permette de simuler des effets qui, dans l'état actuel des techniques de la RMF, sont négligés ou mal compris. Par conséquent, nous adopterons la méthode suivante :

- dans un premier temps, nous validerons l'ensemble de la méthode en restant dans le cadre strict de la théorie RMF, avec donc 6 paramètres pour l'hamiltonien de Dirac, trois pour le potentiel central, et trois autres pour le potentiel spin-orbite, qui sont également ceux de la masse effective et du potentiel linéaire $\hat{V}_p$;
- dans un deuxième temps, une fois la méthode validée dans son ensemble et testée, nous pourrons envisager de passer à 9 paramètres pour les applications concrètes, pourvu que les résultats avec 9 paramètres ne diffèrent pas de ceux à 6 de façon trop drastique.

2.2 GÉOMÉTRIES DES POTENTIELS

Nous avons montré dans les pages précédentes comment il était possible de paramétriser les potentiels dans l'équation de Dirac. Nous avons vu que la paramétrisation « stricte »

contient 6 paramètres pour les protons (et 6 autres pour les neutrons), mais qu'il pouvait également être avantageux de considérer une paramétrisation étendue contenant 9 paramètres, dans laquelle la masse effective est découplée du potentiel spin-orbite. Dans cette section, nous allons illustrer l'effet de chaque potentiel sur les niveaux individuels, en détaillant l'action de chacun des trois paramètres : la profondeur du potentiel, le rayon et la diffusivité.

2.2.1 Le potentiel central

Commençons par analyser l'évolution des niveaux individuels en fonction de la géométrie du potentiel central. La figure 2.1 présente les niveaux protons dans ^{208}Pb en fonction de la profondeur du puits central. Les calculs ont été faits avec notre meilleure paramétrisation, qui comporte 9 paramètres, et qui est présentée au chapitre 3. On constate que les niveaux varient presque linéairement avec V_0^{cen}, ce qui est relativement peu surprenant : plus le puits de potentiel est profond, plus les niveaux sont profonds. En particulier, on a à peu près toujours les mêmes nombres magiques quel que soit V_0^{cen}.

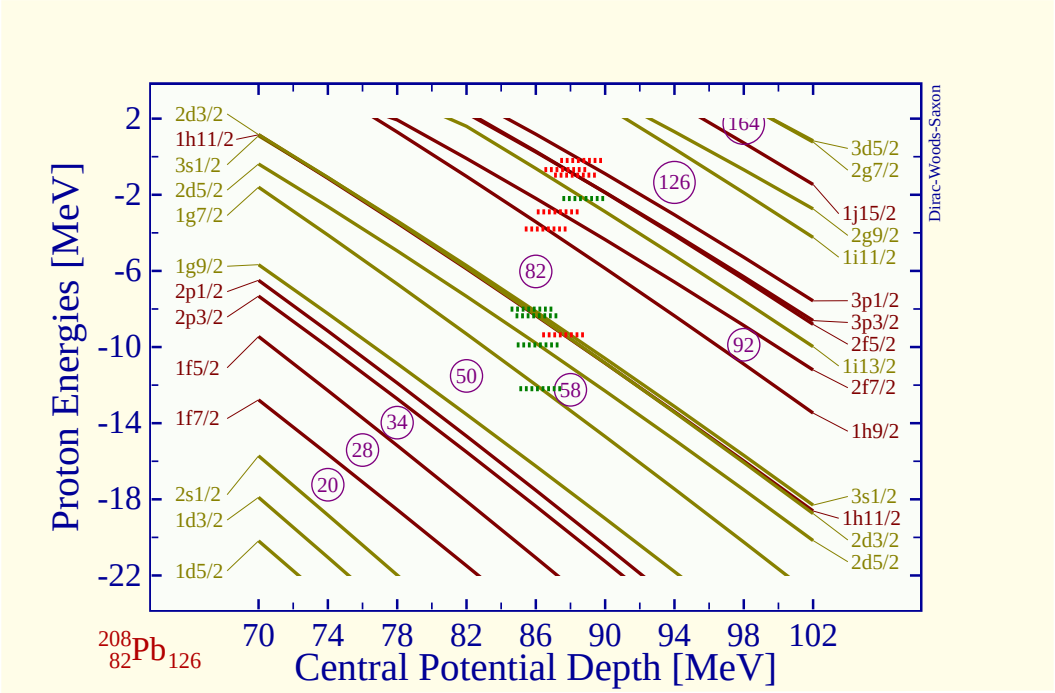


FIG. 2.1 – *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la profondeur du potentiel central dans ^{208}Pb. Les traits rouges et verts en pointillés figurent la position expérimentale des niveaux.*

Les deux figures de la page 50 ont été obtenues exactement de la même façon, mais cette fois, ce sont respectivement le rayon r_0^{cen} et la diffusivité a_0^{cen} du potentiel central qui varient. De façon un peu analogue avec ce qui se passe pour la profondeur V_0^{cen}, les niveaux varient « à peu près » linéairement en fonction de r_0^{cen}.

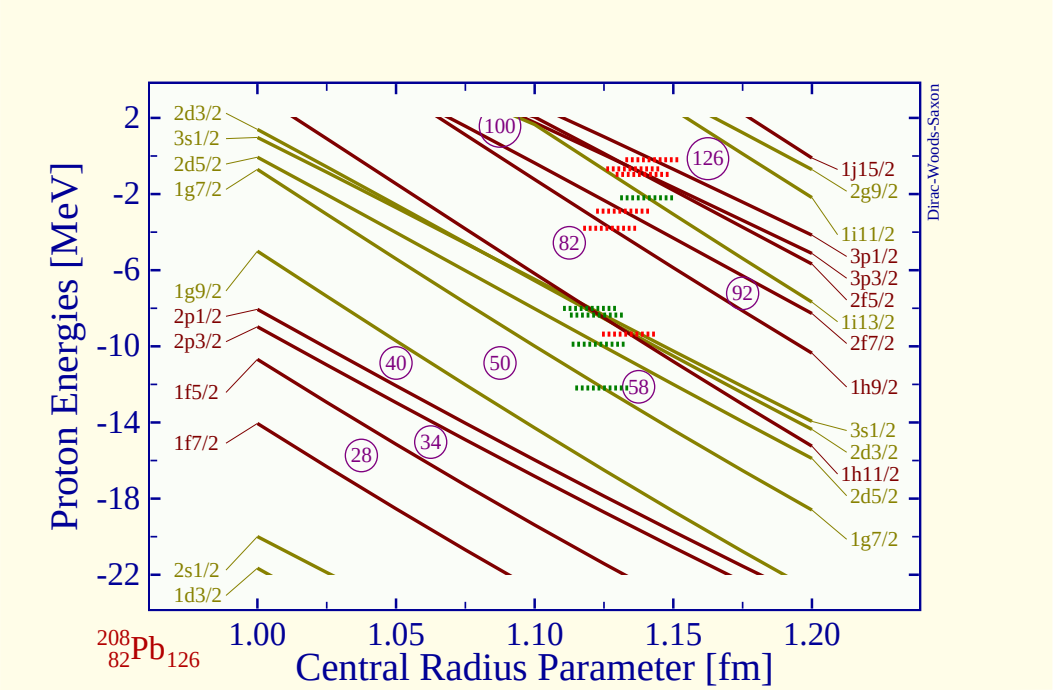


FIG. 2.2 – *Evolution des niveaux d'énergie en fonction du rayon du potentiel central dans* ^{208}Pb. *Les traits rouges et verts en pointillés figurent la position expérimentale des niveaux.*

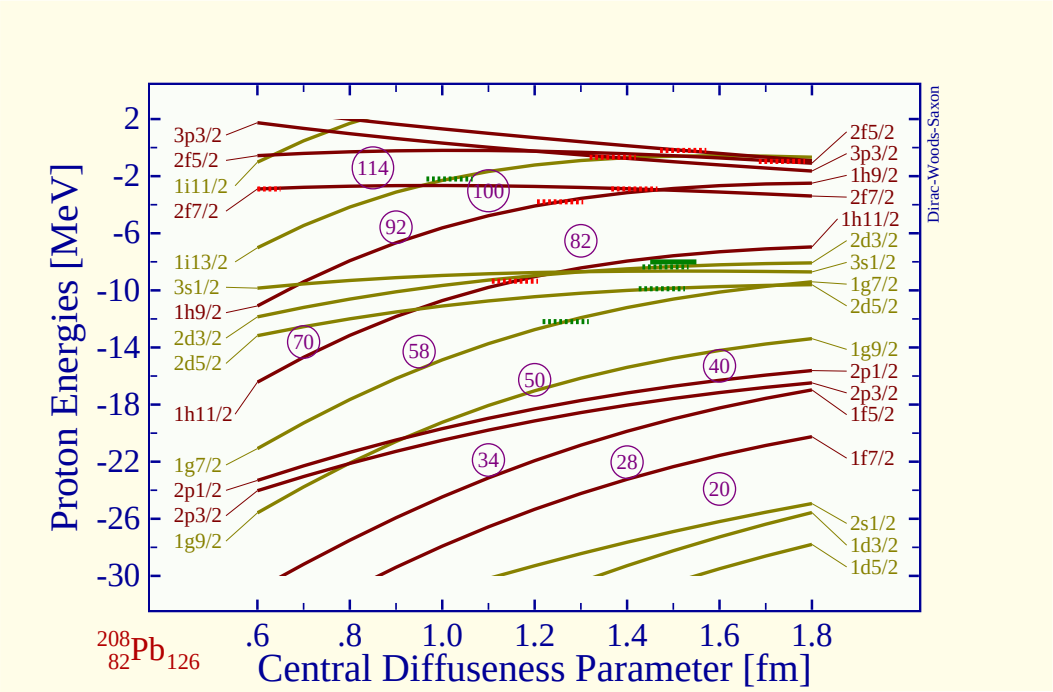


FIG. 2.3 – *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la diffusivité du potentiel central dans* ^{208}Pb. *Les traits rouges et verts en pointillés figurent la position expérimentale des niveaux. La dispersion des positions des niveaux expérimentaux n'est pas gênante, puisque les niveaux théoriques sont peu sensibles à la diffusivité centrale (et que donc une petite modification de* a_0^{cen} *peut rendre bien meilleure l'accord visuel théorie/expérience).*

Par contre, la situation change significativement lorsqu'on considère la diffusivité centrale. Lorsque celle-ci augmente, les niveaux acquièrent une courbure différente. Il est frappant de remarquer que certains niveaux très différents ont cependant pratiquement la même courbure : par exemple dans la séquence $1f_{5/2}$, $1g_{9/2}$, $1g_{7/2}$, $1h_{11/2}$, $1h_{9/2}$ et $1i_{13/2}$ (qui correspond à des moments angulaires orbitaux allant de $\ell = 3$ à $\ell = 6$), presque tous les niveaux varient de la même façon en fonction de la diffusivité centrale a_0^{cen}.

2.2.2 Le potentiel spin-orbite

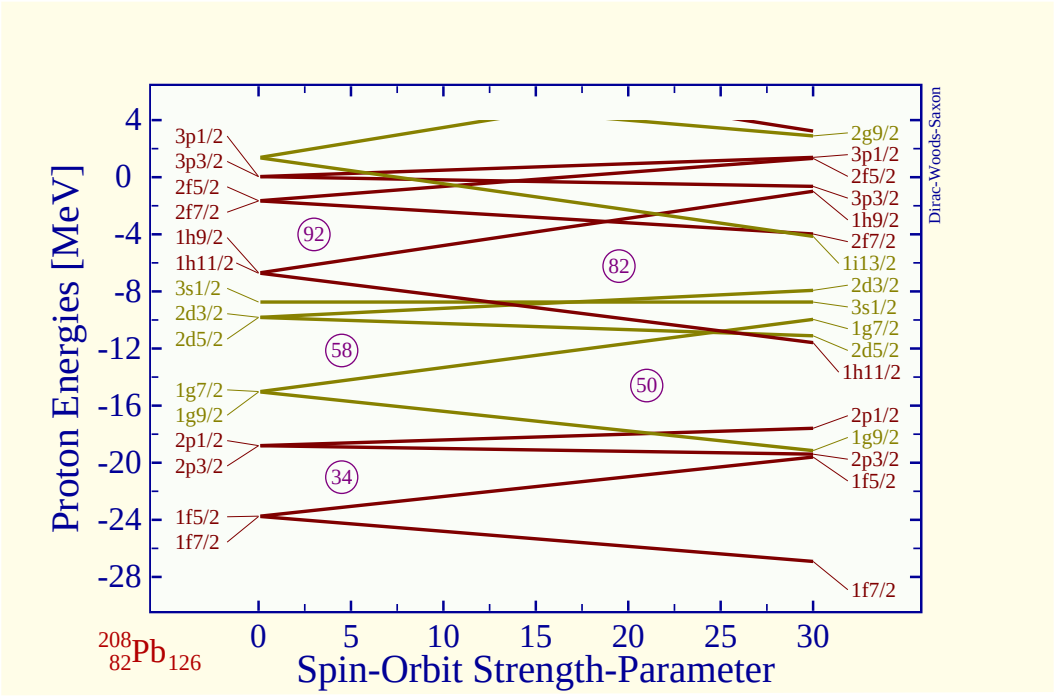


FIG. 2.4 – *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la profondeur du potentiel spin-orbite dans* ^{208}Pb.

Les choses deviennent un peu plus intéressantes avec le potentiel spin-orbite. Comme pour les figures précédentes, les figures 2.4-2.5 sont obtenues en ne faisant varier qu'un seul paramètre à la fois, V_0^{so} pour la figure 2.4, r_0^{so} pour la figure 2.6 et a_0^{so} pour la figure 2.5. La figure 2.4 est relativement conforme à ce que l'on pouvait attendre : au fur et à mesure que l'intensité du potentiel spin-orbite augmente, l'écart entre les niveaux $\ell \pm 1/2$ augmente. Ces derniers sont d'ailleurs dégénérés lorsqu'il n'y a pas de potentiel spin-orbite. Par contre, il est un peu plus étonnant de voir, sur la figure 2.5 que les niveaux d'énergie ne sont pratiquement pas sensibles à la diffusivité spin-orbite.

a) Cas non-relativiste

Autant la variation des niveaux d'énergie individuels en fonction de la géométrie du puits central est indépendante de la nature relativiste ou non-relativiste de l'hamiltonien, autant il n'en va pas de même pour le potentiel spin-orbite. En effet, nous avons vu que

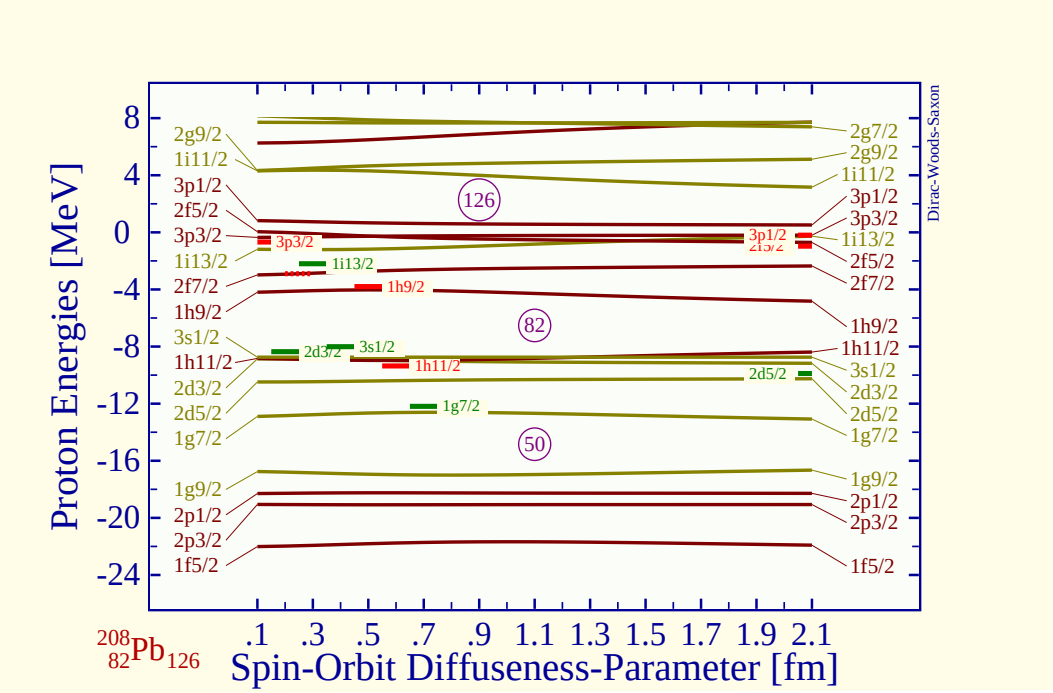


FIG. 2.5 – *Evolution des niveaux d'énergie en fonction de la diffusivité du potentiel spin-orbite dans* ^{208}Pb. *Les traits rouges et verts en pointillés figurent la position expérimentale des niveaux. Voir le commentaire sur les niveaux expérimentaux de la figure 2.3.*

dans le formalisme de Dirac, le potentiel spin-orbite contient la masse effective. Dans les figures que nous avons présentées jusqu'ici, la masse effective est découplée du potentiel spin-orbite, mais son existence demeure une grande différence par rapport à l'approche non-relativiste. Les figures 2.6 et 2.7 peuvent servir à titre d'exemple. Sur ces figures, on a tracé l'évolution des niveaux d'énergie individuels en fonction du rayon spin-orbite. La figure 2.6 correspond à l'hamiltonien de Dirac à 9 paramètres, la figure 2.7 à l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon avec la paramétrisation universelle. On peut remarquer que le mécanisme qui conduit à la levée de dégénéréscence des états $j = \ell \pm 1/2$ n'est pas tout à fait identique dans les cas relativiste et non-relativiste : dans le cas non-relativiste, pour des valeurs élevées du rayon, les états partenaires sont de nouveau dégénérés. Par contre, avec la masse effective, cette dégénérescence disparaît définitivement. Ce mécanisme se retrouve aisément par le calcul. Prenons pour simplifier le cas sphérique, où le potentiel de spin-orbite non-relativiste s'écrit :

$$\hat{V}_{so}(\vec{r}) = \alpha \frac{1}{r} \frac{dU_{so}}{dr}(r)\, \vec{\ell} \cdot \vec{s} \tag{2.56}$$

où α est une constante dépendant des unitées choisies et $U_{so}(r)$ est donné par :

$$U_{so}(r) = \frac{V_0^{so}}{1 + e^{(r - r_0^{so})/a_0^{so}}} \tag{2.57}$$

Etudions la fonction $f(r) = dU_{so}/dr$ en fonction de r et r_0^{so}. L'expression de cette fonction est :

$$f(r) = -\frac{V_0^{so}}{a_0^{so}} \frac{e^{(r - r_0^{so})/a_0^{so}}}{\left[1 + e^{(r - r_0^{so})/a_0^{so}}\right]^2} \tag{2.58}$$

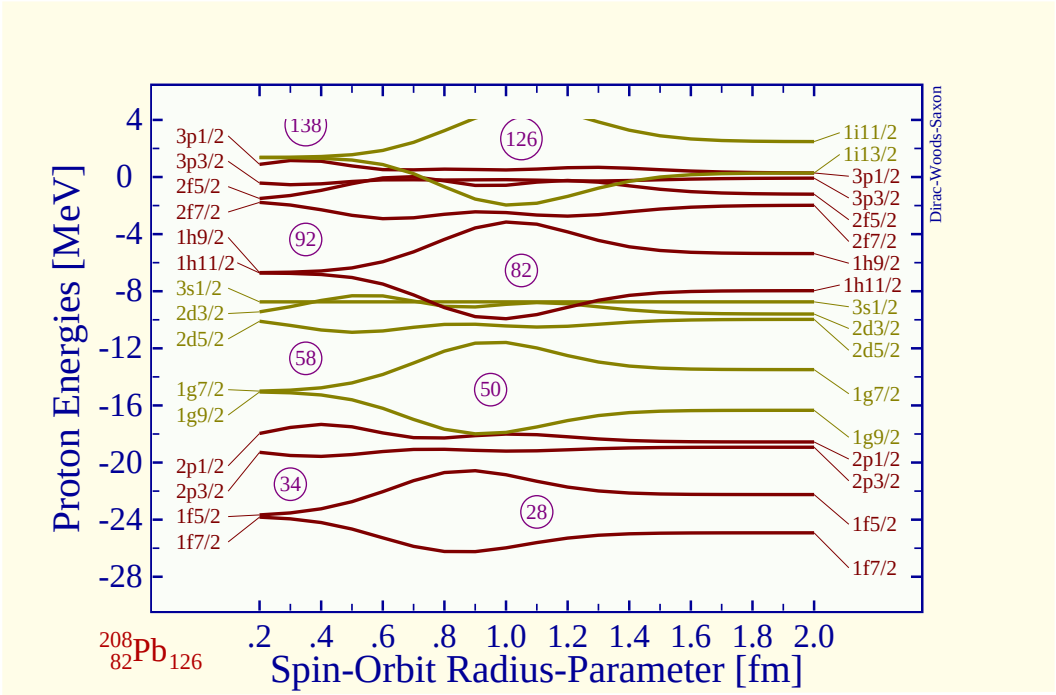


FIG. 2.6 – *Evolution des niveaux d'énergie en fonction du rayon du potentiel spin-orbite dans* ^{208}Pb *(hamiltonien de Dirac avec masse effective indépendante du potentiel spin-orbite et donc 9 paramètres).*

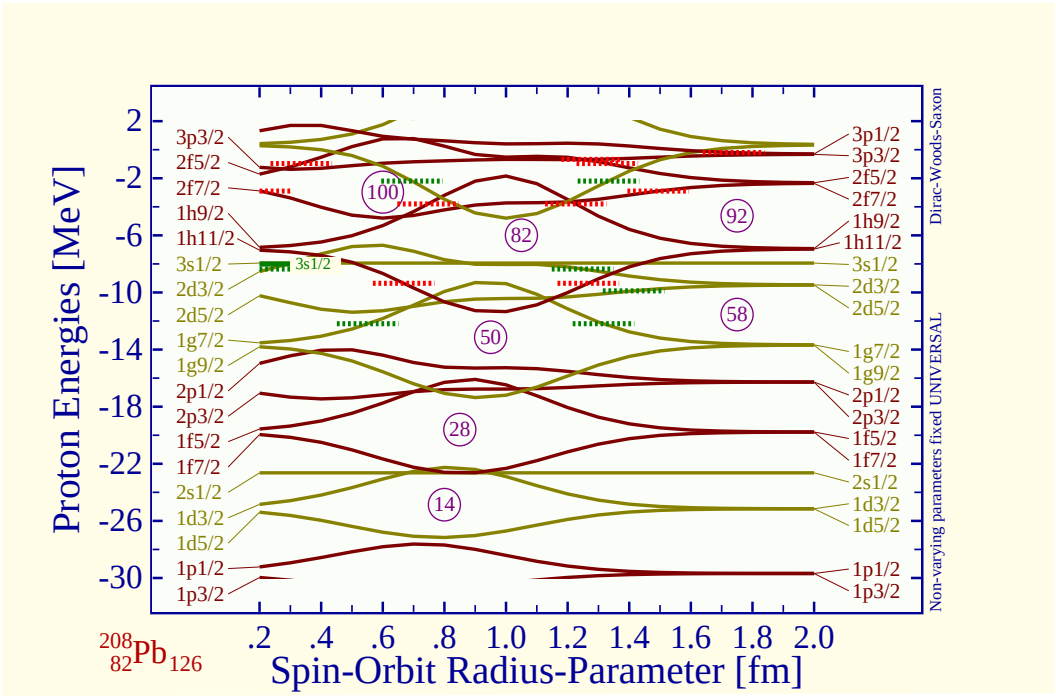


FIG. 2.7 – *Evolution des niveaux d'énergie en fonction du rayon du potentiel spin-orbite dans* ^{208}Pb *pour l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon. Les traits rouges et verts en pointillés figurent la position expérimentale des niveaux.*

Etudions les deux cas de figure $r \ll r_0^{so}$ et $r \gg r_0^{so}$. Dans le premier cas :

$$r \ll r_0^{so} \Longrightarrow f(r) \sim -\frac{V_0^{so}}{a_0^{so}} e^{-r_0^{so}/a_0^{so}} \tag{2.59}$$

tandis que dans le deuxième cas :

$$r \gg r_0^{so} \Longrightarrow f(r) \sim -\frac{V_0^{so}}{a_0^{so}} \frac{e^{r/a_0^{so}}}{\left[1+e^{r/a_0^{so}}\right]^2} \tag{2.60}$$

On voit donc sur les relations (2.59) et (2.60) que la fonction $f(r)$ a les comportements asymptotiques suivants :

$$f(r) \underset{r\to 0}{\longrightarrow} -\frac{V_0^{so}}{a_0^{so}} e^{-r_0^{so}/a_0^{so}} \tag{2.61}$$

$$f(r) \underset{r\to +\infty}{\longrightarrow} 0 \tag{2.62}$$

Par ailleurs on peut aisément vérifier que le maximum de cette fonction $f(r)$ est atteint en $r = r_0^{so}$. Autrement dit, pour un état individuel de moment angulaire $\ell \neq 0$ donné, la répulsion due au potentiel spin-orbite est maximum en $r = r_0^{so}$ et tend vers 0 lorsque $|r - r_0^{so}| \gg 1$. Il s'ensuit que si $r_0^{so} \ll 1$, alors la répulsion due au spin-orbite sera quasi-nulle dans tout le puits de potentiel ; si $r_0^{so} \gg r_0^{cen}$, où r_0^{cen} est le rayon du potentiel central, alors les éléments de matrice du type $\langle\varphi|\hat{V}_{so}|\varphi\rangle$ seront également tous nuls dans tout le puits de potentiel, les fonctions d'onde étant localisées approximativement dans la région $0 < r < r_{cen}$. Cela explique simplement la figure 2.7.

b) Cas relativiste

Dans le cas relativiste, les calculs sont un peu plus longs, mais tout aussi simples. Considérons toujours le cas simplifié d'un noyau sphérique. Le potentiel spin-orbite s'écrit alors d'après la formule (2.47) page 46 (appliquée dans le cas de la symétrie sphérique) :

$$\hat{V}_{so} = \beta \frac{1}{r} \frac{dV_{ls}}{dr} \vec{\ell} \cdot \vec{s} \tag{2.63}$$

où là encore β est une constante dépendant des unités, et $V_{ls}(r)$ s'écrit d'après la relation (2.48) :

$$\hat{V}_{ls}(\vec{r}) = \frac{m_0}{m^*(\vec{r})} U_{so}(r) \tag{2.64}$$

où $U_{so}(r)$ a la forme (2.57). Dans la figure 2.6, la masse effective est découplée du potentiel spin-orbite. Autrement dit, elle s'écrit :

$$m^*(r) = m_0 - \frac{1}{2} U_{eff}(r) \tag{2.65}$$

avec :

$$U_{eff}(r) = \frac{V_0^{eff}}{1 + e^{(r-r_0^{eff})/a_0^{eff}}} \tag{2.66}$$

Là encore, on va s'intéresser au comportement de la fonction $g(r) = dV_{ls}/dr$. Le calcul explicite donne :

$$g(r) = \frac{1}{(m^*)^2}\left\{ -\frac{V_0^{so}}{a_0^{so}} \frac{e^{(r-r_0^{so})/a_0^{so}}}{\left[1+e^{(r-r_0^{so})/a_0^{so}}\right]^2} m^* - \frac{V_0^{eff}}{a_0^{eff}} \frac{e^{(r-r_0^{eff})/a_0^{eff}}}{\left[1+e^{(r-r_0^{eff})/a_0^{eff}}\right]^2} \cdot \frac{V_0^{so}}{1+e^{(r-r_0^{so})/a_0^{so}}} \right\} \tag{2.67}$$

On se persuade aisément que l'expression (2.67) tend vers 0 lorsque r tend vers $+\infty$ (la masse effective $m^*(r)$ tendant alors vers la masse au repos m_0). Le cas le plus intéressant est $r \ll r_0^{so}$. En effet, dans ce cas, la relation (2.67) se simplifie (un peu) en :

$$g(r) \sim \frac{1}{(m^*)^2}\left\{ -\frac{V_0^{so}}{a_0^{so}} \frac{e^{-r_0^{so}/a_0^{so}}}{\left[1+e^{-r_0^{so}/a_0^{so}}\right]^2} m^* - \frac{V_0^{eff}}{a_0^{eff}} \frac{e^{(r-r_0^{eff})/a_0^{eff}}}{\left[1+e^{(r-r_0^{eff})/a_0^{eff}}\right]^2} \cdot \frac{V_0^{so}}{1+e^{-r_0^{so}/a_0^{so}}} \right\} \tag{2.68}$$

Supposons que l'on se place dans le cas particulier :

$$r \sim r_0^{eff}(\text{fixé}) \ll r_0^{so} \qquad \text{et} \qquad r_0^{so} \gg r_0^{cen} \gg 1 \tag{2.69}$$

Alors le premier terme de (2.68) est négligeable, et l'on obtient :

$$\boxed{g(r) \sim -\frac{1}{(m^*)^2} \frac{V_0^{eff} V_0^{so}}{a_0^{eff}} \frac{e^{(r-r_0^{eff})/a_0^{eff}}}{\left[1+e^{(r-r_0^{eff})/a_0^{eff}}\right]^2}} \tag{2.70}$$

Autrement dit, le potentiel spin-orbite avec masse effective indépendante produit une répulsion pour *toutes* les valeurs du rayon spin-orbite r_0^{so} supérieures à une certaine valeur critique, y compris lorsque le rayon du potentiel spin-orbite est supérieure à celui du potentiel central. Si l'on se place dans le cadre de la théorie RMF stricte, c'est-à-dire avec une masse effective ayant exactement les mêmes paramètres que le potentiel spin-orbite, nous nous attendons à retrouver le cas non relativiste. En effet, remplaçons dans (2.70) tous les paramètres de la masse effective indépendante par ceux du potentiel spin-orbite, nous trouvons :

$$g(r) \sim -\frac{1}{(m^*)^2} \frac{V_0^{so} V_0^{so}}{a_0^{so}} \frac{e^{(r-r_0^{so})/a_0^{so}}}{\left[1+e^{(r-r_0^{so})/a_0^{so}}\right]^2} \tag{2.71}$$

Mais pour $r \ll r_0^{so}$, cette fonction $g(r)$ tend vers 0, le maximum étant toujours atteint pour $r = r_0^{so}$. Par conséquent, si $r_0^{so} \gg r_0^{cen}$, alors nous nous retrouverons dans le cas non-relativiste, à savoir que les éléments de matrice du potentiel spin-orbite sur les états individuels seront quasi-nuls.

Par rapport au cas non-relativiste (sans masse effective du tout), il y a cependant une petite différence due au fait que la masse effective intervient aussi dans l'énergie cinétique (voir équation (2.27) page 44). Qualitativement, si la masse effective est plus faible que

la masse au repos, alors l'énergie cinétique est plus importante. Par conséquent, les états individuels sont moins profonds. Si le rayon de masse effective est faible, $r_0^{eff} \ll r_0^{cen}$ alors dans le puits de potentiel, l'énergie cinétique correspond au cas non-relativiste (qui fait intervenir la masse au repos). Si par contre, le rayon de masse effective est supérieur au rayon central, alors dans le puits de potentiel, l'énergie cinétique doit être calculée avec la masse effective qui correspond à peu près à 70 % de la masse au repos. Donc dans ce cas, elle sera *supérieure* au cas non-relativiste, et par conséquent, les niveaux individuels seront *moins profonds*. La figure 2.8 illustre toutes ces remarques.

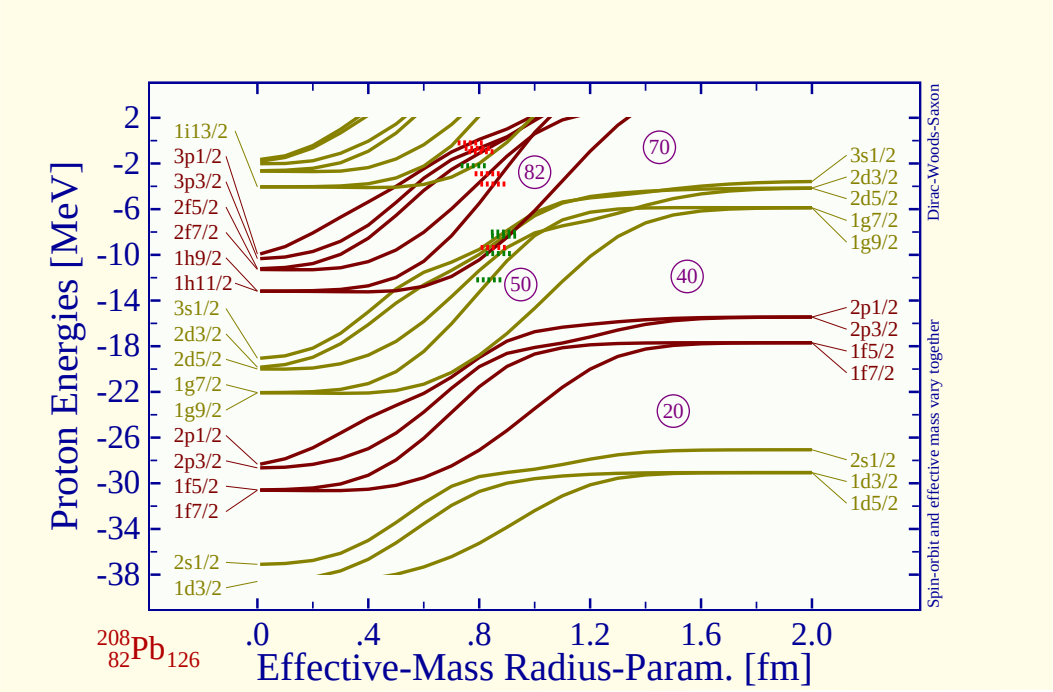


FIG. 2.8 – *Evolution des niveaux d'énergie dans* ^{208}Pb *en fonction du rayon du potentiel de masse effective (égal au rayon du potentiel spin-orbite, hamiltonien de Dirac avec 6 paramètres).*

On voit bien la dégénérescence des niveaux $j = \ell \pm 1/2$ dans les deux cas $r_0^{so} \ll 1$ et $r_0^{so} > r_0^{cen}$, et on constate que, comme prévu, les niveaux d'énergie sont plus hauts pour des rayons $r_0^{so} (= r_0^{eff}$!!) élevés.

Etudions maintenant l'influence de la profondeur V_0^{so} du potentiel spin-orbite sur les niveaux individuels dans les cas relativistes. Le cas le plus simple (et le moins intéressant) est celui de la masse effective indépendante, qui se ramène en fait au cas non-relativiste. En effet, dans ce cas, augmenter V_0^{so} revient simplement à augmenter « linéairement » l'intensité de la répulsion entre états $j = \ell \pm 1/2$. On obtient donc une figure très semblable à la figure (2.4).

Par contre, le cas où la masse effective a la même géométrie que le potentiel spin-orbite est beaucoup plus intéressant. En effet, augmenter V_0^{so} revient alors à augmenter également V_0^{eff}. Si l'on augmente V_0^{eff}, cela signifie que l'on diminue m^* par rapport à m_0, autrement dit, que l'on augmente l'énergie cinétique, et donc que l'on surélève les niveaux d'énergie. Par conséquent, l'augmentation de V_0^{so} doit se traduire par :

- une élévation de tous les niveaux individuels ;
- une augmentation de la répulsion entre niveaux $j = \ell \pm 1/2$ (qui peut donc *de facto* modifier la courbure des niveaux de grand ℓ par rapport à ceux de petit ℓ).

La figure 2.9 illustre toutes ces remarques.

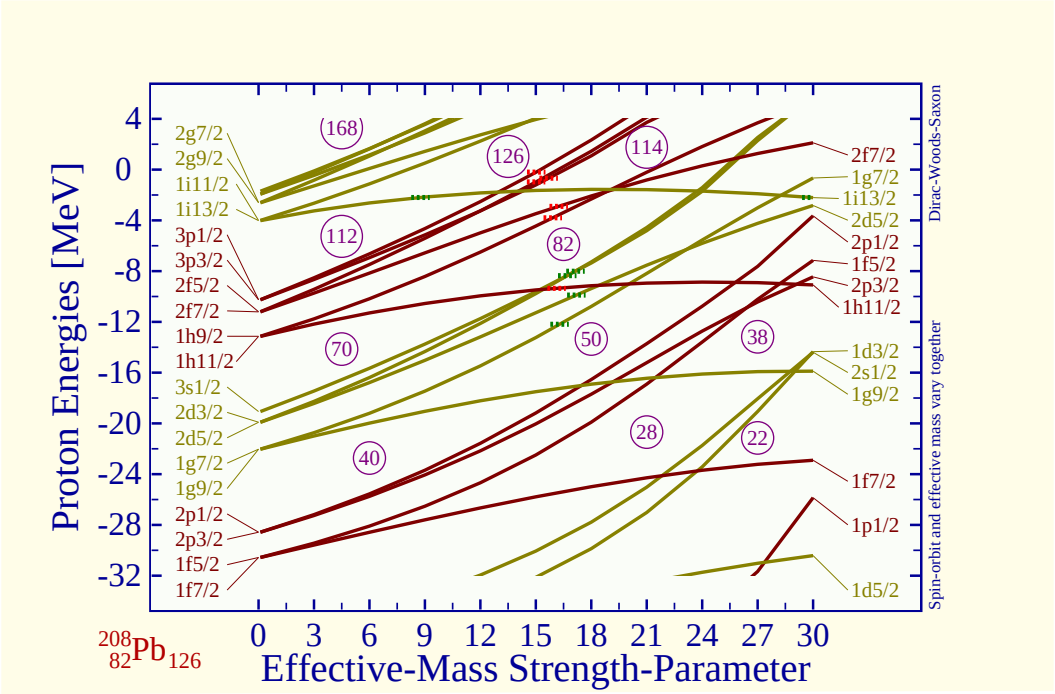


FIG. 2.9 – *Evolution des niveaux d'énergie dans ^{208}Pb en fonction de la profondeur du potentiel de masse effective (égal à celle du potentiel spin-orbite).*

Pour être complet sur le potentiel spin-orbite, il faut également donner la figure correspondant à la variation de la diffusivité de ce potentiel lorsque la masse effective a la même géométrie. C'est la figure 2.10. Là encore, et de façon un peu surprenante, on remarque que la diffusivité du potentiel n'a pas une grande influence sur les positions des niveaux individuels. Néanmoins, il faut à ce point faire une remarque importante : lorsque, dans le chapitre 3, nous chercherons les meilleurs paramètres de l'hamiltonien de Dirac, nous devrons non seulement tenir compte des positions des niveaux individuels par rapport à l'expérience, mais également des rayon carrés moyens. Or si la diffusivité n'a, comme on le voit, guère d'influence sur les niveaux d'énergie, elle en a une sur les rayons carrés moyens.

2.2.3 La masse effective « indépendante »

Après avoir étudié successivement les propriétés mathématiques et les conséquences physiques du potentiel central et du potentiel spin-orbite dans les trois cas possibles (non-relativiste, relativiste avec masse effective découplée du potentiel spin-orbite, relativiste avec masse effective liée au potentiel spin-orbite), nous pouvons nous focaliser maintenant sur la géométrie de la masse effective, indépendamment du potentiel spin-orbite[3].

[3]**Il faut entendre ici que l'on fait varier seulement les paramètres de la masse effective. Mais ce faisant, on modifie indirectement le potentiel spin-orbite puisque celui-ci dépend de**

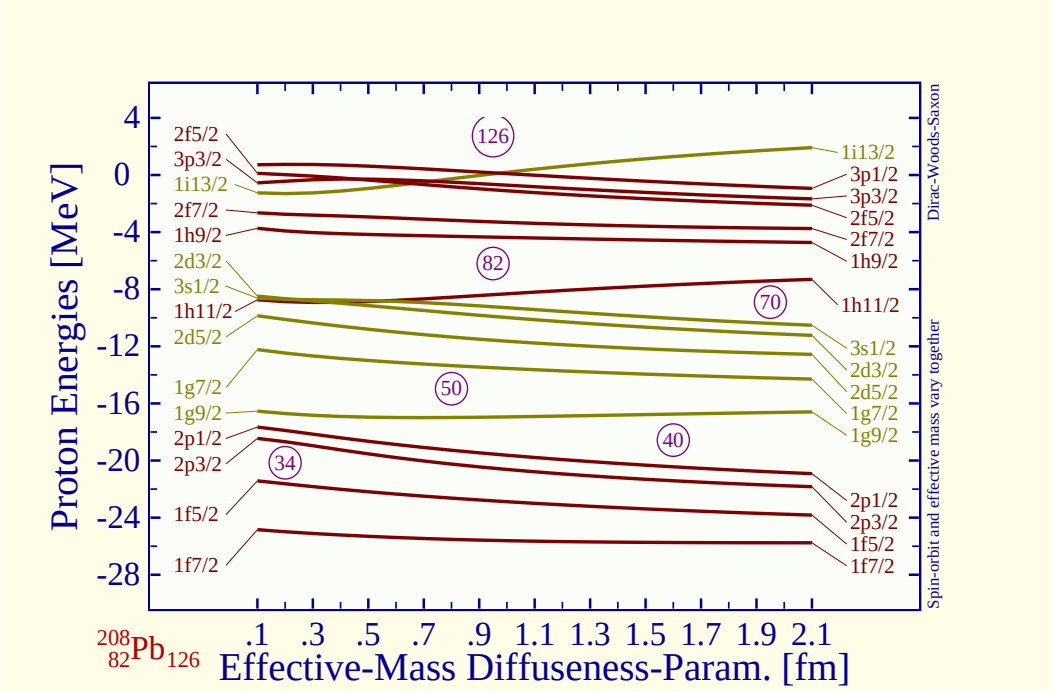


FIG. 2.10 – *Evolution des niveaux d'énergie dans* ^{208}Pb *en fonction de la diffusivité du potentiel de masse effective (égal à celle du potentiel spin-orbite).*

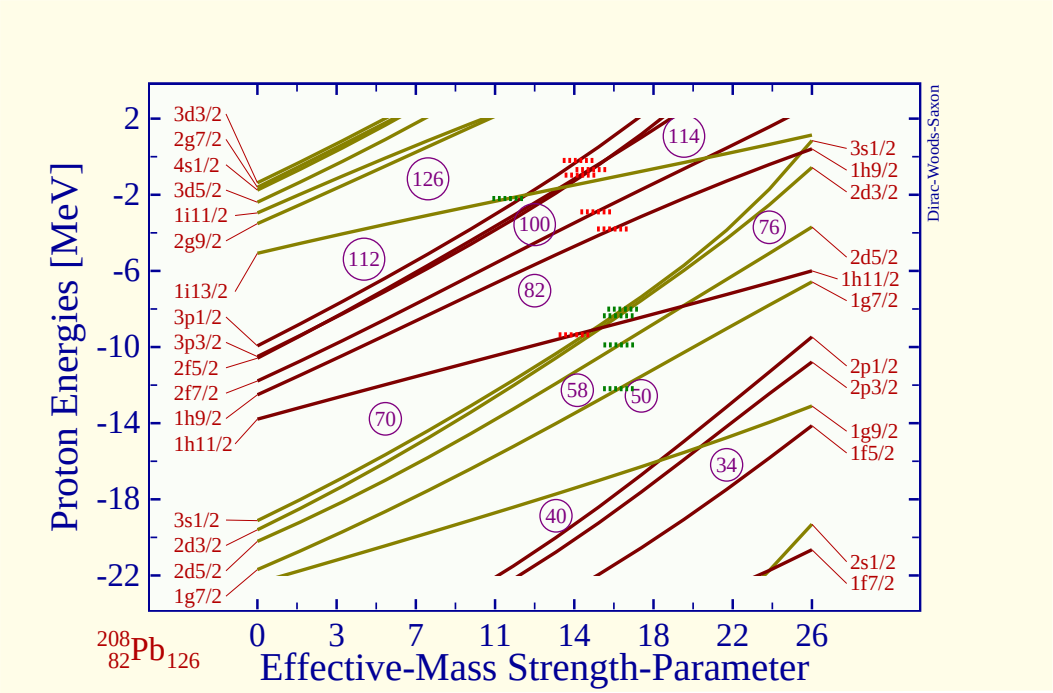


FIG. 2.11 – *Evolution des niveaux d'énergie dans* ^{208}Pb *en fonction de la profondeur du potentiel de masse effective (différente de celle du potentiel spin-orbite).*

la masse effective.

L'interprétation de la figure 2.11 ne pose pas de problème particuliers, puisque nous avons déjà tous les outils nécessaires. L'élévation des niveaux individuels s'explique par le fait que, V_0^{eff} augmentant, la masse effective m^* diminue par rapport à m_0, donc l'énergie cinétique augmente, ce qui implique que les niveaux sont moins profonds. Par ailleurs, la diminution de la masse effective m^* se traduit également par l'augmentation de l'intensité du potentiel spin-orbite (voir relation (2.64) page 54), ce qui entraîne une augmentation de l'écart entre niveaux $j = \ell \pm 1/2$ (augmentation d'autant plus grande que ℓ est élevé).

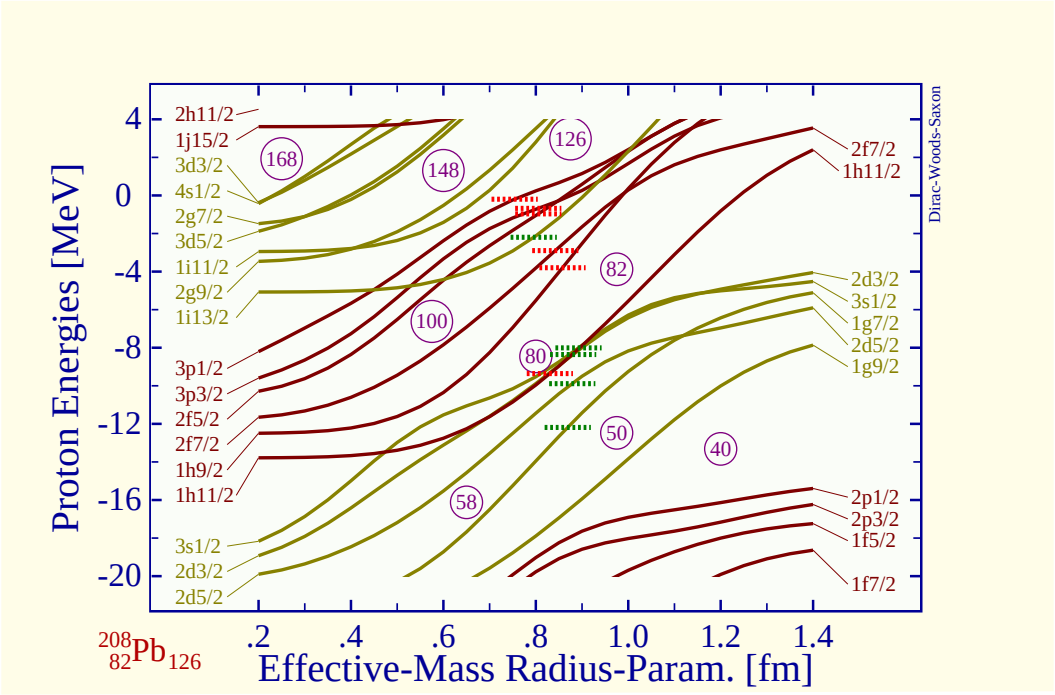


FIG. 2.12 – *Evolution des niveaux d'énergie dans ^{208}Pb en fonction du rayon du potentiel de masse effective (différent de celui du potentiel spin-orbite).*

De même, l'interprétation de l'effet de l'augmentation de r_{eff} sur les niveaux individuels (figure 2.12) est assez aisée : Le décalage vers le haut des niveaux d'énergie a déjà été expliqué lors de la discussion de la figure 2.8. En fait, contrairement peut-être à ce qu'on pourrait croire, la figure 2.12 est assez analogue à la figure 2.6 : la seule différence vient de ce décalage des niveaux d'énergie vers le haut pour les grandes valeurs du rayon r_0^{eff}.

Rappelons néanmoins que ces interprétations sont strictement qualitatives et ne prétendent pas à être des démonstrations : leur but est simplement de faciliter la compréhension globale du comportement des niveaux individuels en fonction de la variation des paramètres des potentiels. Qui plus est, une analyse un peu plus précise des différentes figures que nous venons de présenter se devrait de mettre en évidence de façon rigoureuse les différentes symétries qui semblent se manifester dans quelques cas (par exemple la symétrie « pseudo-ℓ », ou bien les conséquences d'un éventuel effet Landau-Zener sur les niveaux d'énergie). Pour l'instant une telle analyse n'a pas été faite.

Il faut également remarquer combien chaque paramètre de chaque potentiel a une influence importante, non-triviale et unique sur les niveaux d'énergie individuels. En particulier, une variation de 20 à 30 % de la valeur d'un paramètre, pour peu que cette variation ait

lieu dans une région de forte amplitude de ce paramètre, peut entraîner des conséquences aussi importantes que la fermeture des gaps magiques (et l'ouverture simultanée de nouveaux gaps non physiques). Il faut donc attirer l'attention sur le danger sous-jacent à toute théorie relativiste : la présence de la masse effective crée une certaine « instabilité » de l'hamiltonien vis-à-vis de la géométrie de ces potentiels. En particulier, il peut être assez dangereux d'ajuster les paramètres des potentiels (ou des constantes de couplage méson-nucléon dans le cas de la RMF) seulement sur certaines observables comme les rayons carrés moyens et pas sur d'autres.

2.3 IMPLÉMENTATION - LE CODE WS-ODD

Nous allons dans cette section présenter brièvement les caractéristiques principales du code WS-ODD qui sert de pierre angulaire à tout notre travail. Ce code, initialement écrit par J. Dobaczewski et J. Dudek, a été hautement optimisé et étendu ces deux dernières années (ce fut d'ailleurs l'un des aspects de mon travail de thèse) pour permettre des calculs intensifs et une compatibilité maximale avec notamment le code Hartree-Fock HF-ODD développé par les mêmes personnes.

Le code WS-ODD diagonalise un hamiltonien de type Woods-Saxon, mais l'hamiltonien peut être relativiste (comme celui que nous venons de présenter), ou non-relativiste. Dans le premier cas, l'utilisateur peut choisir les paramètres du champ moyen de Dirac, dans le deuxième cas, quatre paramétrisations différentes sont implémentées par défaut : la paramétrisation dite universelle, celle de Rost, celle de Cepurnov, et celle dite « optimale ».

La géométrie du champ moyen est fixée par l'utilisateur, et peut comprendre n'importe quelle déformation multipolaire jusqu'à $\lambda = 8$, la seule contrainte étant la présence d'un plan de symétrie. Le programme comprend une option qui, selon l'ordre multipolaire des déformations présentes, détermine si la parité et la signature sont conservées (λ pair) ou si seule la symétrie de simplex est conservée (λ impair). Ces symétries sont utilisées pour accélérer la diagonalisation de l'hamiltonien en réduisant ou non la taille des matrices du champ moyen.

Le programme est capable de calculer (au choix de l'utilisateur) : les énergies propres et les labels cartésiens, sphériques ou cylindriques (Nilsson), les occupations individuelles de type BCS (l'option de projection du nombre de particules est également implantée), les densités de charge proton ou neutron, les représentations spatiales des fonctions d'onde radiales individuelles et les moments multipolaires. Enfin, le code a naturellement été écrit de façon à calculer les routhiens individuels en fonction de la fréquence de rotation.

2.3.1 La base cartésienne de l'oscillateur harmonique

La base utilisée dans le code WS-ODD est dérivée de celle de l'oscillateur harmonique cartésien. Un état individuel est caractérisé par les nombres quantiques spatiaux n_x, n_y et n_z et la projection de son spin $s_z = \pm 1/2$. La partie spatiale sera notée $|n\rangle = |n_x, n_y, n_z\rangle$

et la partie de spin $|s_z\rangle$. Nous allons ici donner quelques détails sur les fonctions d'onde spatiales.

L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique s'écrit sous la forme :

$$H_{osc} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{\nabla}^2 + \frac{1}{2}m_0(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \tag{2.72}$$

et les fonctions propres de cet hamiltonien $\Psi_{n_x n_y n_z}$ vérifient l'équation de Schrödinger :

$$H_{osc}\Psi_{n_x n_y n_z} = E_{n_x n_y n_z}\Psi_{n_x n_y n_z} \tag{2.73}$$

Le problème est séparable en x, y et z, ce qui signifie que les fonctions propres peuvent se décomposer comme :

$$\Psi_{n_x n_y n_z} = \varphi_{n_x}(x)\,\varphi_{n_y}(y)\,\varphi_{n_z}(z) \tag{2.74}$$

Pour faciliter les calculs, on introduit les grandeurs sans dimensions :

$$\xi_\mu = b_\mu x_\mu \qquad \mu = x, y, z \tag{2.75}$$

où les nombres b_μ sont définis par :

$$b_\mu = \sqrt{\frac{m_0\,\omega_\mu}{\hbar}} \qquad \mu = x, y, z \tag{2.76}$$

On peut alors montrer que les fonctions propres à une dimension s'écrivent :

$$\boxed{\varphi_{n_\mu}(x_\mu) = \sqrt{b_\mu}\exp(-\xi_\mu^2/2)\,H_{n_\mu}^{(0)}(\xi_\mu)} \tag{2.77}$$

où $n_\mu = 0, 1, 2, \ldots, \infty$ et le symbole $H_{n_\mu}^{(0)}$ représente le polynôme d'Hermite normalisé d'ordre n_μ :

$$H_{n_\mu}^{(0)}(\xi_\mu) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^{n_\mu}\,n_\mu!}}H_{n_\mu}(\xi_\mu) \tag{2.78}$$

Ces fonctions d'onde vérifient les conditions d'orthonormalité :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_{n_\mu}^*(x_\mu)\varphi_{n'_\mu}(x_\mu)\,dx_\mu = \int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\xi_\mu^2}H_{n_\mu}^{(0)}(\xi_\mu)H_{n'_\mu}^{(0)}(\xi_\mu)\,d\xi_\mu = \delta_{n_\mu n'_\mu} \tag{2.79}$$

Il est bien connu que les énergies propres de l'oscillateur à une dimension se mettent sous la forme :

$$E_{n_\mu} = \hbar\omega_\mu\left(n_\mu + \frac{1}{2}\right) \tag{2.80}$$

et donc les énergies totales s'écrivent :

$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega_x\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y\left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z\left(n_z + \frac{1}{2}\right) \tag{2.81}$$

Dans le cas particulier de la symétrie sphérique, toutes les fréquences sont égales : $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega_0$ et l'on peut écrire :

$$\boxed{E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega_0 \left(N + \frac{3}{2}\right)} \tag{2.82}$$

avec le nombre quantique principal :

$$\boxed{N = n_x + n_y + n_z} \tag{2.83}$$

Les niveaux caractérisés par le nombre quantique N sont tous dégénérés (il y a plusieurs combinaisons de n_x, n_y et n_z qui peuvent conduire à une valeur N donnée), et lé dégénérescence vaut :

$$d_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2) \tag{2.84}$$

L'ensemble des niveaux à N donné forme une *couche*, et deux couches sont séparées par une distance $\Delta = \hbar\omega \sim \dfrac{41}{A^{1/3}}$ MeV

2.3.2 Calcul des élements de matrice - Exemple

Une fois introduites les principales caractéristiques des fonctions d'onde spatiales de la base de l'oscillateur harmonique, on peut montrer comment le code a été optimisé pour tirer parti des propriétés des polynômes d'Hermite, et donc accélérer significativement les calculs. Pour mieux comprendre cette section, il est conseillé d'avoir lu au préalable l'annexe C sur les bases de simplex utilisées dans le code. A titre d'exemple, nous allons montrer comment calculer les éléments de matrice de l'opérateur $f(x,y,z)\hat{p}_x$ où $f(x,y,z)$ est une fonction quelconque.

a) Quelques rappels

Rappelons dans un premier temps quelques notations. Un état de l'oscillateur harmonique est noté $|n\rangle \equiv |n_x, n_y, n_y\rangle$. A partir de cet état, on construit la base $\mathcal{B}$ comme indiqué dans les relations (C.9)-(C.10) page 185 :

$$\boxed{\begin{aligned} |b\rangle &= +i^{n_y}|n\rangle|+\rangle \quad (2.85)\\ |\bar{b}\rangle &= -i^{-n_y}|n\rangle|-\rangle \quad (2.86)\end{aligned}}$$

Cette base n'est autre que celle de l'oscillateur harmonique à laquelle on a rajouté le spin (en choisissant une certaine convention de phase). A partir de cette base $\mathcal{B}$, on construit une base propre de l'opérateur de simplex, base que l'on notera $\mathcal{T}$, selon les relations (C.19)-(C.20) page 188 :

$$|t_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(i|b\rangle - |\bar{b}\rangle\right) \quad (2.87)$$

$$|t_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|b\rangle - i|\bar{b}\rangle\right) \quad (2.88)$$

Cette base est celle qui est utilisée dans le programme : elle possède un certain nombre de propriétés particulières qui sont rappelées dans l'annexe C. La plus importante est la suivante : suivant les relations de commutation ou d'anti-commutation d'un opérateur quelconque avec l'opérateur de simplex et celui de renversement du temps, la matrice de cet opérateur dans la base $\mathcal{T}$ a une certaine structure en blocs, et il suffit de calculer certains blocs pour définir entièrement la matrice totale de l'opérateur.

Supposons par exemple que l'on souhaite calculer les éléments de matrice de l'opérateur $\sigma_x \cdot \hat{p}_x$. Il est facile de se convaincre que cet opérateur commute avec l'opérateur de renversement du temps, et anti-commute avec le simplex. La conséquence est qu'il a une structure anti-diagonale par bloc dans la base $\mathcal{T}$. Il suffit donc de calculer l'un des blocs, par exemple $\langle t'_+|\sigma_x \cdot \hat{p}_x|t_-\rangle$, l'autre bloc se déduisant de celui-ci (tableaux C.1 page 198) :

$$\langle t'_-|\sigma_x \cdot \hat{p}_x|t_+\rangle = \langle t'_+|\sigma_x \cdot \hat{p}_x|t_-\rangle^* \quad (2.89)$$

Par ailleurs, on a la relation suivante (équations (C.68)-(C.71) page 194) :

$$\langle t'_+|\sigma_x \cdot \hat{p}_x|t_-\rangle = F(n'_y + n_y)\langle n'|\hat{p}_x|n\rangle \quad (2.90)$$

ce qui fait qu'il ne nous reste en fait qu'à déterminer les éléments de matrice de l'opérateur $\hat{p}_x$ sur les vecteurs $|n_x, n_y, n_y\rangle$. Rappelons si besoin en était que ces vecteurs sont en fait les fonctions (2.77), et font donc intervenir les polynômes de Hermite. Là encore, on va se servir des propriétés particulières de ces polynômes pour optimiser le temps de calcul numérique.

b) Calcul des éléments de matrice de $f(x, y, z)\hat{p}_x$

L'opérateur $\hat{p}_x$ n'agissant que sur la variable x, il nous suffit de calculer l'action de $\hat{p}_x$ sur $\varphi_{n_x}(x)$. On a :

$$\hat{p}_x\varphi_{n_x}(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi_{n_x}(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left\{\sqrt{b_x}H^{(0)}_{n_x}(\xi_x)\, e^{-\frac{1}{2}\xi_x^2}\right\} \quad (2.91)$$

Or on sait que :

$$\frac{\partial}{\partial x} = b_x\frac{\partial}{\partial \xi_x}$$

Donc :

$$\hat{p}_x\varphi_{n_x}(x) = -i\hbar b_x^{3/2}\frac{\partial}{\partial \xi_x}\left\{H^{(0)}_{n_x}(\xi_x)\, e^{-\frac{1}{2}\xi_x}\right\} \quad (2.92)$$

Or les polynômes de Hermite normalisés vérifient la propriété suivante [Abr64] :

$$\frac{\partial}{\partial \xi_x}\left\{ e^{-\frac{1}{2}\xi_x^2}\, H_{n_x}^{(0)}(\xi_x)\right\} = e^{-\frac{1}{2}\xi_x^2}\, H_{n_x}^{(1)}(\xi_x) \tag{2.93}$$

où $H_{n_x}^{(1)}$ est le polynôme d'Hermite normalisé d'ordre $n_x + 1$, qui s'écrit :

$$H_{n_x}^{(1)}(\xi_x) = 2n_x H_{n_x-1}^{(0)}(\xi_x) - \xi_x H_{n_x}^{(0)}(\xi_x)$$

On a donc :

$$\hat{p}_x \varphi_{n_x}(x) = -i\hbar b_x^{3/2} e^{-\frac{1}{2}\xi_x^2}\, H_{n_x}^{(1)}(\xi_x) \tag{2.94}$$

En réintroduisant explicitement la fonction d'onde complète : $\Psi_{n_x n_y n_z} = \varphi_{n_x}(x)\,\varphi_{n_y}(y)\,\varphi_{n_z}(z)$, on obtient le résultat intermédiaire suivant :

$$\begin{aligned} f(x,y,z)\hat{p}_x \Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = -i\hbar f(x,y,z)\ & b_x^{3/2}\ e^{-\frac{1}{2}\xi_x^2}\ H_{n_x}^{(1)}(\xi_x) \\ & \times\ b_y^{1/2}\ e^{-\frac{1}{2}\xi_y^2}\ H_{n_y}^{(0)}(\xi_y) \\ & \times\ b_z^{1/2}\ e^{-\frac{1}{2}\xi_z^2}\ H_{n_z}^{(0)}(\xi_z) \end{aligned} \tag{2.95}$$

c) Décomposition d'un produit de polynômes d'Hermite

Nous verrons juste un peu plus loin qu'il pourra être avantageux d'exprimer le produit de deux polynômes d'Hermite comme une somme de polynômes individuels, c'est-à-dire sous la forme :

$$H_{n'}^{(d')}(\xi) H_n^{(d)}(\xi) = \sum_{k=0}^{n'+d'+n+d} C_{n'n}^k(d'd) H_k^{(0)}(\xi) \tag{2.96}$$

Grace à la relation (2.96), on peut maintenant calculer explicitement les éléments de matrice de l'opérateur $\hat{p}_x$. On cherche à exprimer des termes du type :

$$\langle n'|f(x,y,z)\,\hat{p}_x|n\rangle = \int d^3\vec{r}\ \Psi^*_{n'_x n'_y n'_z}(x,y,z)\, f(x,y,z)\,\hat{p}_x\,\Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) \tag{2.97}$$

Exprimons cet élément de matrice à l'aide de la relation (2.95). Il vient :

$$\begin{aligned} \langle n'|f(x,y,z)\,\hat{p}_x|n\rangle = \ & -i\hbar\, b_x^{3/2} b_y^{1/2} b_z^{1/2} \iiint dxdydz\, f(x,y,z) \\ & \times\ H_{n'_x}^{(0)}(\xi_x) H_{n_x}^{(1)}(\xi_x)\, H_{n'_y}^{(0)}(\xi_y) H_{n_y}^{(0)}(\xi_y)\, H_{n'_z}^{(0)}(\xi_z) H_{n_z}^{(0)}(\xi_z) \\ & \times\ e^{-\xi_x^2-\xi_y^2-\xi_z^2} \end{aligned} \tag{2.98}$$

Tirons profit maintenant de la relation (2.96) et remplaçons dans (2.98) tous les produits de polynômes d'Hermite par des sommes :

$$\begin{aligned}\langle n'|f(x,y,z)\,\hat{p}_x|n\rangle = \; & -i\hbar\, b_x^{3/2} b_y^{1/2} b_z^{1/2} \sum_{k_x=0}^{n'_x+n_x+1} \sum_{k_y=0}^{n'_y+n_z} \sum_{k_z=0}^{n'_z+n_z} C^{k_x}_{n'_x n_x}(01)\, C^{k_y}_{n'_y n_y}(00)\, C^{k_z}_{n'_z n_z}(00) \\ & \times \iiint dxdydz\, f(x,y,z) H^{(0)}_{k_x}(\xi_x)\, H^{(0)}_{k_y}(\xi_y)\, H^{(0)}_{k_z}(\xi_z)\; e^{-\xi_x^2-\xi_y^2-\xi_z^2}\end{aligned} \tag{2.99}$$

Maintenant, notons $W(k_x, k_y, k_z)$ la quantité :

$$\boxed{W(k_x,k_y,k_z) = b_x^{1/2} b_y^{1/2} b_z^{1/2} \iiint d\xi_x d\xi_y d\xi_z\; f\left(\frac{\xi_x}{b_x}, \frac{\xi_y}{b_y}, \frac{\xi_z}{b_z}\right) H^{(0)}_{k_x}(\xi_x)\, H^{(0)}_{k_y}(\xi_y)\, H^{(0)}_{k_z}(\xi_z)\; e^{-\xi_x^2-\xi_y^2-\xi_z^2}} \tag{2.100}$$

On peut facilement montrer qu'avec cette notation, les éléments de matrice de l'opérateur $\hat{p}_x$ s'écrivent en fin de compte :

$$\boxed{\langle n'|\hat{p}_x|n\rangle = -i\hbar\, b_x \sum_{k_x=0}^{n'_x+n_x+1} \sum_{k_y=0}^{n'_y+n_z} \sum_{k_z=0}^{n'_z+n_z} C^{k_x}_{n'_x n_x}(01)\, C^{k_y}_{n'_y n_y}(00)\, C^{k_z}_{n'_z n_z}(00)\, W(k_x,k_y,k_z)} \tag{2.101}$$

En conclusion, cette méthode de calcul des éléments de matrice des divers opérateurs nécessaires, qui peut sembler un peu compliquée, permet de remplacer, pour chaque élément de matrice (*a priori* il y a en a N^2, où N est la taille de la base utilisée) trois intégrations unidimensionnelles par une sommation algébrique (les termes $W(k_x, k_y, k_z)$ étant calculés au début du code). Le nombre total d'intégrations effectives à effectuer est donc substantiellement réduit, et la vitesse d'exécution du programme d'autant augmentée.

d) Quelques mots sur la méthode d'intégration

Avant de conclure cette partie sur les algorithmes utilisés dans le code WS-ODD, il peut être bon de mentionner brièvement la méthode d'intégration utilisée. Nous employons une méthode de Gauss-Legendre pour intégrer les polynômes d'Hermite. Cette méthode présente l'avantage d'être exacte pourvu que l'ordre des polynômes à intégrer satisfasse certaines relations.

La relation générale de quadrature est :

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx = \sum_{k=1}^{N} A_k f(x_k) \tag{2.102}$$

où $\rho(x)$ est une fonction de poids, $f(x)$ est la fonction à intégrer entre les bornes a et b (qui peuvent être infinies). Les nombres A_k sont appelés les poids, et les x_k sont les nœuds. Les intégrales (2.100) font clairement apparaître que la fonction de poids doit être, dans notre cas :

$$\rho(x) = e^{-x^2}$$

et que les bornes sont infinies. Pour $N \geq 1$ fixé, on peut montrer que la formule (2.102) est *exacte* pour n'importe quel polynôme $P_n(x)$ tel que $n \leq 2N-1$:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) P_n(x) dx = \sum_{k=1}^{N} A_k P_n(x_k)} \tag{2.103}$$

Les nœuds de Gauss $x_k, k = 1, \ldots, N$ sont les racine de l'équation :

$$H_N(x) = 0$$

($H_N(x)$ est le polynôme d'Hermite d'ordre N) et les poids vérifient :

$$\boxed{A_k = \frac{2^{N+1} N! \sqrt{\pi}}{[H'_N(x_k)]^2}} \tag{2.104}$$

où H'_N est la dérivée du polynôme d'Hermite d'ordre N.

3. Paramétrisation du champ de Dirac

Nous avons présenté au chapitre précédent les équations vérifiées par chacun des deux spineurs ξ et η, ainsi que les différents potentiels qui intervenaient dans ces équations. Il est important de rappeler que les équations (2.9) et (2.10) sont totalement *équivalentes* à l'équation de Dirac (1.35). Par conséquent, résoudre le système de ces deux équations couplées, ou résoudre l'équation de Dirac revient exactement au même. L'approximation de masse effective fait certes disparaître cette équivalente *stricto sensu* mais nous avons vu que le terme d'ordre 2 (en $1/[m^*(\vec{r})]^2$) représentait une correction inférieure à 10^{-5} de l'équation exacte. Il serait donc faux de prétendre que l'équation (2.30) ne représente qu'une équation de Schrödinger dans laquelle aurait été incorporée un phénomène de masse effective (semblable dans l'esprit à celui existant dans les interactions effectives de Skyrme pour les approches Hartree-Fock). L'équation (2.30) représente au contraire une équation *complètement relativiste* du mouvement des nucléons (disons à 10^{-5} près). La seule restriction que l'on peut apporter est que cette équation n'est plus explicitement covariante puisqu'elle correspond au choix d'un référentiel d'inertie donné.

Dès lors, nous pouvons envisager de résoudre cette équation par des moyens différents de ceux employés dans l'approche RMF. En effet, nous avons mentionné au chapitre 1 les principales hypothèses sur lesquelles reposait cette théorie, et insisté sur le fait que certaines de ces approximations n'étaient pas suffisamment contrôlées (notamment l'omission du terme d'échange). En outre, le *contenu physique* des équations RMF est caché dans le mécanisme d'échange des mésons. Parmi les avantages certains d'une paramétrisation de l'hamiltonien (2.30) : la possibilité de comparer les potentiels avec ceux des méthodes non-relativistes, la facilité accrue de résolution des équations aux valeurs propres et la compréhension des phénomènes microscopiques qui sont à l'oeuvre dans le noyau. De façon générale, nous espérons que notre choix permettra de jeter un éclairage nouveau sur certains aspects de la théorie RMF (voir par exemple dans le chapitre 4 le paragraphe 4.3.5 page 120).

3.1 DÉTERMINATION DES PARAMÈTRES DES POTENTIELS

Rappelons la forme de l'équation (2.30) :

$$\left\{ \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m^*(\vec{r})} + \hat{V}_{cen}(\vec{r}) + \hat{V}_{so}(\vec{r}) + \hat{V}_p(\vec{r}) \right\} \xi_i = \varepsilon_i \xi_i \tag{3.1}$$

Les différents potentiels ont les expressions (2.32)-(2.34) page 44. Il a été montré que tous ces potentiels ne dépendent en fait que de deux termes $\hat{V}+\hat{S}$ et $\hat{V}-\hat{S}$ qui s'expriment dans le cadre de la théorie RMF comme la somme de champs mésoniques. Nous pouvons *choisir* de résoudre toutes les équations de la RMF de façon auto-cohérente, ou bien de paramétriser ces potentiels en ajustant les paramètres nécessaires sur des données expérimentales à définir. Il est important d'insister sur le fait qu'il s'agit d'un choix portant sur la méthode de résolution d'un problème donné, et non sur la nature de ce problème.

Dans les paragraphes suivants, nous allons présenter la manière dont nous avons déterminé un jeu possible de paramètres pour l'hamiltonien de Dirac. La méthode employée repose sur un puissant algorithme de minimisation dont le but était de réduire le plus possible l'incertitude portant sur les paramètres des potentiels. A notre connaissance, c'est la première fois qu'une telle méthodologie est utilisée dans ce contexte.

3.1.1 Position du problème

Pour déterminer les paramètres des potentiels de la façon la plus rigoureuse et la plus fiable possible, nous avons choisi une méthode semi-automatique reposant sur un algorithme de minimisation multi-dimensionnel. Comme il a été souligné en introduction, nous souhaitons obtenir *in fine* un hamiltonien capable de décrire avec une précision aussi grande que possible les propriétés à un corps des noyaux. De plus, ce modèle s'inscrit dans le cadre général des théories de champ moyen, et doit donc pouvoir s'appliquer dans des situations très diverses, des noyaux légers aux noyaux lourds, des isospins faibles aux isospins forts, des noyaux sphériques aux isomères de forme (en particulier de formes exotiques). Cette exigence d'« universalité » de notre hamiltonien pose des contraintes très fortes sur la détermination des paramètres : il ne serait d'aucun intérêt par exemple, d'être capable de décrire le spectre des niveaux individuels du plomb 208 avec une résolution de quelques dizaines de keV, si pour des noyaux tels que le calcium 40 ou les différents isotopes de l'étain, cette résolution devait se mesurer en MeV... Il apparaît donc indispensable de trouver une méthode fiable et puissante pour déterminer de façon aussi précise que possible les meilleurs paramètres possibles pour l'hamiltonien.

Il nous est apparu nécessaire, après quelques essais préliminaires, d'opérer une semi-automatisation de la procédure de détermination des paramètres. Le schéma général de cette automatisation sera le suivant : pour un noyau donné, pour un type de nucléon donné (proton ou neutron), nous allons construire une fonction F définie positive, dépendant des paramètres des potentiels, et qui servira comme une mesure de la différence entre les calculs théoriques et les résultats expérimentaux. Le choix de cette fonction est crucial, et nous allons revenir au paragraphe suivant sur la façon dont nous avons procédé. Dans un deuxième temps, nous allons essayer de minimiser cette fonction, de sorte que les calculs théoriques correspondent le mieux possible avec les valeurs expérimentales. Le résultat de la minimisation nous donne, pour le noyau et le type de nucléon sélectionnés au départ, un jeu de paramètres possibles. Il s'agit ensuite de répéter la procédure pour plusieurs noyaux différents, qui nous servent en quelque sorte d'étalons. Nous obtenons ainsi un ensemble de jeux de paramètres pour chaque noyau étalon, duquel nous pouvons ensuite extraire des paramètres « moyens », par interpolation, moyennage ou régression linéaire.

Le problème de la détermination d'un jeu de paramètres pour un noyau étalon est cependant très complexe. La « surface » dont nous cherchons à trouver les minima est une surface dans un espace à 6 paramètres. La forte non-linéarité du problème implique qu'il n'existe vraisemblablement pas une solution unique mais plusieurs, qui peuvent être très différentes les unes des autres. Par ailleurs, il est difficile de s'appuyer sur les paramètrisations existantes des hamiltoniens de Woods-Saxon non-relativistes, car la présence de la masse effective dans presque chaque terme de l'hamiltonien de Dirac rend toute comparaison directe peu fiable. Par conséquent, nous n'avons *a priori* aucune idée précise de la valeur que doivent prendre les paramètres de nos potentiels. A cela s'ajoutent encore des difficultés plus techniques liées à la minimisation elle-même.

3.1.2 Quelques difficultés supplémentaires...

a) Le choix de la fonction à minimiser

Forme de la fonction à minimiser - En premier lieu, le choix de la fonction à minimiser est primordial : c'est à travers la forme de cette fonction que se manifestent les critères physiques qui présideront à la détermination des paramètres. Supposons par exemple que nous exigions que notre hamiltonien soit capable de reproduire les rayons carrés moyens des noyaux atomiques. Nous pouvons choisir comme fonction une expression du type :

$$\chi^2_{r.m.s.}(p) = \left[R^{(the)}_{r.m.s.}(p) - R^{(exp)}_{r.m.s.}\right]^2 \tag{3.2}$$

où p symbolise la dépendance de la fonction par rapport aux 6 paramètres des potentiels. Nous pouvons maintenant exiger également que la fonction contienne un terme proportionnel au « gap »[1], du type :

$$\chi^2_{gap}(p) = \left[Gap^{(the)}(p) - Gap^{(exp)}\right]^2 \tag{3.3}$$

Maintenant, si nous exigeons à la fois de reproduire, avec une précision satisfaisante, et le gap, et le rayon carré moyen, nous sommes amenés à construire une fonction composée :

$$\chi^2(p) = W_{rms}\chi^2_{rms}(p) + W_{Gap}\chi^2_{gap}(p) \tag{3.4}$$

où $W_{r.m.s.}$ et W_{Gap} sont des poids qui permettent de choisir quel terme doit être prépondérant. La fonction (3.4) est bien définie positive, et à la limite, si elle vaut 0, cela signifie que le rayon carré moyen et le gap calculés par la théorie ont exactement la valeur expérimentale.

Les diverses observables sur lesquelles nous allons construire notre fonction seront :

- les niveaux de particules individuels ;
- le rayon carré moyen $R_{r.m.s.}$;
- le gap ;

[1] **Le « gap » est défini comme l'écart en énergie entre le dernier niveau occupé et le premier niveau inoccupé. Comme les noyaux étudiés ici sont doublement magiques, cela correspond en fait à l'écart énergétique entre deux couches N.**

- la position du niveau de Fermi λ ;
- la densité de niveaux au-dessus et en dessous du niveau de Fermi ;

Il est évident que si le spectre des niveaux individuels reproduit parfaitement le spectre expérimental, alors par voie de conséquence les densités de niveaux ainsi que le gap sont également à leurs valeurs expérimentales. Par contre rien ne nous dit que le rayon carré moyen sera correct. Par voie de conséquence, si nous incorporons toutes les observables mentionnées ci-dessus dans notre fonction, nous sommes certains d'obtenir à la fin les paramètres optimums. Pour des raisons de faisabilité cependant, il est important d'essayer de trouver la forme de la fonction qui donne *le plus rapidement possible* des paramètres utilisables.

Au cours des calculs, il est ainsi apparu que deux grandeurs avaient une influence essentielle sur la qualité des résultats : la position des niveaux individuels et la valeur du rayon carré moyen. Le type de fonction que nous avons utilisée ressemblait donc le plus souvent à :

$$\boxed{\chi^2(p) = W_{sp}\chi^2_{sp}(p) + W_{rms}\chi^2_{rms}(p) + W_{gap}\chi^2_{gap}(p) + W_\lambda\chi^2_\lambda(p)} \tag{3.5}$$

où $\chi^2_{r.m.s.}$ et χ^2_{gap} ont les mêmes expressions que dans l'exemple ci-dessus. χ^2_λ représente le terme proportionnel à l'énergie de Fermi du noyau, c'est-à-dire en fait un terme proportionnel à l'énergie de liaison du dernier nucléon :

$$\chi^2_\lambda = \left[\lambda^{(the)} - \lambda^{(exp)}\right]^2 \tag{3.6}$$

et χ^2_{sp} le terme proportionnel à la position des niveaux individuels :

$$\chi^2_{sp} = \sum_{k,l}(2j+1)\left\{|\varepsilon^{th}_k - \varepsilon^{th}_l| - |\varepsilon^{exp}_k - \varepsilon^{exp}_l|\right\}^2 \tag{3.7}$$

La forme (3.7) peut paraître un peu plus compliquée qu'il ne devrait, mais la raison d'un tel choix est la suivante : la minimisation ne va pas donner un minimum parfait, i.e. où tous les niveaux individuels sont à la bonne place, celle déterminée par l'expérience. Plus probablement, certains niveaux seront très proches de leur position expérimentale, d'autre en seront plus éloignés. Il nous faut éviter autant que possible de nous retrouver dans le cas où « presque » tous les niveaux sont « presque » tous au bon endroit, excepté un niveau qui en est très éloigné. Dans ce cas l'algorithme de minimisation peut considérer les paramètres obtenus comme idéaux, alors que du point de vue de la description *physique* du noyau, une telle solution n'est pas acceptable. La construction (3.7) sert en fait à optimiser la position *relative de tous les niveaux individuels.*

Facteurs de poids - Le terme $(2j+1)$ se justifie de la manière suivante : les niveaux de grand j, tels que $i_{13/2}$ ou $j_{15/2}$, sont très sensibles à une petite variation du potentiel spin-orbite. Par ailleurs, il est très important de positionner correctement ces niveaux dans la perspective des applications aux noyaux en rotation : en effet, ce sont ces orbitales dite intruses (voir le chapitre 3 consacré aux noyaux en rotation) qui déterminent en grande partie le comportement dynamique des noyaux superdéformés. Il nous a donc paru important d'augmenter la contrainte sur ces orbitales intruses par un facteur proportionnel à la dégénérescence des niveaux sphériques.

Par ailleurs, dans la plupart de nos calculs, il s'est avéré nécessaire pour accélérer la convergence de l'algorithme de prendre des facteurs de poids $W_{rms} > 500$ et $W_{sp} \sim 10$ tandis que $W_{Gap} \sim 1$ et $W_\lambda \sim 1$ étaient en général suffisants. L'importance du facteur de poids W_{rms} vient de ce que les écarts sur la valeur du rayon carré moyen sont en général de l'ordre de 10^{-1} (au début de la procédure), donc $\chi^2_{rms} \sim 10^{-2}$. Pour que le comportement de la fonction totale (3.7) soit influencé par le rayon carré, il est donc nécessaire d'avoir un facteur de poids élevé.

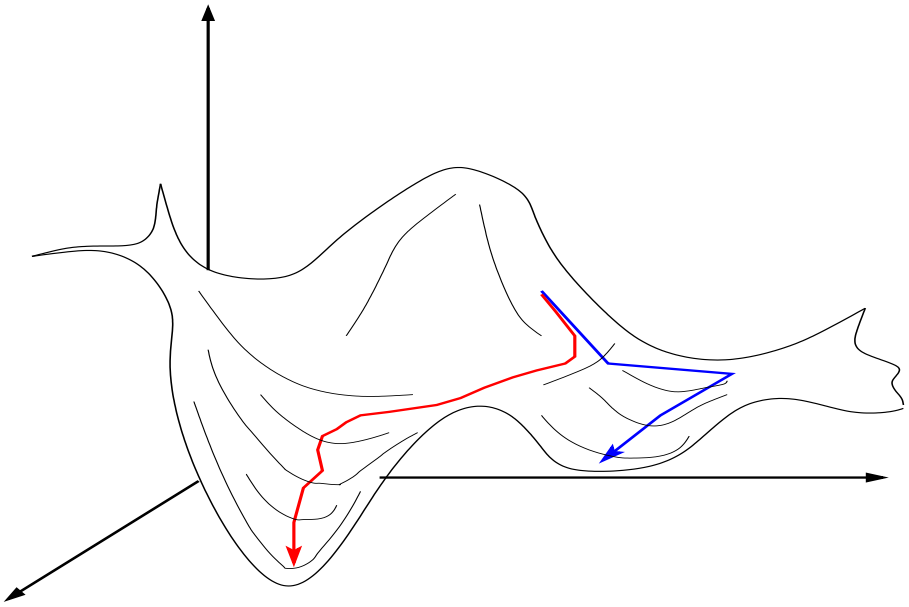


FIG. 3.1 – *Illustration du comportement de l'algorithme de minimisation en fonction de la longueur du pas fait dans la direction du gradient. En bleu, un grand pas, en rouge un pas beaucoup plus petit : alors que le point de départ est le même, les points d'arrivée sont très différents.*

b) Les difficultés liées à la méthode du gradient

Importance des grandeurs liées au gradient : pas, conditions initiales - Outre le choix de la fonction à minimiser, une deuxième difficulté vient de la procédure de minimisation elle-même. L'algorithme que nous avons utilisé est une variante de la méthode du gradient, où le minimum d'une fonction est déterminé en suivant la direction du gradient de la fonction. Deux inconvénients inhérents à l'utilisation d'une telle méthode sautent aux yeux, et sont illustrés sur les figures (3.1) et (3.2) pour des fonctions de deux variables. La figure (3.1) illustre le comportement de l'algorithme de minimisation en fonction du pas effectué dans la direction du gradient. Si le pas est trop grand (en bleu), l'algorithme saute dans une vallée secondaire qui le conduit à un minimum local peu intéressant. Par ailleurs, si le pas est trop petit, le risque existe que l'algorithme, piégé dans un minimum secondaire, ne puisse en sortir (Figure (3.2)). De plus, selon le point de départ choisi, la convergence peut mener vers des minima secondaires même si le pas est « convenable ». Cette imprécision dans la détermination du minimum de notre fonction est d'autant plus grande que la dite fonction comprend un nombre élevé de variables.

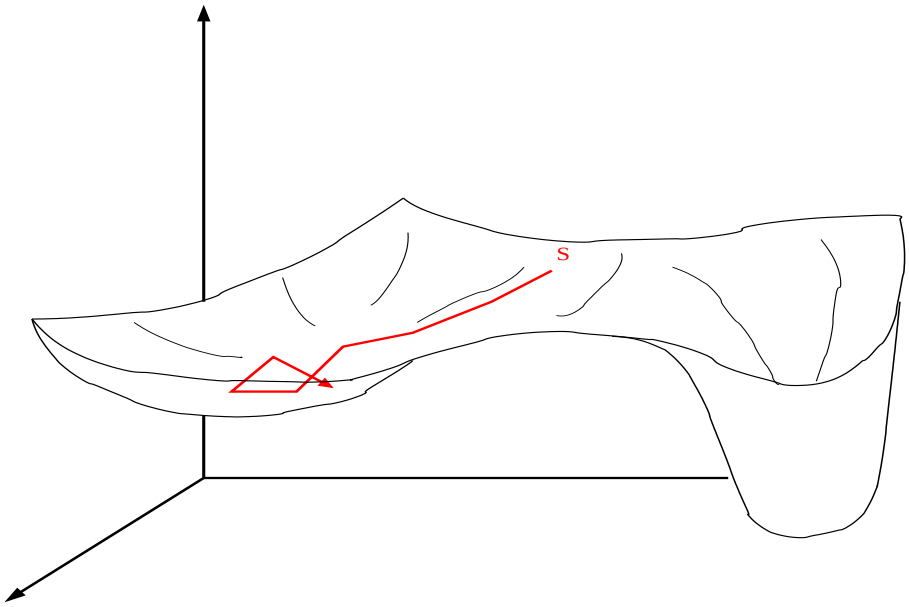


FIG. 3.2 – *Illustration de l'importance des conditions initiales. A partir du point de départ S, l'algorithme converge vers un minimum secondaire qui n'est pas le « vrai » minimum.*

Résultats de la minimisation et paramètres physiques - Mais le point le plus important est sans doute le suivant : rien ne prouve de façon indubitable que le minimum déterminé par l'algorithme, c'est-à-dire la solution *mathématique* d'un banal problème de minimisation d'une fonction de 6 variables soit également la solution *physique*, i.e. fournisse LE jeu de paramètres de notre hamiltonien de champ moyen. Par exemple, supposons que pour un noyau donné, la profondeur du potentiel central soit estimée à -60 MeV, mais que pour un autre noyau, la minimisation donne -80 MeV. Un tel écart peut être justifié analytiquement, mais pas physiquement : nous cherchons un potentiel moyen, et le moins que l'on soit en droit d'attendre est que les paramètres des potentiels ne dépendent « pas trop » de l'isospin et de la masse du noyau. Un argument supplémentaire en faveur de cette dichotomie entre la solution numérique et la solution physique du problème posé est que le modèle qui sous-tend notre travail ne peut prétendre à fournir une description *parfaite* de la structure nucléonique d'un noyau atomique. En d'autres termes, comme tous les modèles (notamment ceux utilisés en physique nucléaire), il suppose vraies un certain nombre d'hypothèses qui ne le sont pas toujours, et il faut prendre garde à ne pas essayer de l'appliquer à des cas qui ne sont pas de son ressort. Cela signifie qu'il *n'existe probablement pas de paramètres capables de décrire parfaitement les niveaux individuels*, ce qui implique que nous disposons d'une certaine latitude pour choisir les paramètres « optimums ».

La conséquence de ces remarques est la suivante : d'une part, il paraît illusoire de rechercher le minimum absolu de notre fonction χ^2, parce qu'il est tout à fait possible que ce minimum absolu ne corresponde pas au meilleur hamiltonien possible (la qualité étant envisagée dans la perspective d'un champ *moyen*). D'autre part, nous pouvons utiliser cette petite liberté de choix pour, par exemple, choisir des paramètres qui ne diffèrent pas trop d'un noyau à l'autre, ce qui permettrait de prétendre à une telle description en terme de champ moyen.

Plage de variation des paramètres - Concrètement, nous avons donc procédé comme suit : nous avons effectué la recherche des paramètres pour chacun des noyaux suivants : ^{40}Ca, ^{48}Ca, ^{56}Ni, ^{90}Zr, ^{100}Sn, ^{132}Sn, ^{146}Gd et ^{208}Pb. Pour les protons et pour les neutrons, nous avons construit une fonction selon la méthode expliquée plus haut, et avons appliqué l'algorithme de minimisation. Pour les raisons qui ont été vues plus haut (un minimum n'est pas forcément physiquement pertinent, la minimisation est sensible aux conditions initiales), nous avons considéré pour chaque noyau un ensemble de 250 points de départ (un point de départ = un ensemble de paramètres de l'hamiltonien) choisis aléatoirement dans un certain intervalle, i.e. la minimisation a été répétée pour chaque noyau 250 fois. La plage de variation pour chacun des paramètres était la suivante :

$$60 \text{ MeV} \leq \quad V_0^+ \quad \leq 90 \text{ MeV} \tag{3.8}$$
$$10 \leq \quad \lambda^- \quad \leq 30 \tag{3.9}$$

pour les profondeurs de potentiel. Pour le potentiel $\hat{V} - \hat{S}$, la profondeur était exprimée sous la forme $\lambda^- V_0^-$ où $V_0^- = 50$ MeV. Pour les rayons :

$$0.9 \text{ Fm} \leq \quad r_0^+ \quad \leq 1.4 \text{ Fm} \tag{3.10}$$
$$0.5 \text{ Fm} \leq \quad r_0^- \quad \leq 1.4 \text{ Fm} \tag{3.11}$$

Et pour les diffusivités :

$$0.8 \text{ Fm} \leq \quad a_+ \quad \leq 1.4 \text{ Fm} \tag{3.12}$$
$$0.2 \text{ Fm} \leq \quad a_- \quad \leq 1.4 \text{ Fm} \tag{3.13}$$

Influence des facteurs de poids - Pour les noyaux où la convergence ne donnait pas de résultats très convaincants, de nouvelles minimisations étaient effectuées en variant l'importance de certains des termes dans (3.5). Il s'est notamment avéré que la valeur du rayon carré moyen était un paramètre critique dans la recherche d'une situation physiquement acceptable. Il est par exemple arrivé que l'on obtienne un accord presque parfait entre les positions des niveaux théoriques et les positions des niveaux expérimentaux, mais avec une valeur pour le rayon carré moyen 15 ou 20% différente de la valeur expérimentale.

3.2 RÉSULTATS POUR LES NOYAUX SPHÉRIQUES DOUBLEMENT MAGIQUES

Nous avons présenté dans cette première partie les principales caractéristiques de notre approche, les approximations sur lesquelles il repose, ainsi que les paramètres des potentiels figurant dans l'équation de Dirac. Par ailleurs, nous avons montré comment ces paramètres ont été déterminés, *via* une méthode semi-automatique de minimisation multidimensionnelle. Dans la section suivante, nous allons maintenant présenter les résultats principaux auxquels nous sommes parvenus. Ceux-ci sont essentiellement centrés sur les propriétés individuelles des nucléons : nous nous focaliserons donc sur les niveaux d'énergie à une particule, à la fois autour du niveau de Fermi, mais nous étudierons également les états profonds de type $1s_{1/2}$ ou $1p_{1/2}$ par exemple. Une autre des observables accessibles

par l'expérience et que nous avons utilisée est le rayon carré moyen (r. m. s.). Dans tous les cas, des comparaisons seront faites tant avec les diverses paramétrisations de la théorie RMF qu'avec des modèles non-relativistes (phénoménologiques de type Woods-Saxon et Hartee-Fock auto-cohérents).

3.2.1 Niveaux d'énergie à une particule

Niveaux d'énergie individuels - Nous présentons dans cette partie les spectres de niveaux individuels obtenus avec l'hamiltonien (2.30), où les paramètres des potentiels ont été déterminés selon la méthode exposée à la section précédente.

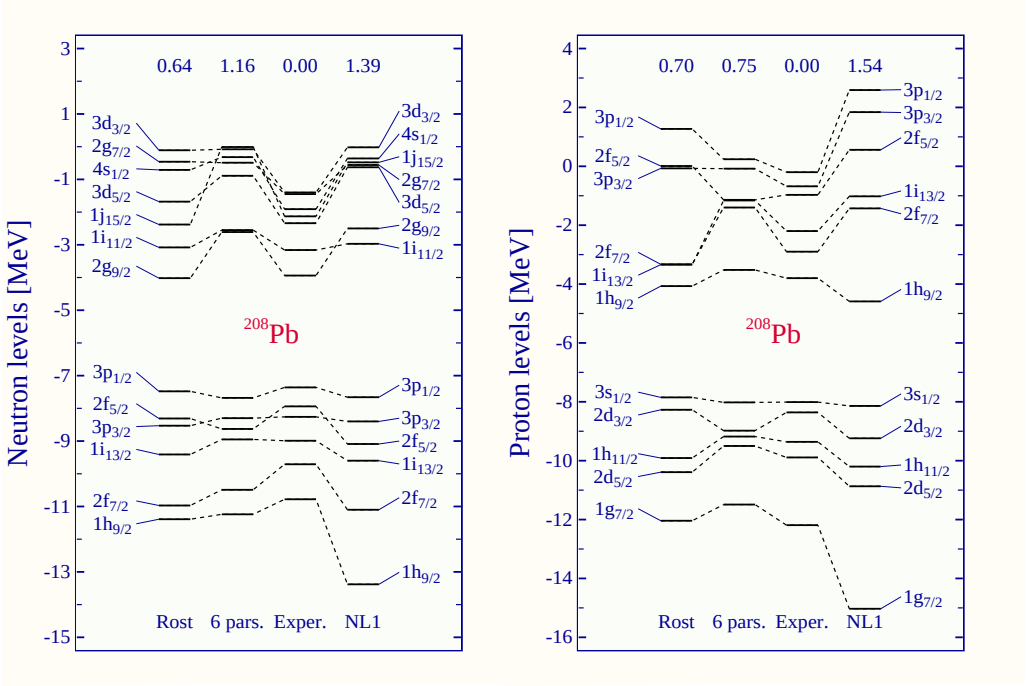


FIG. 3.3 – *Schéma de niveaux individuels pour les neutrons et les protons dans* ^{208}Pb. *La colonne marquée Exper. donne les positions des niveaux expérimentaux. La colonne marquée Rost correspond à un calcul de type Woods-Saxon non-relativiste [Ros68]. La colonne d'extrême droite représente un calcul de type* RMF *avec la paramétrisation* NL1 *de [Rei86], qui est considérée comme la meilleure pour le calcul des niveaux à une particule. Enfin, la colonne marquée 6pars. correspond à notre calcul de minimisation à 6 paramètres. Le nombre figurant en haut de la figure est l'écart type moyen entre théorie et expérience.*

La figure 3.3 présente une comparaison des niveaux à une particule obtenus selon différentes méthodes pour le plomb 208. Comme nous travaillons dans le cadre de la théorie RMF, il semble naturel de comparer l'efficience de notre paramétrisation avec celle de calculs auto-cohérents. La paramétrisation NL1 de [Rei86] étant considérée comme la meilleure, c'est avec celle-ci que nous effectuons la comparaison. De plus, comme nous avons choisi une approche semi-empirique fondée sur une paramétrisation des potentiels, il est également logique de comparer les résultats avec d'autres approches de ce type, mais non-relativistes celles-là. C'est pourquoi nous avons choisi de comparer avec une ancienne (mais efficace)

paramétrisation des potentiels de Woods-Saxon (non-relativiste) issue de [Ros68].

L'exemple du plomb permet de mettre en évidence plusieurs points importants :

- notons que si l'allure général du spectre individuel est correctement reproduite par les calculs RMF, ceux-ci conduisent manifestement à une densité de niveaux beaucoup trop faible autour du niveau de Fermi, autre façon de dire que la *précision* sur la position des niveaux individuels n'est pas très satisfaisante. Nous reviendrons sur cette remarque dans la partie traitant des bandes rotationnelles (chapitre 4).
- par ailleurs, il faut également mentionner que notre approche conduit à des résultats bien meilleurs que dans la théorie RMF. Or il a souvent été argué (par exemple dans [Rin90]) que les différences théorie/expérience sur les niveaux individuels devaient être attribués à la présence de la masse effective, qui entrainerait automatiquement une mauvaise densité de niveaux. Cet argument est manifestement faux, puisque notre approche contient la masse effective, et fournit cependant des résultats bien meilleurs que ceux de la RMF. De plus, certaines paramétrisations dans les théories Hartree-Fock contiennent également un mécanisme de masse effective, et n'ont pas non plus ce problème de densité. Cela est illustré sur la figure 3.4, où nous comparons nos résultats avec ceux de la paramétrisation SLy4 de l'interaction de Skyrme [Cha95].

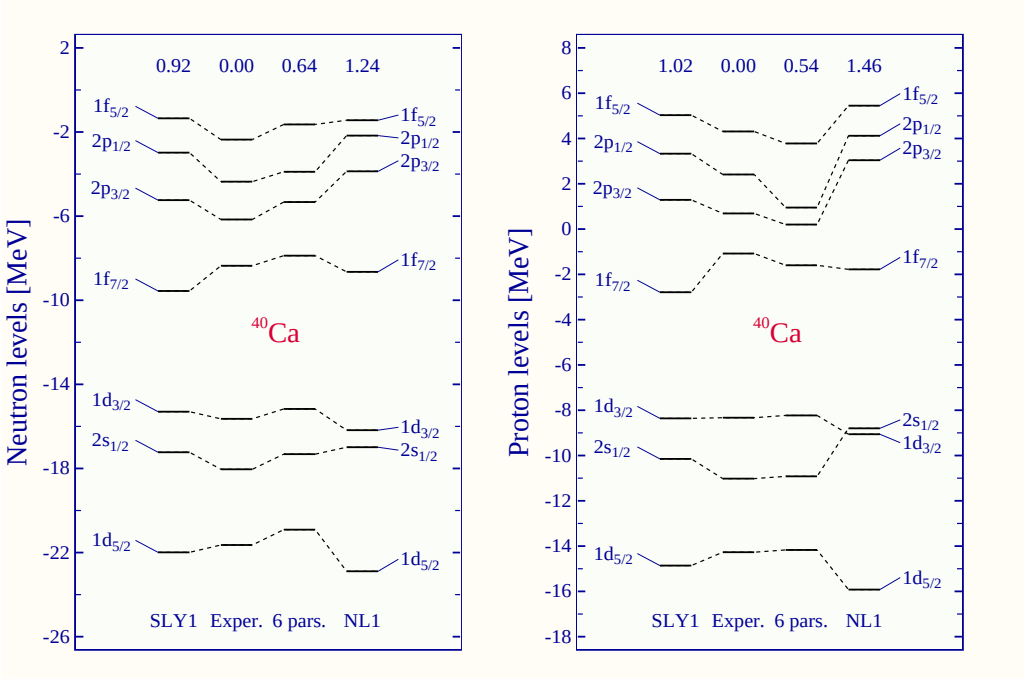


FIG. 3.4 – *Schéma de niveaux individuels pour les neutrons et les protons dans* ^{40}Ca. *Cette figure est un peu différente que la figure 3.3, puisque la première colonne présente les résultats d'un calcul Hartree-Fock avec une force de type Skyrme et la paramétrisation* SLy4 *de [Cha95]. Dans la deuxième colonne sont marqués les résultats expérimentaux, et la troisième colonne donne les résultats de notre calcul. Dans la quatrième colonne figurent les résultats* RMF *avec la paramétrisation* NL1 *de [Rei86].*

Contrairement aux arguments avancés par le groupe de Münich, il semble donc tout à fait possible de reproduire avec une grande qualité les niveaux individuels dans le cadre

d'une théorie relativiste contenant une masse effective « réaliste » (c'est-à-dire de l'ordre de 60-70% de la masse au repos des nucléons) . La méthode employée, fondée sur une recherche semi-automatique et une grille de points aléatoires, rend assez improbable l'hypothèse que de meilleurs paramètres existent, avec l'hamiltonien dans sa forme actuelle. Cependant, avant précisément de discuter plus avant la structure de l'hamiltonien, nous devons revenir sur certaines observables qui renforcent encore la fiabilité de notre approche. Nous donnons dans les pages suivantes les niveaux individuels obtenus dans chacun des noyaux doublement magiques étudiés. On peut voir que dans certains cas, l'accord avec l'expérience est excellent, et bien meilleur que celui de toutes les théories concurrentes. Par ailleurs, l'ordre des niveaux individuels n'était pas le seul critère à rentrer en ligne de compte.

a) Rayons carrés moyens

Une autre des contraintes importantes, pour ne pas dire déterminantes, de la qualité de nos résultats était les rayons carrés moyens. Le tableau 3.1 présente un résumé des valeurs calculées théoriquement comparées avec les valeurs déduites de l'expérience. Hormis ^{90}Zr et ^{100}Sn pour les protons, et ^{208}Pb pour les neutrons, l'accord n'excède pas 2%, ce qui est très raisonnable. Ces résultats sont à comparer avec ceux de la RMF qui sont de qualité un peu moins bonne, particulièrement dans les noyaux légers.

Noyau	$\langle r^2_{calc}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{ch}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{RMF}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{calc}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{n}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{RMF}\rangle^{1/2}$
^{40}Ca	3.43	3.39	3.47	3.47	3.49	3.33
^{48}Ca	3.43	3.40	3.47	3.64	3.63	3.60
^{56}Ni	3.70	3.70	3.71	3.72	3.69	3.57
^{90}Zr	4.33	4.20	4.27	4.32	4.29	4.30
^{100}Sn	4.49	4.46	4.46	4.40	4.37	4.31
^{132}Sn	4.71	4.67	4.71	4.97	4.94	4.99
^{146}Gd	5.02	4.93	4.99	5.03	5.00	5.04
^{208}Pb	5.47	5.45	5.51	5.74	5.59	5.73

TAB. 3.1 – *Rayons carrés moyens obtenus pour chacun des noyaux sphériques doublement magiques utilisés dans notre fit. Dans chaque partie du tableau, la colonne du milieu donne les rayons expérimentaux (rayon de charge pour les protons), la colonne de gauche les rayons calculés dans notre modèle, et la colonne de droite les rayons calculés dans l'approche* RMF *tels que donnés dans [Lal99]. Les valeurs expérimentales sont issues de [DeV87].*

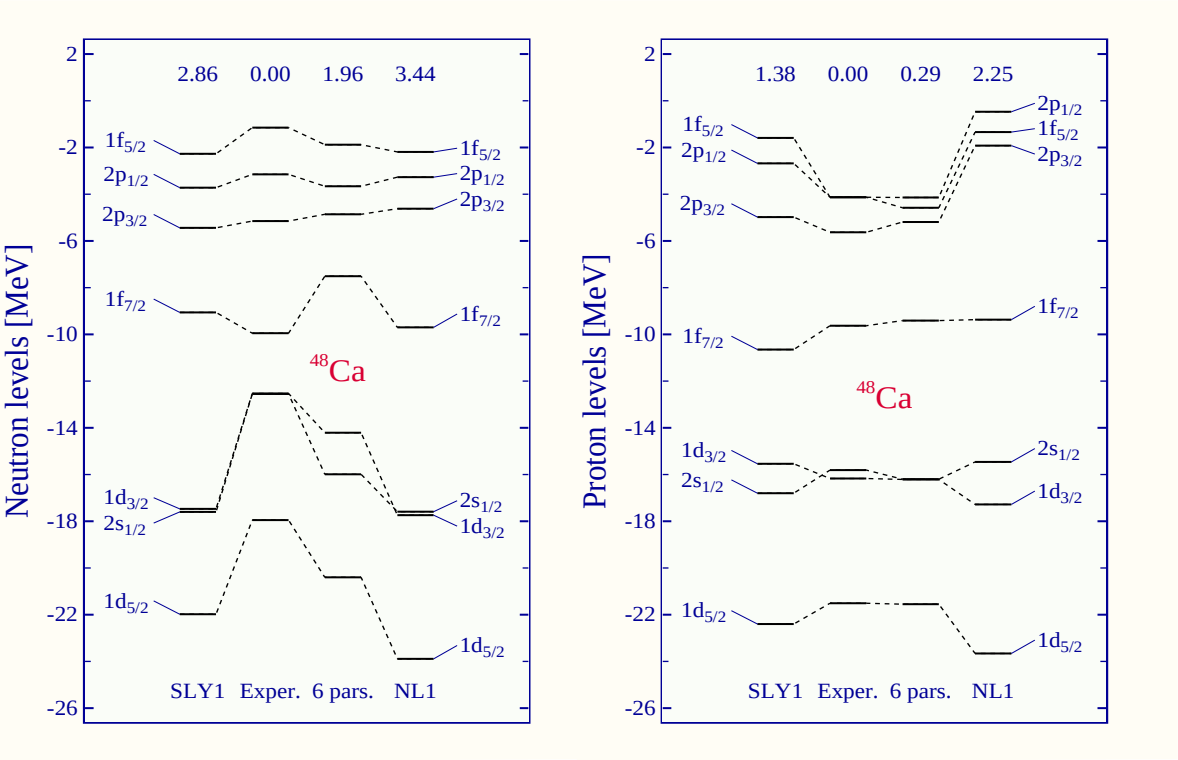


FIG. 3.5 – *Niveaux individuels dans* ^{48}Ca.

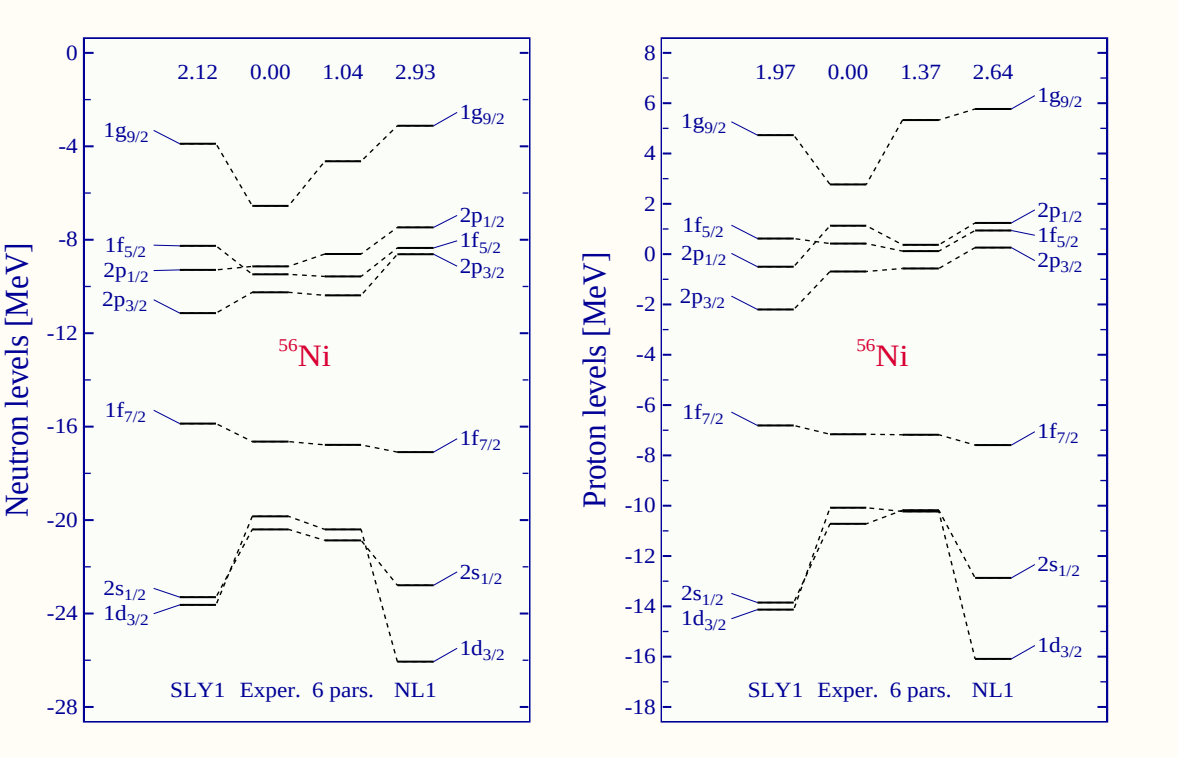


FIG. 3.6 – *Niveaux individuels dans* ^{56}Ni.

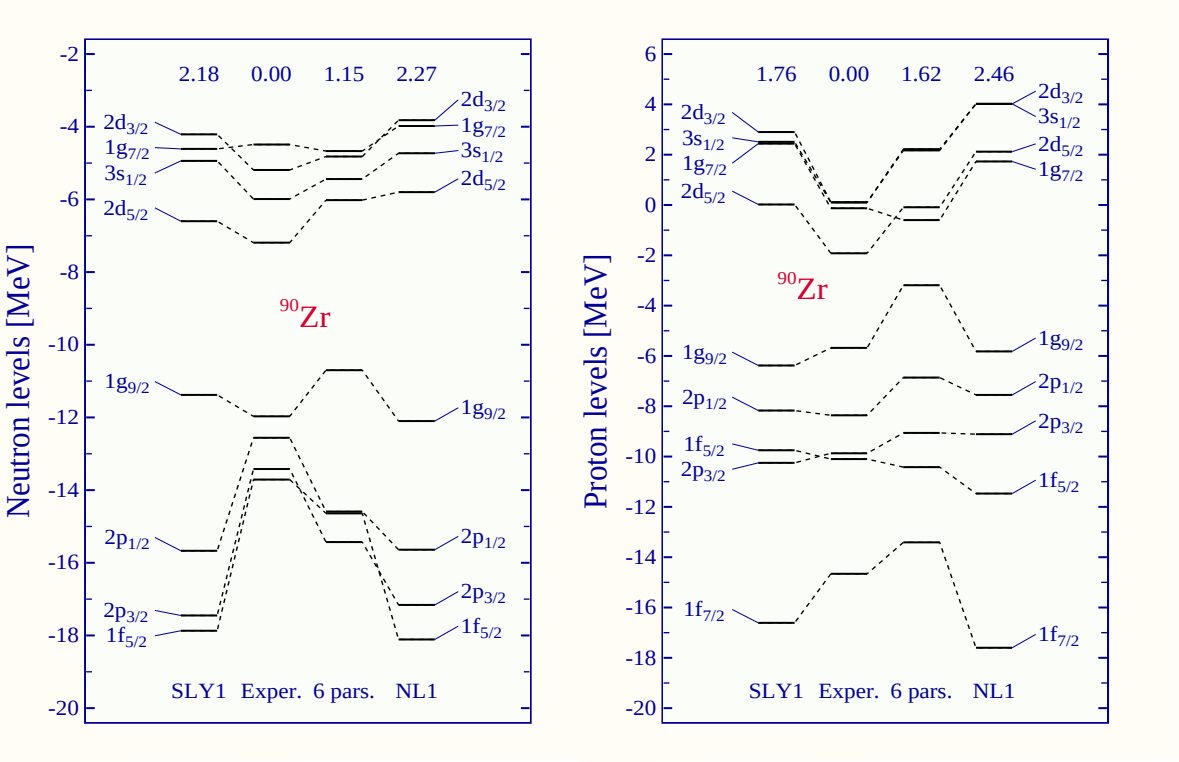


FIG. 3.7 – *Niveaux individuels dans* ^{90}Zr.

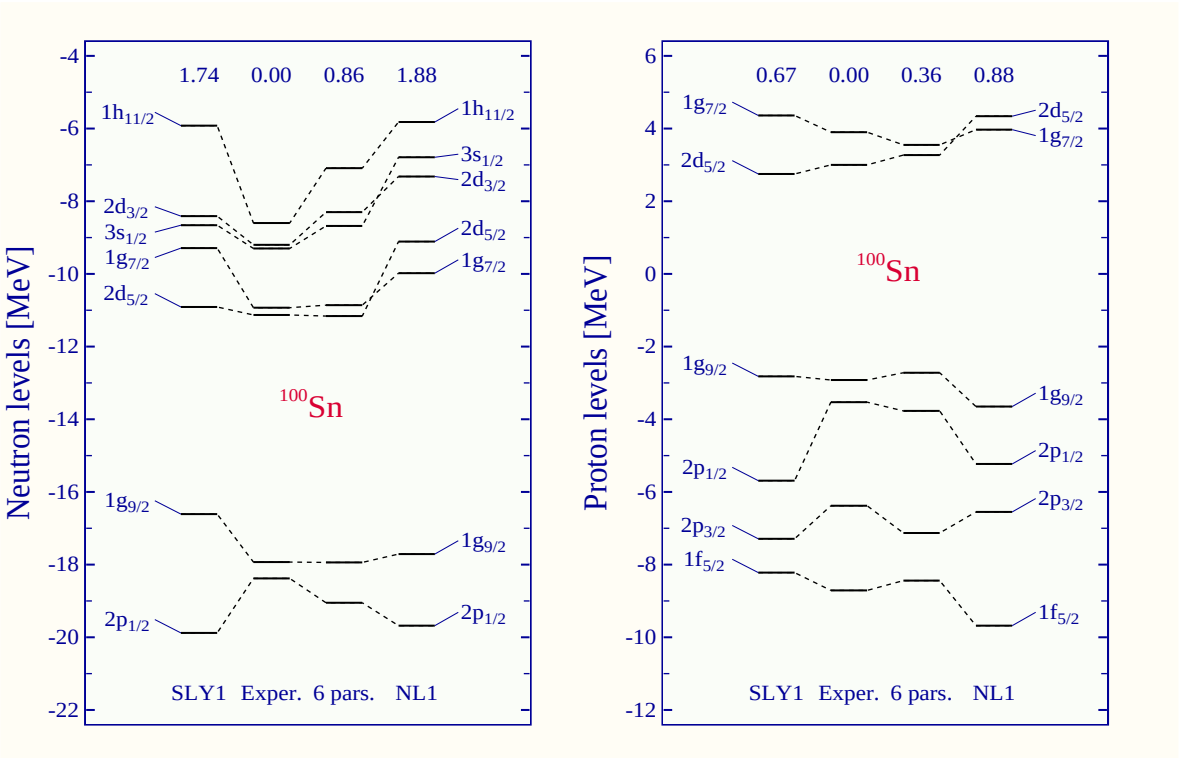


FIG. 3.8 – *Niveaux individuels dans* ^{100}Sn.

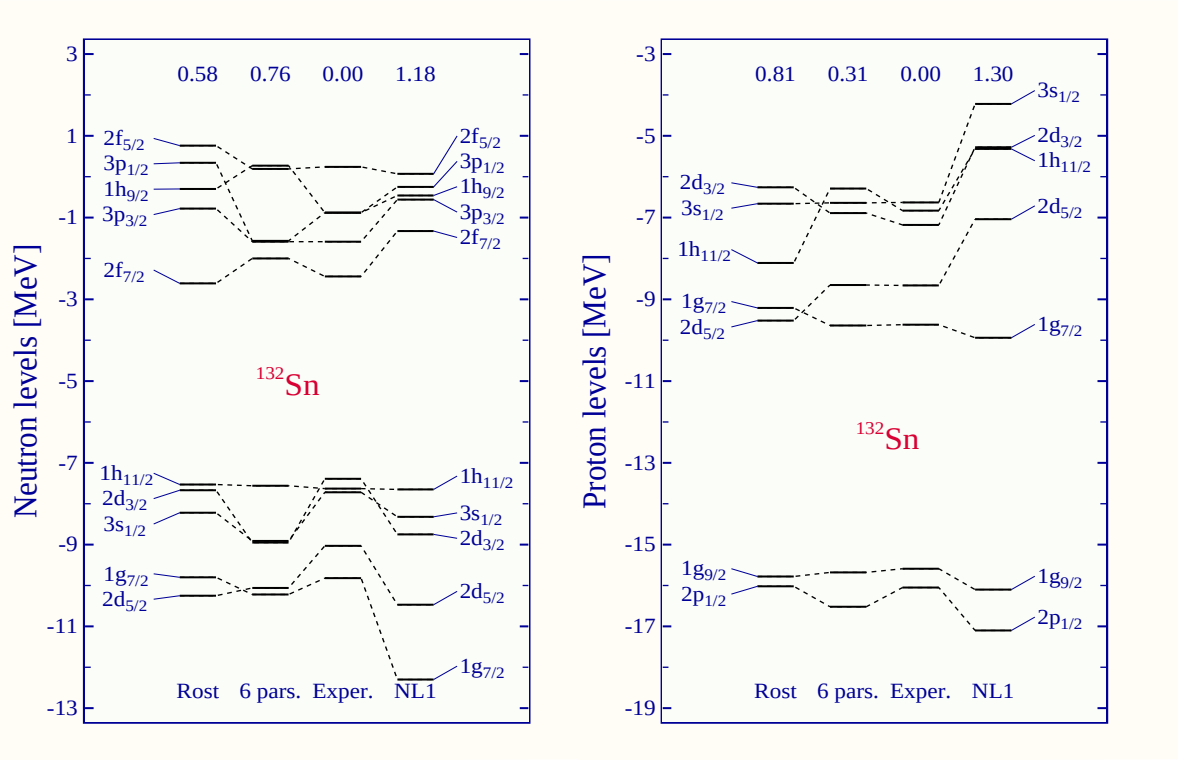


FIG. 3.9 – *Niveaux individuels dans* ^{132}Sn.

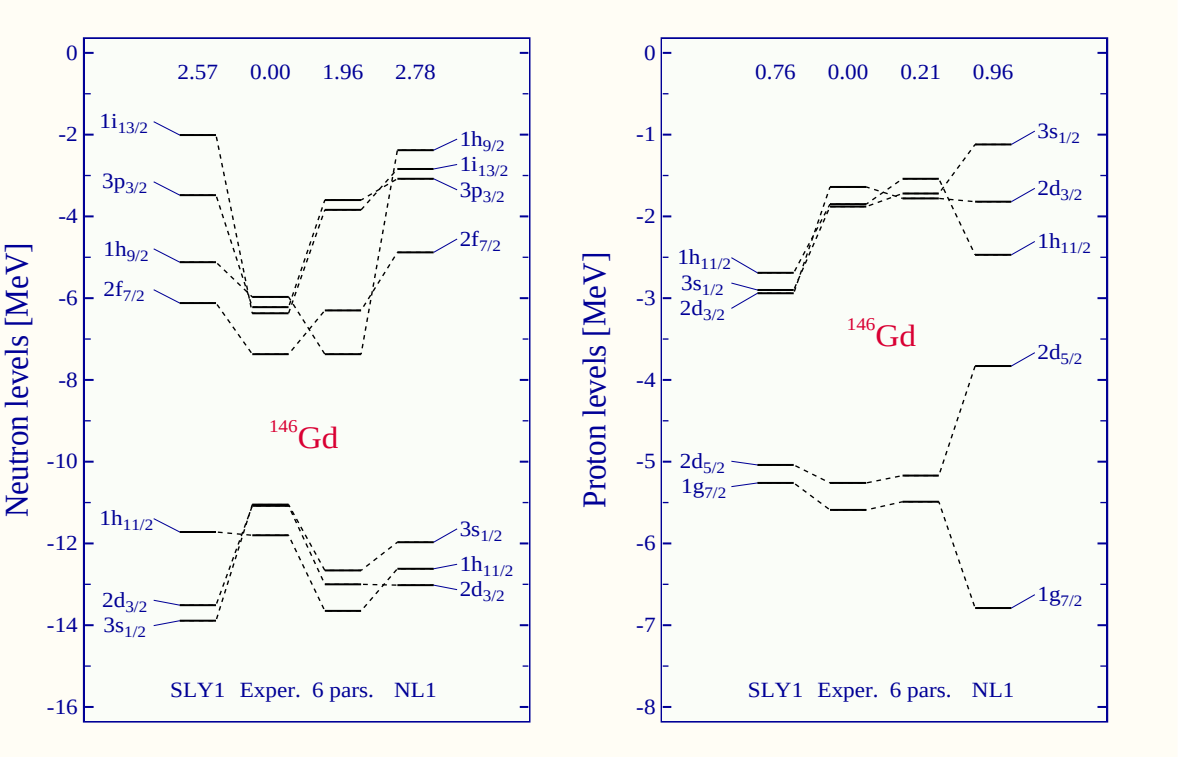


FIG. 3.10 – *Niveaux individuels dans* ^{146}Gd.

b) Rôle des états profondément liés

Par ailleurs, l'examen approfondi de l'ensemble des spectres à une particule révèle que, contrairement aux approches semi-empiriques traditionnelles, la répartition des niveaux individuels dans le puits de potentiel est relativement proche de ce qu'elle est dans l'expérience, voir les Tables 3.2 et 3.3. En cela d'ailleurs, ce modèle se rapproche plus des modèles auto-cohérents (relativistes ou non) pour lesquels la distribution des niveaux dans le puits de potentiel est assez bonne. Les barres d'erreur expérimentales sont cependant assez conséquentes. Néanmoins, il semble bien assuré que les modèles qui sous-évaluent de façon extrèmement importante la profondeur du puits central *ne peuvent pas* donner une distribution des états à une particule correcte.

Etat	Exp	Dirac	SLy4	SkM*	Rei86	Univ.
$1s_{1/2}$	**-58.7±1.2**	**-41.07**	-40.28	-44.73	-46.90	**-29.00**
$1p_{3/2}$	**-35.3±0.5**	**-26.83**	-27.47	-28.50	-30.15	**-20.35**
$1p_{1/2}$		-22.17	-23.66	-24.80	-25.05	-17.75
$1d_{5/2}$	-14.27	-14.14	-14.86	-14.17	-15.22	-11.17
$1d_{3/2}$	-11.02	-9.63	-10.15	-10.92	-10.98	-7.44
$2s_{1/2}$	-8.33	-8.39	-8.36	-8.23	-8.49	-5.87
$1f_{7/2}$	-1.71	-2.39	-2.79	-1.60	-1.71	-1.79

TAB. 3.2 – *Etats individuels proton dans ^{40}Ca. Le tableau inclut les états profondément liés. Les positions expérimentales de ces états liés sont issues de [Nak76].*

Etat	Exp	Dirac	SLy4	SkM*	Rei86	Univ.
$1s_{1/2}$	**-54±8**	**-47.04**	-44.97	-40.78	-52.14	**-33.39**
$1p_{3/2}$	**-43±8**	**-35.98**	-36.32	-33.29	-41.50	**-27.47**
$1p_{1/2}$		-33.17	-34.17	-31.28	-39.18	-26.30
$1d_{5/2}$	**-27±8**	**-25.34**	-26.70	-24.72	-29.89	**-20.67**
$1d_{3/2}$		-20.86	-22.28	-20.60	-25.40	-18.00
$2s_{1/2}$		-19.52	-21.20	-19.55	-23.17	-17.10
$1f_{7/2}$		-15.27	-16.61	-15.49	-18.00	-13.24
$2p_{3/2}$	-10.10	-9.85	-9.75	-9.03	-11.56	-8.69
$1f_{5/2}$	-9.86	-9.70	-10.25	-9.33	-10.41	-8.54
$2p_{1/2}$	-8.35	-8.07	-8.16	-7.32	-8.72	-6.84

TAB. 3.3 – *Même tableau que le tableau 3.2, mais dans ^{90}Zr. La position expérimentale des états liés est donnée dans [Jam69].*

3.2.2 Rayons carrés moyens et petite composante

Les résultats obtenus avec notre paramétrisation de l'hamiltonien de Dirac qui ont été présentés à la section précédente sont fortement encourageants. Néanmoins, le fait de négliger la petite composante η du bi-spineur de Dirac pourrait avoir des conséquences importantes, et il est donc nécessaire de s'assurer que tel n'est pas le cas. Naturellement, on voit immédiatement sur l'équation (2.4) ou sur les équations (2.9) et (2.10) que les énergies propres sont exactement les mêmes pour la grande et pour la petite composante. Mais l'influence de la petite composante sur les résultats se fait de façon plus insidieuse : l'un des critères les plus importants pour accepter un ensemble de paramètres est que le rayon carré moyen du noyau étudié soit reproduit correctement. Or ce rayon carré moyen dépend clairement de la petite composante, puisqu'il dépend directement de la fonction d'onde. Négliger cette dernière, c'est donc faire une erreur systématique sur $\langle r^2_{rms} \rangle$, et de ce fait, biaiser la recherche du minimum de la fonction. Il était donc important de vérifier l'influence de la petite composante sur nos rayons carrés. Pour cela, nous avons utilisé les résultats du groupe de théoriciens avec qui nous sommes en collaboration. Ce groupe, a adopté une démarche analogue à la notre (paramétrisation des potentiels nucléaires plutôt que résolution auto-cohérente des équations RMF), mais au lieu de ne résoudre « que » la partie correspondant à la grande composante, ils ont conservé dans les calculs la totalité du bi-spineur ψ [2]. Par conséquent, si nous utilisons leur paramétrisation des potentiels dans nos calculs, les résultats que nous obtiendrons seront directement comparables aux leurs. Et comme la seule différence entre les deux méthodes réside dans l'omission ou pas de la petite composante, cela permettra précisément de voir l'influence de ce terme, notamment sur les rayons carrés moyens. Les résultats figurent dans le tableau 3.4.

Noyau	^{40}Ca	^{48}Ca	^{56}Ni	^{90}Zr	^{100}Sn	^{132}Sn	^{146}Gd	^{208}Pb
$R^{\xi,\eta}_{r.m.s.}$	3.49	3.75	3.67	4.33	4.38	4.99	5.04	5.63
$R^{\xi}_{r.m.s.}$	3.46	3.68	3.65	4.32	4.36	4.96	5.02	5.61
$R^{exp}_{r.m.s.}$	3.49	3.63	3.69	4.29	4.37	4.94	5.00	5.59

TAB. 3.4 – *Comparaison des rayons carrés moyens pour les neutrons dans différents noyaux selon que l'on travaille avec le bi-spineur ψ (première ligne) ou avec le spineur ξ (deuxième ligne).*

Constatons qu'à part pour ^{40}Ca, l'erreur faite sur le rayon carré moyen reste inférieure à 1 %, ce qui est tout à fait acceptable. Par conséquent, on peut supposer que, le rayon moyen étant correctement calculé, les paramètres de l'hamiltonien sont proches des meilleurs que l'on pourrait obtenir *dans le cadre de ce modèle.*

3.2.3 Paramètres des potentiels

Les paramètres des potentiels déterminés à l'aide de la méthode présentée à la section 3.1.2 figurent dans les tableaux 3.5 et 3.6. Les résultats des sections 3.2.1 et 3.2.2 ont été

[2] **Lojewski, Schunck, Dudek, à paraître.**

obtenus à chaque fois pour ces ensembles de paramètres.

Noyau	V_{cen}	V_{nuc}	r_0^+	a_0^+	λ^-	r_0^-	a_0^-
^{40}Ca	-75.8	-65.0	1.11	0.94	19.9	0.70	0.90
^{48}Ca	-75.8	-66.0	1.16	0.93	17.3	0.71	0.65
^{56}Ni	-78.0	-64.1	1.10	0.86	19.7	0.76	0.35
^{90}Zr	-78.1	-61.5	1.13	1.27	19.8	0.62	0.58
^{100}Sn	-82.5	-61.6	1.09	1.06	15.9	0.92	0.56
^{132}Sn	-79.8	-62.2	1.19	1.13	15.3	0.83	0.39
^{146}Gd	-84.0	-60.7	1.11	1.29	18.8	0.74	0.44
^{208}Pb	-84.1	-58.3	1.14	1.28	16.5	0.82	0.45

TAB. 3.5 – *Tableau des paramètres de l'hamiltonien de Dirac-Woods-Saxon pour les protons pour chacun des noyaux doublement magiques étudiés.*

Dans le tableau 3.5, le potentiel V_{nuc} correspond à :

$$V_{cen} = V_{nuc} + V_{cou}(r = 0) \tag{3.14}$$

où V_{cou} est le potentiel coulombien. Autrement dit, V_{nuc} représente la contribution purement nucléaire du potentiel central pour les protons. Comme les noyaux considérés ici sont des noyaux sphériques, le potentiel Coulombien est pris égal à celui créé par une sphère uniformément chargée de rayon égale au rayon du noyau (voir relation (2.36). Donc :

$$V_{cou}(\vec{r}) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}(Z-1)e^2\left[3 - \left(\dfrac{r}{R_0}\right)^2\right] & \text{pour } r \leq R_0 \\ \dfrac{(Z-1)e^2}{r/R_0} & \text{pour } r \geq R_0 \end{cases} \tag{3.15}$$

C'est cette contribution Coulombienne prise en $r = 0$ que l'on ajoute pour passer de V_{nuc} à V_{cen}. Pour les noyaux déformés, le potentiel Coulombien est calculé selon la formule générale (2.35).

Le tableau 3.6 de la page 83 présente les paramètres des potentiels pour les neutrons.

3.3 PASSAGE VERS LA DEFORMATION

Jusqu'à maintenant, nous nous sommes focalisés sur les noyaux sphériques doublement magiques, qui nous ont servi à extraire une paramétrisation du champ moyen nucléaire à même de reproduire avec une bonne précision les niveaux d'énergie à une particule. Cependant, cela n'aurait guère de sens de s'arrêter à l'étude de ces noyaux particuliers. Il est donc nécessaire d'étendre le modèle aux noyaux déformés. Cette extension soulève deux difficultés : d'abord, comment la faire ? Nous avons étudié huit noyaux magiques, et obtenu pour chacun un jeu de 6×2 paramètres. Comment faire pour trouver, pour un noyau donné

Noyau	V_{cen}	r_0^+	a_0^+	λ^-	r_0^-	a_0^-
^{40}Ca	-80.2	1.11	1.03	15.2	1.14	0.60
^{48}Ca	-77.0	1.03	1.00	14.5	0.92	0.49
^{56}Ni	-75.6	1.13	0.99	17.5	0.81	0.33
^{90}Zr	-73.8	1.09	1.06	14.0	0.88	0.34
^{100}Sn	-77.7	1.13	1.06	17.5	0.83	0.45
^{132}Sn	-69.9	1.10	0.99	15.2	0.87	0.34
^{146}Gd	-71.9	1.13	0.98	16.4	0.84	0.35
^{208}Pb	-70.4	1.10	1.23	14.0	0.87	0.43

TAB. 3.6 – *Tableau des paramètres de l'hamiltonien de Dirac-Woods-Saxon pour les neutrons pour chacun des noyaux doublement magiques étudiés.*

quelconque, les meilleurs paramètres possibles ? D'autre part, une fois ce petit problème résolu, il restera à vérifier la stabilité du modèle. Autrement dit, peut-on garantir que le modèle est capable de décrire fidèlement la structure des noyaux déformés, alors même qu'il a été construit à partir des noyaux sphériques ?

Nous présentons donc dans cette section, d'une part la façon dont nous avons étendu notre paramétrisation à tout le tableau périodique, d'autre part l'un des tests qui assure la stabilité par passage à la déformation du modèle, à savoir la prédiction des spin-parité des têtes de bande rotationnelle.

3.3.1 Dépendance en isospin des paramètres

L'un des buts de ce travail est de proposer une paramétrisation du champ moyen nucléaire qui soit valide pour n'importe quel noyau atomique du tableau périodique. Or jusqu'ici, nous n'avons évoqué que quelques noyaux particuliers, les noyaux sphériques doublement magiques, à partir desquels nous avons construit notre procédure de détermination des paramètres. Ces derniers, tels qu'ils figurent sur les tableaux 3.5 et 3.6, sont assez différents les uns des autres. Cependant, il a déjà été mentionné à la section 3.1.2 que pour un noyau donné, il existe plusieurs candidats potentiels, plusieurs jeux de paramètres qui donneront des résultats sensiblement équivalents. En ce sens, les tableaux 3.5 et 3.6 ne donnent que les paramètres que nous avons estimés être les meilleurs eu égard aux contraintes que nous avions choisies. Mais une variation relativement faible d'un des paramètres ne va pas radicalement bouleverser la qualité des résultats.

Compte tenu, d'une part des différences entre les paramètres de chacun des noyaux magiques, d'autre part de l'idée directrice qui est « une paramétrisation "unifiée" pour tous les noyaux », il semble naturel d'essayer d'extraire des tableaux 3.5 et 3.6 une dépendance en fonction de l'isospin et/ou du nombre de masse A. Nous avons donc essayé la forme

suivante :

$$X = X_0 + X_1 \frac{N-Z}{N+Z} + \frac{X_2}{A} \tag{3.16}$$

où X représente n'importe lequel des paramètres des tableaux 3.5 et 3.6. Cette forme de fonction en isospin et en nombre de masse n'a pas été choisie au hasard : il se trouve qu'une telle expression s'est avérée très performante pour reproduire les rayons carrés moyens dans les théories microscopiques de type Hartree-Fock-Bogoliubov [Dob96] ou de type RMF [Ner94]. Un programme de régression standard développé pour l'occasion nous a donné les résultats présentés sur les tables 3.3.1 et 3.3.1

Fit	X_0	X_1	X_2	σ^2
V_{cen}	72.69	-18.00	-292.26	1.551
λ_0^-	18.05	-13.09	-85.16	1.124
r_0^+	1.18	-0.32	-3.76	0.023
r_0^-	0.73	+0.19	11.14	0.091
a_0^+	1.09	+0.01	-4.20	0.091
a_0^-	0.29	+0.06	+9.04	0.088

TAB. 3.7 – *Coefficients de la régression linéaire pour les neutrons.*

Fit	X_0	X_1	X_2	σ^2
V_{cen}	57.55	+4.27	+340.00	1.157
λ_0^-	17.52	-6.80	+85.28	1.748
r_0^+	1.06	+0.37	+1.69	0.012
r_0^-	0.88	-0.27	-7.13	0.096
a_0^+	1.31	+0.19	-18.38	0.111
a_0^-	0.31	+0.02	+17.13	0.155

TAB. 3.8 – *Coefficients de la régression linéaire pour les protons.*

Le terme σ^2 est une mesure de la qualité de la régression linéaire. Il faut reconnaître que ce nombre n'est pas toujours très bon, ce qui traduit les difficultés qui ont été rencontrées lors de la procédure de minimisation. Néanmoins, comme nous le verrons dans la suite de cet exposé, l'extrapolation des paramètres pour les noyaux déformés et superdéformés donne quand même des résultats remarquables. Par ailleurs, nous reviendrons dans le chapitre 4 de cette thèse, consacrée aux noyaux en rotation, sur les paramètres des potentiels, que nous comparerons notamment avec ceux que l'on peut déduire du formalisme RMF.

3.3.2 Densités de charge

Jusqu'ici, nous n'avons présenté que des résultats concernant les grandeurs physiques sur lesquelles reposait la procédure de détermination des paramètres. Par conséquent, il

est relativement peu surprenant que ces résultats soient de bonne qualité. Pour tester la prédictibilité du modèle, il semblait logique d'essayer d'appliquer celui-ci dans des situations pour lesquelles il n'avait pas été optimisé. Les densités de charge des noyaux atomiques sont précisément l'une des observables physiques les plus abondamment utilisées, soit pour tester les modèles théoriques, soit en tant que contraintes pour construire un modèle : c'est ainsi, par exemple, que les techniques auto-cohérentes de type Hartree-Fock avec force effective utilisent les densités de charge pour déterminer les paramètres de la force effective. De même, la plupart des paramétrisations utilisées dans l'approche RMF ont été obtenues à partir des données expérimentales sur les densités de charge.

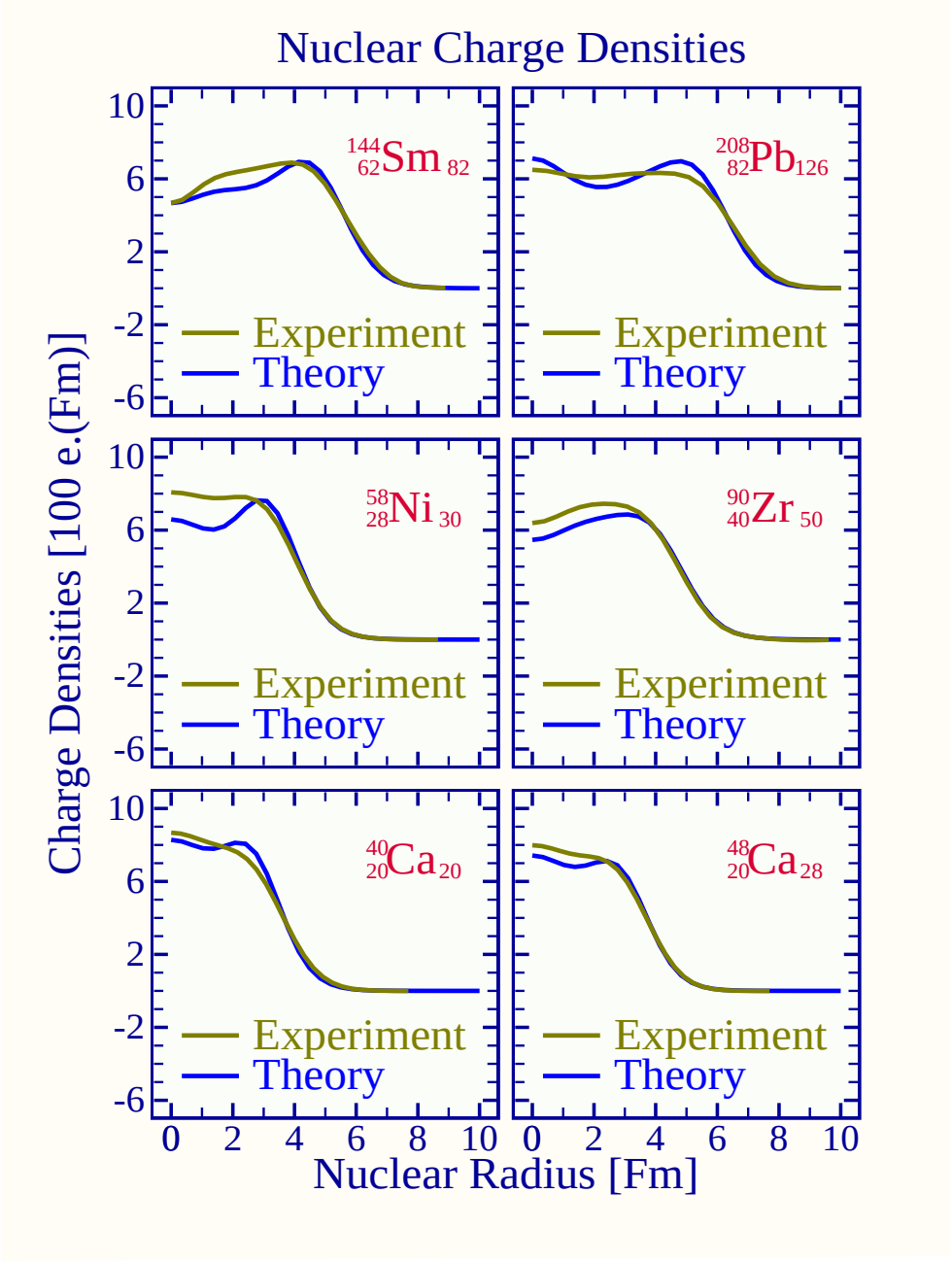


FIG. 3.11 – *Densités de charge pour quelques noyaux sphériques calculées avec les paramètres issus de la régression linéaire du tableau 3.3.1. Les données expérimentales sont issues de [DeV87].*

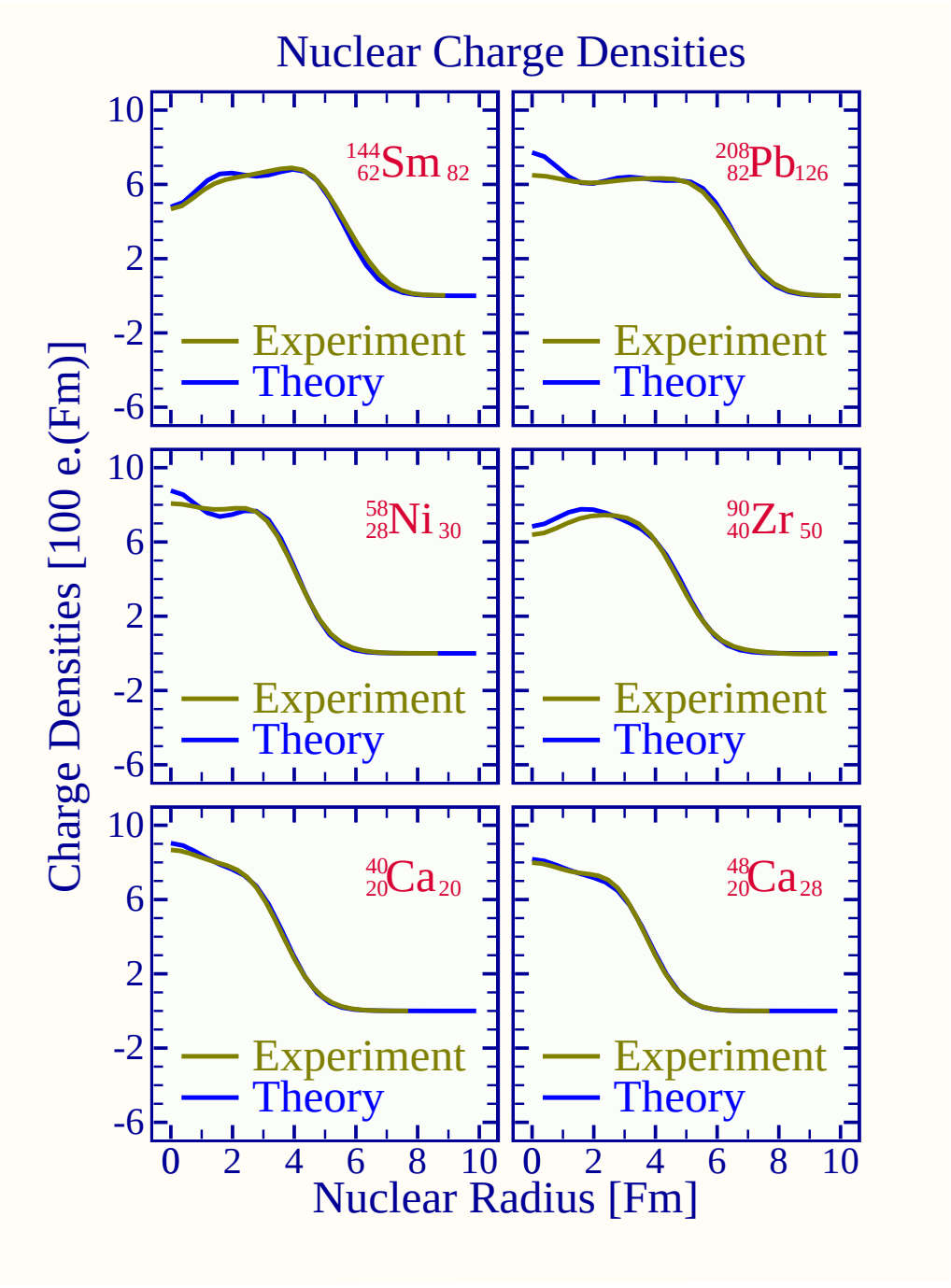


FIG. 3.12 – *Même type de calculs que dans la figure 3.11, mais la courbe théorique correspond à un calcul Hartree-Fock avec une interaction effective de Skyrme (paramétrisation* SLy*4).*

La figure 3.11 compare les densités de charge obtenus dans le cadre de notre modèle avec les résultats extraits de l'expérience (cf. [DeV87] pour les détails concernant la détermination expérimentale des densités de charge). Les résultats obtenus sont tout à fait satisfaisants, étant donné que les densités de charge ne faisaient pas partie des contraintes de notre procédure de minimisation. A titre de comparaison avec d'autres approches, la figure 3.12 présente les densités de charge dans les mêmes noyaux, mais la courbe théorique corres-

pond à un calcul Hartree-Fock auto-cohérent avec une interaction effective de type Skyrme (paramétrisation SLy4).

3.3.3 Têtes de bandes rotationnelles

La procédure de « smoothing » présentée dans la section 3.3.1, qui permet d'obtenir le « meilleur » jeu de paramètres possibles pour n'importe quel noyau du tableau périodique, visait à pouvoir étendre les calculs à des noyaux déformés, voire superdéformés. Avant de commencer l'étude de la superdéformation, il paraissait essentiel de vérifier que les noyaux normalement déformés seraient correctement traités dans le cadre de notre approche. L'un des tests possibles et bien adaptés à notre méthode, consistait à vérifier les spins et parités des têtes de bande rotationnelles pour les noyaux pair-impair (et impair-pair).

Ces têtes de bande représentent les états sur lesquels sont construits les bandes rotationnelles. L'avantage des noyaux impairs (en protons ou en neutrons) est que ces têtes de bandes permettent de tester les prédictions de spin et parité pour le niveau de Fermi (le dernier niveau occupé, i.e. le niveau occupé par le nucléon célibataire pour les noyaux impairs). En effet, pour ces noyaux, on a :

$$K = \Omega \tag{3.17}$$

Autrement dit, la valeur de la projection du spin total du noyau sur l'axe z coïncide avec celle du spin *individuel* du nucléon célibataire (voir l'annexe A où le modèle « Particle+rotor » est brièvement présenté).

Nous avons donc calculé les spin et parité des niveaux de Fermi de tous les noyaux atomiques pour lesquels existait l'information expérimentale sur les têtes de bandes. Les résultats sont présentés sous la forme d'histogrammes tels que ceux des figures 3.14 et 3.15. Les déformations d'équilibre ont été obtenues à partir de [Mol81].

Quelques petites remarques sur ces histogrammes peuvent s'avérer utiles. La figure 3.13 de la page 88 rappelle le principe sur lequel les histogrammes ont été construits : l'idée est d'avoir une mesure de qualité sur la prédiction du spin et de la parité du nucléon célibataire. A cet effet, on mesure la distance ΔE séparant la position du niveau de Fermi de celle du niveau n pour lequel on a le spin et la parité expérimentaux. La procédure est répétée pour chaque noyau atomique, et l'on se retrouve à la fin de la procédure avec une suite de nombre $\{\Delta E_k\}$. On peut ensuite déterminer l'occurrence de chacun de ces nombres (il a été choisi des tranches de 250 keV), et cela nous donne les figures 3.14 et 3.15.

Une autre mesure de la qualité des résultats pourrait être par exemple, non plus d'estimer un écart énergétique, mais un écart en nombre de niveaux, autrement dit de compter le nombre de niveaux séparant le niveau de Fermi calculé du niveau pour lequel on a le spin et la parité expérimentaux. L'inconvénient majeur de cette méthode apparaît lorsque le niveau de Fermi et le niveau « réel » se trouve au milieu d'une couche, avec une forte densité de niveaux. Dans ce cas, il peut y avoir 4 ou 5 niveaux entre les deux, mais seulement quelques centaines de keV en terme d'énergie. Une petite modification du potentiel spin-orbite, par exemple, changerait complètement l'ordre des niveaux dans ce cas. L'approche

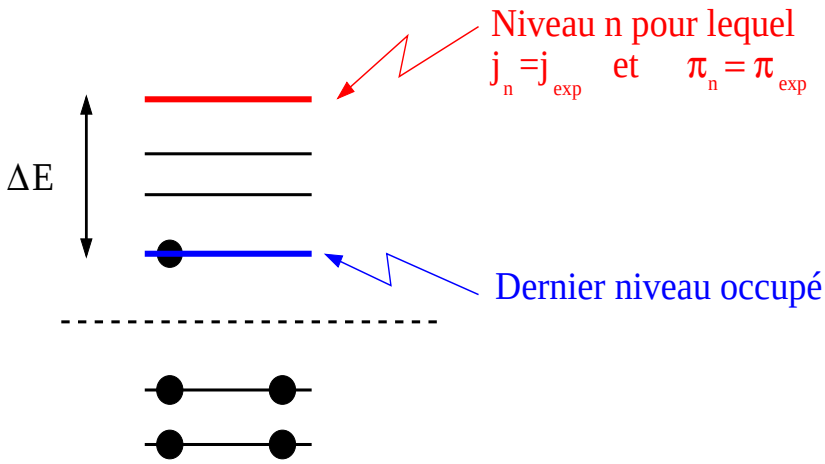


FIG. 3.13 – *La figure illustre le principe de construction des histogrammes. Pour avoir une mesure de qualité du spectre energétique, on « mesure » la distance ΔE séparant la position du niveau de Fermi calculé du niveau n pour lequel on obtiendrait l'accord avec l'expérience. Cette procédure est répétée pour chaque noyau. La figure suppose que le niveau « expérimental » est au-dessus du dernier niveau occupé, mais naturellement, il peut également se trouver en-dessous (dans ce cas $\Delta E < 0$).*

« nombre de niveaux » seule ne permet donc pas de tirer des conclusions satisfaisantes.

Les figures 3.14 et 3.15 montrent des histogrammes très piqués en 0, ce qui signifie que l'écart énergétique est relativement faible : ce test est un point positif pour notre modèle, puisqu'il signifie que, outre les noyaux sphériques, les noyaux déformés sont également correctement traités. Qui plus est, une analyse plus détaillée des noyaux pour lesquels l'erreur théorique est très grande montre qu'une majorité d'entre eux fait partie :

- soit des noyaux à minimum large, c'est-à-dire des noyaux pour lesquels la déformation d'équilibre n'est pas fixée précisément, la courbe de l'énergie en fonction de la déformation présentant un minimum large ;
- soit des noyaux transitionnels, qui passent d'une déformation à l'autre de façon très instable : là encore, la déformation d'équilibre n'est pas bien établie ;
- soit des noyaux présentant des instabilités octupolaires dans leur état fondamental.

Enfin, un dernier argument en faveur de cette approche est que pour chaque noyau, les paramètres de l'hamiltonien de Dirac ont été déterminés à partir de la procédure présentée à la section 3.3.1. En d'autres termes, nous n'avons pas réajusté les paramètres pour trouver le meilleur ensemble possible.

Comme notre modèle se pose, d'une certaine façon, en alternative des approches de type Woods-Saxon non relativiste, il semble logique d'effectuer des comparaisons avec ces modèles. Nous avons procédé au même type de calcul des têtes de bandes avec un hamiltonien de champ-moyen non relativiste et un potentiel de Woods-Saxon avec la paramétrisation universelle. Les résultats sont présentés dans les deux figures 3.17 et 3.16

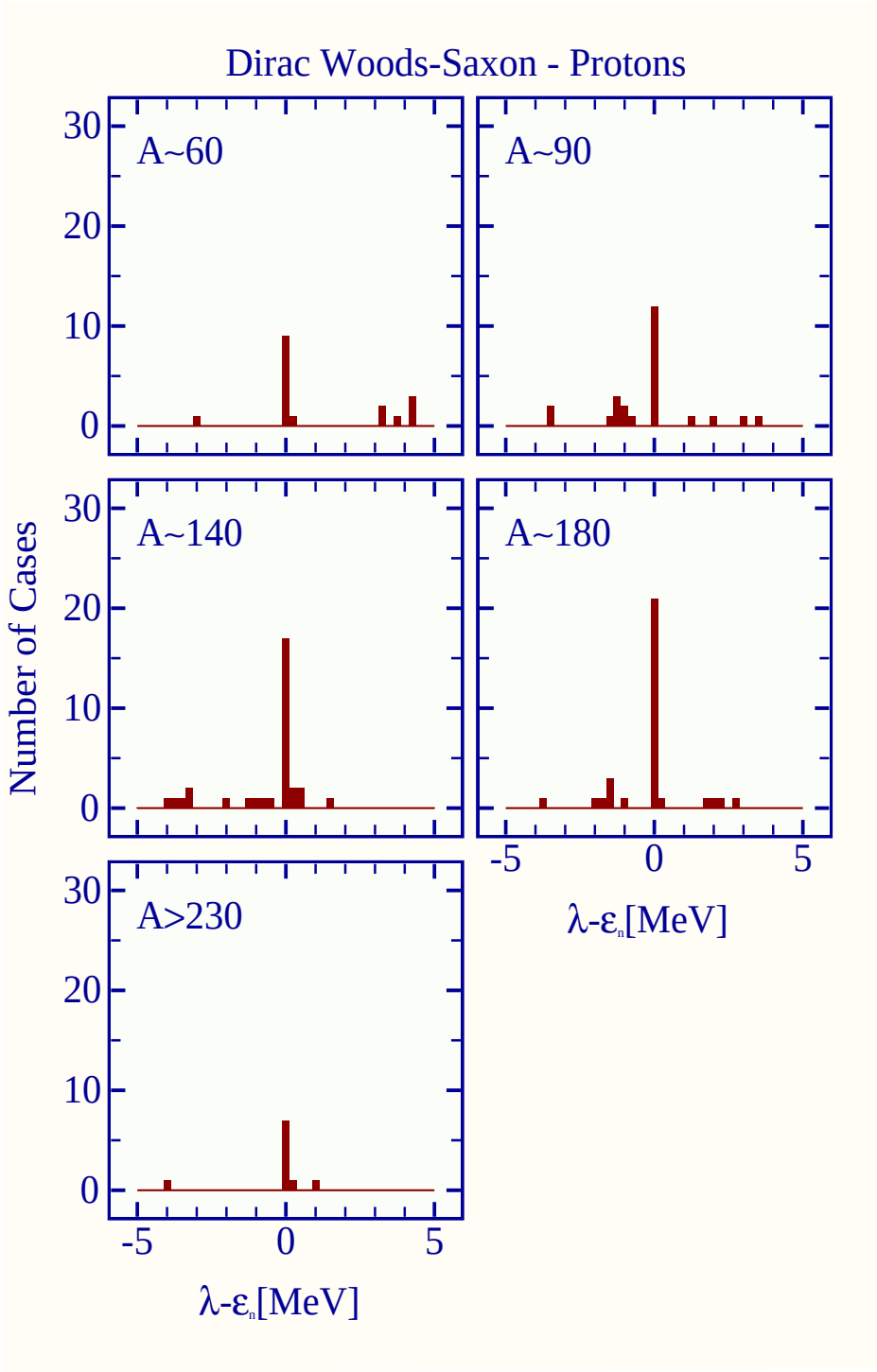


FIG. 3.14 – *La figure présente un résumé des prédictions de spin et parité pour les têtes de bande rotationnelles. En abscisse, l'écart en énergie* $\Delta E = \lambda - \varepsilon_n$ *entre la position du niveau de Fermi calculée* (λ)*, et celle du niveau n* (ε_n) *qui fournit un* J^π *conforme à l'expérience. En ordonnée, le nombre de fois (occurence) où cette écart* ΔE *a été rencontré. Il s'agit des protons.*

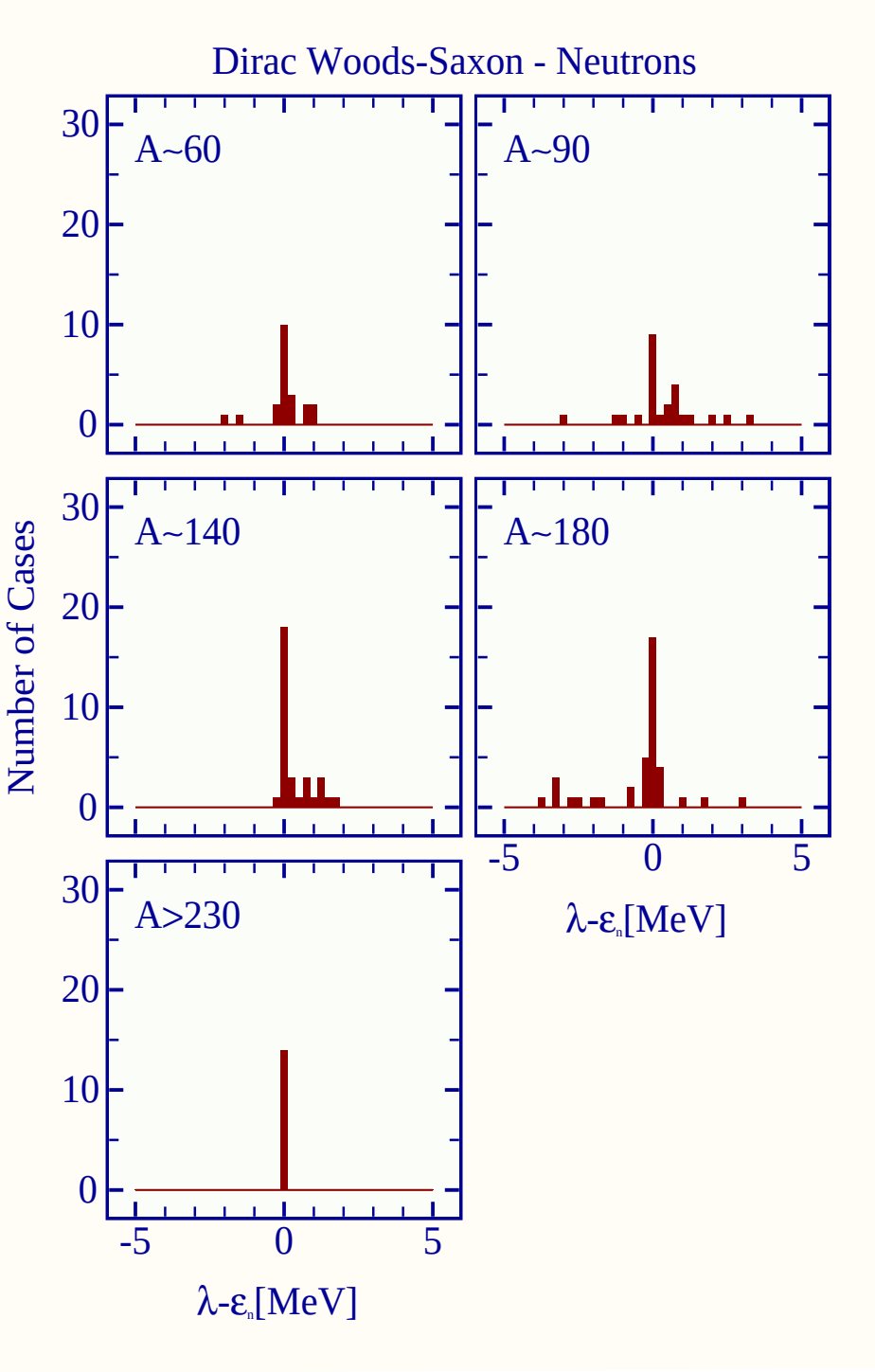


FIG. 3.15 – *La figure présente un résumé des prédictions de spin et parité pour les têtes de bande rotationnelles. En abscisse, l'écart en énergie ΔE entre la position du niveau de Fermi calculée, et celle qui fournit un J^{π} conforme à l'expérience. En ordonnée, le nombre de fois (occurence) où cette écart ΔE a été rencontré. Il s'agit des neutrons.*

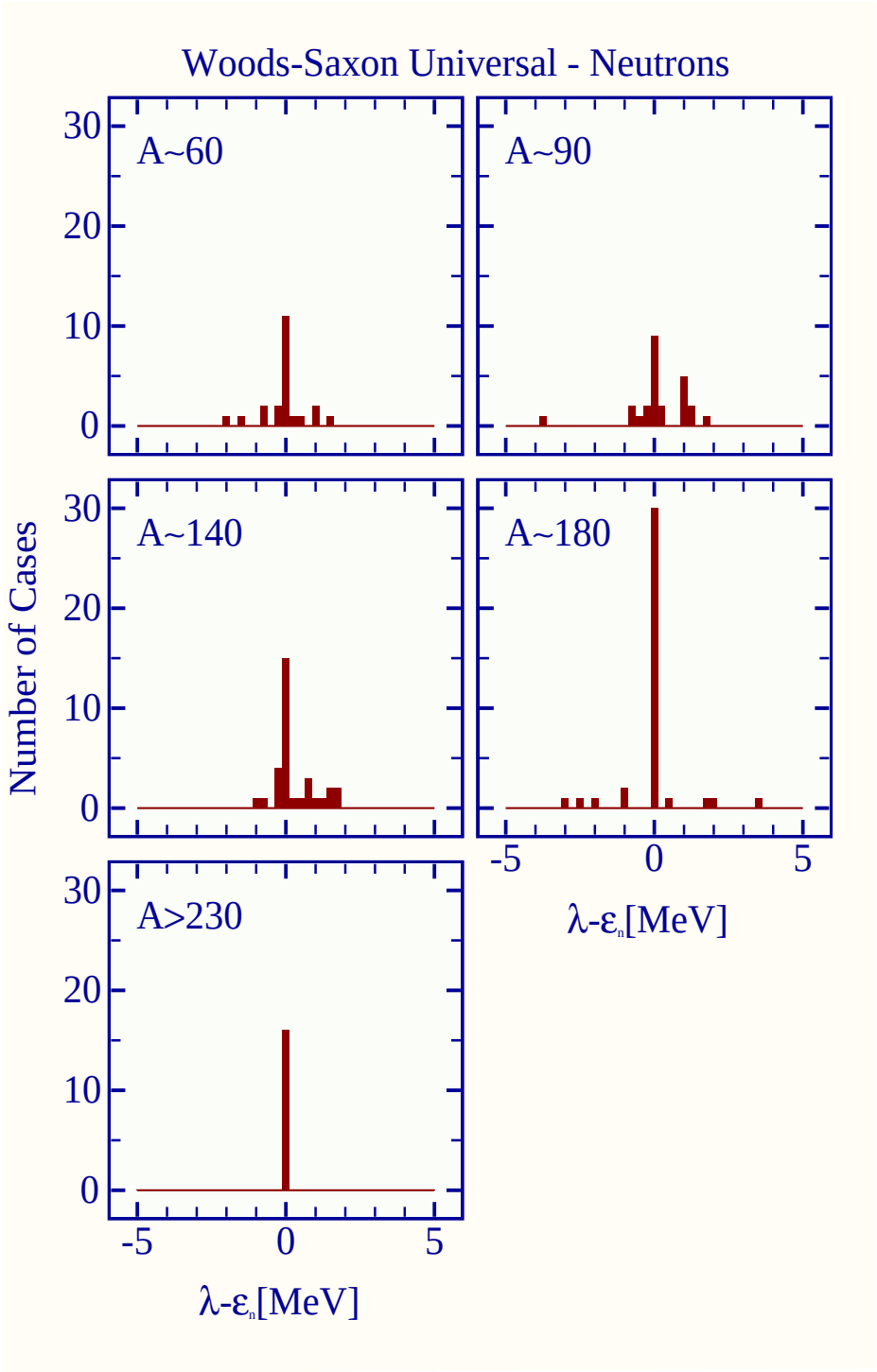


FIG. 3.16 – *La figure présente un résumé des prédictions de spin et parité pour les têtes de bande rotationnelles. En abscisse, l'écart en énergie ΔE entre la position du niveau de Fermi calculée, et celle qui fournit un J^π conforme à l'expérience. En ordonnée, le nombre de fois (occurence) où cette écart ΔE a été rencontré. Il s'agit des neutrons.*

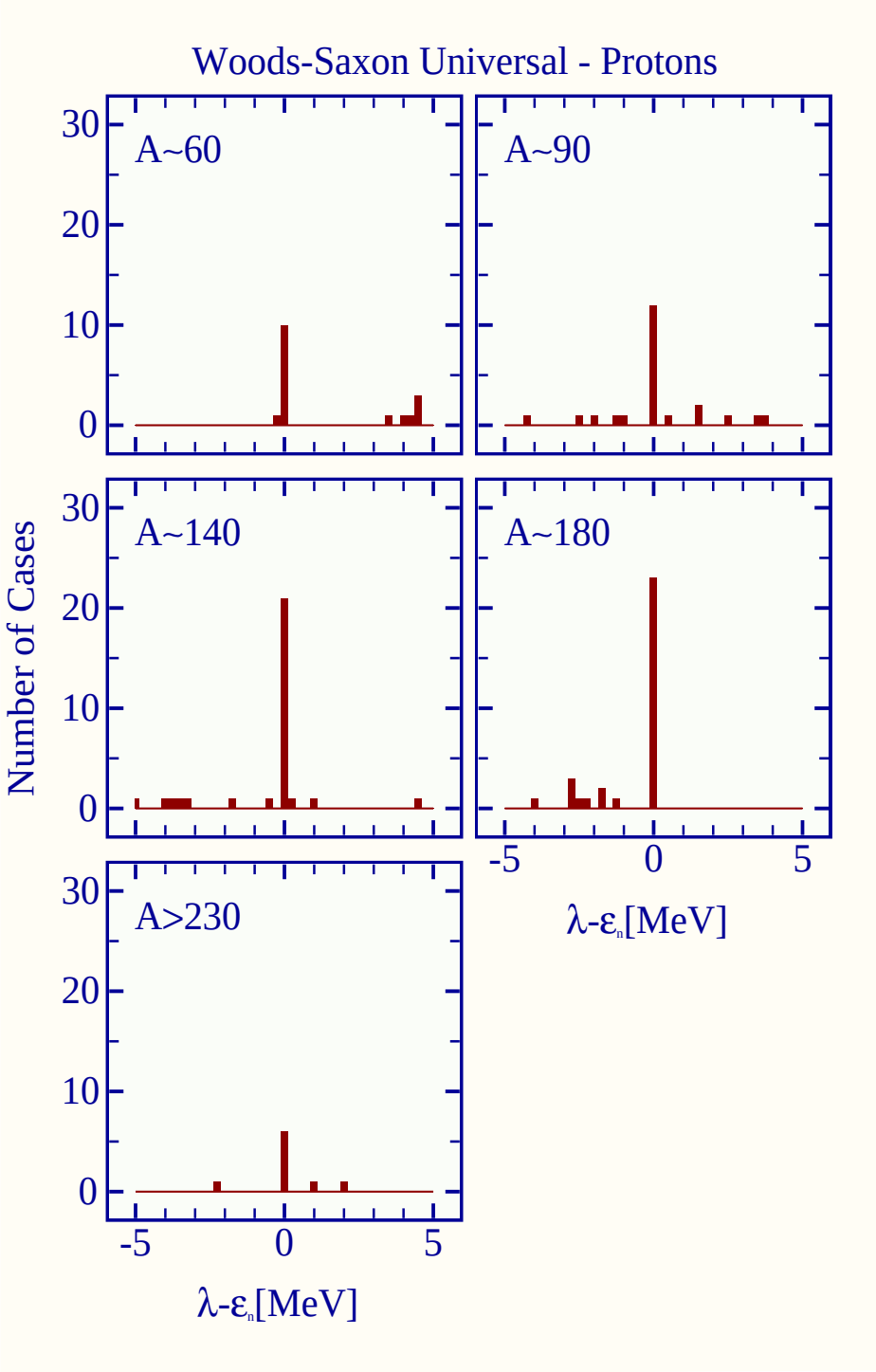


FIG. 3.17 – *La figure présente un résumé des prédictions de spin et parité pour les têtes de bande rotationnelles. En abscisse, l'écart en énergie ΔE entre la position du niveau de Fermi calculée, et celle qui fournit un J^π conforme à l'expérience. En ordonnée, le nombre de fois (occurence) où cette écart ΔE a été rencontré. Il s'agit des protons.*

3.4 RÉSULTATS DE LA PARAMÉTRISATION AVEC MASSE EFFECTIVE INDÉPENDANTE

Nous avons discuté au chapitre 2 une paramétrisation différente de celle issue du formalisme de la théorie RMF, paramétrisation dans laquelle la masse effective varie indépendamment du potentiel spin-orbite (voir page 47). Après avoir exposé de la façon la plus exhaustive possible les résultats de notre méthode avec six paramètres, il nous a semblé intéressant de faire figurer également les calculs relatifs à la masse effective indépendante.

Nous présentons d'abord dans les tableaux 3.9 et 3.10 les paramètres de l'hamiltonien de Dirac avec masse indépendante, tels qu'ils ont été obtenus à partir de notre procédure de minimisation. Tous les commentaires d'ordre général faits sur la méthode avec 6 paramètres restent naturellement valables à 9 paramètres. On peut mettre en évidence la relative stabilité de la profondeur du potentiel central pour les neutrons et les protons (voir la remarque (3.14) de la page 82 pour les protons) ainsi que le fait que ces potentiels ont à peu près la même valeur pour les protons et pour les neutrons (indépendance des forces nucléaires par rapport à l'isospin).

Noyau	V_0^{cen}	r_0^{cen}	a_0^{cen}	λ^{so}	r_0^{so}	a_0^{so}	λ^{eff}	r_0^{eff}	a_0^{eff}
^{40}Ca	-60.0	1.23	0.86	15.2	1.07	0.24	13.7	0.70	0.35
^{48}Ca	-61.0	1.13	0.91	16.0	1.05	0.20	13.5	0.70	0.35
^{56}Ni	-61.5	1.22	0.86	16.3	1.00	0.26	14.0	0.69	0.34
^{90}Zr	-63.9	1.13	1.10	16.5	1.02	0.40	13.5	0.67	0.36
^{100}Sn	-64.0	1.20	1.01	17.1	1.00	0.33	14.1	0.65	0.32
^{132}Sn	-65.6	1.10	1.06	17.9	1.07	0.45	13.6	0.78	0.35
^{146}Gd	-65.0	1.14	1.06	18.3	1.04	0.42	13.6	0.71	0.35
^{208}Pb	-64.5	1.12	1.13	17.0	1.09	0.50	13.3	0.77	0.39

TAB. 3.9 – *Tableau des paramètres de l'hamiltonien de Dirac-Woods-Saxon pour les neutrons pour chacun des noyaux doublement magiques étudiés (masse effective indépendante).*

Les niveaux d'énergie individuels correspondants à ces paramètres sont présentées pour chacun des noyaux sphériques doublement magiques dans les pages 96 à 99. Les progrès par rapport à la paramétrisation à 6 paramètres sont réels dans plusieurs noyaux. Par ailleurs, toujours dans l'optique d'atteindre la meilleure qualité possible pour l'hamiltonien à une particule, il faut porter une grande attention sur les rayons carrés moyens. Le tableau 3.11, analogue au tableau 3.1 page 76, présente les rayons carrés moyens tels que calculés avec l'hamiltonien à 9 paramètres, comparés avec l'expérience et avec les résultats de la théorie RMF. On peut remarquer une amélioration assez nette par rapport à la paramétrisation initiale dans le cas des protons.

Noyau	V_0^{cen}	V_{nucl}	r_0^{cen}	a_0^{cen}	λ^{so}	r_0^{so}	a_0^{so}	λ^{eff}	r_0^{eff}	a_0^{eff}
^{40}Ca	-75.9	-64.8	1.08	0.97	15.2	1.03	0.58	16.5	0.67	0.40
^{48}Ca	-75.0	-65.2	1.16	0.96	15.4	1.03	0.60	16.2	0.66	0.41
^{56}Ni	-77.9	-63.9	1.09	1.00	15.0	1.10	0.55	16.6	0.73	0.43
^{90}Zr	-80.0	-63.2	1.12	1.08	14.6	1.13	0.60	16.1	0.75	0.37
^{100}Sn	-83.0	-62.1	1.09	1.05	14.7	1.17	0.40	16.9	0.85	0.49
^{132}Sn	-79.8	-62.1	1.18	1.13	14.0	1.19	0.50	15.9	0.78	0.39
^{146}Gd	-84.4	-61.0	1.11	1.18	13.9	1.20	0.53	16.0	0.80	0.37
^{208}Pb	-87.0	-61.0	1.13	1.21	14.0	1.23	0.49	16.2	0.85	0.34

TAB. 3.10 – *Tableau des paramètres de l'hamiltonien de Dirac-Woods-Saxon pour les protons pour chacun des noyaux doublement magiques étudiés (masse effective indépendante).*

Noyau	$\langle r^2_{calc}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{ch}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{RMF}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{calc}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{n}\rangle^{1/2}$	$\langle r^2_{RMF}\rangle^{1/2}$
^{40}Ca	3.38	3.39	3.47	3.44	3.49	3.33
^{48}Ca	3.42	3.40	3.47	3.66	3.63	3.60
^{56}Ni	3.73	3.70	3.71	3.73	3.69	3.57
^{90}Zr	4.23	4.20	4.27	4.34	4.29	4.30
^{100}Sn	4.50	4.46	4.46	4.39	4.37	4.31
^{132}Sn	4.71	4.67	4.71	4.96	4.94	4.99
^{146}Gd	4.92	4.93	4.99	4.98	5.00	5.04
^{208}Pb	5.44	5.45	5.51	5.67	5.59	5.73

TAB. 3.11 – *Rayons carrés moyens obtenus pour chacun des noyaux sphériques doublement magiques utilisés dans notre fit. Dans chaque partie du tableau, la colonne du milieu donne les rayons expérimentaux (rayon de charge pour les protons), la colonne de gauche les rayons calculés dans notre modèle, et la colonne de droite les rayons calculés dans l'approche* RMF *tels que donnés dans [Lal99].*

Comme pour l'hamiltonien avec masse effective égale au potentiel spin-orbite, nous avons essayé d'appliquer une régression linéaire sur les ensembles de paramètres obtenus pour les noyaux magiques afin d'obtenir un jeu de paramètres pour n'importe quel noyau. Les coefficients de cette régression linéaire sont présentés dans les deux tableaux 3.13 et 3.12. Rappelons que l'on cherche à exprimer n'importe quel paramètre comme une fonction de l'isospin et de la masse selon la formule :

$$X = X_0 + X_1\frac{N-Z}{N+Z} + \frac{X_2}{A} \tag{3.18}$$

Les tableaux 3.13 et 3.12 donnent les valeurs des constantes X_0, X_1 et X_2 calculées par un programme de régression linéaire à partir des résultats dans les noyaux sphériques, ainsi qu'une mesure σ^2 de la qualité de la régression (i.e. de l'écart moyen entre la droite de régression et les points « expérimentaux »).

Fit	X_0	X_1	X_2	σ^2
V_0^{cen}	67.28	0.29	-302.17	0.367
λ^{so}	18.68	0.84	-138.86	0.414
λ^{eff}	13.55	0.28	7.36	0.296
r_0^{cen}	1.10	-0.02	4.34	0.048
r_0^{so}	1.04	-0.06	0.99	0.030
r_0^{eff}	0.73	-0.04	-1.95	0.048
a_0^{cen}	1.19	-0.10	-13.92	0.056
a_0^{so}	0.49	-0.18	-12.15	0.082
a_0^{eff}	0.36	-0.06	-0.34	0.019

TAB. 3.12 – *Coefficients de la régression linéaire pour les protons.*

Fit	X_0	X_1	X_2	σ^2
V_0^{cen}	60.00	2.02	214.73	0.508
λ^{so}	13.54	0.44	77.17	0.273
λ^{eff}	16.06	-0.33	19.10	0.354
r_0^{cen}	1.14	0.04	-1.58	0.037
r_0^{so}	1.27	-0.10	-10.12	0.016
r_0^{eff}	0.88	-0.11	-8.95	0.031
a_0^{cen}	1.23	-0.14	-11.73	0.040
a_0^{so}	0.46	0.07	5.12	0.062
a_0^{eff}	0.38	0.06	1.44	0.051

TAB. 3.13 – *Coefficients de la régression linéaire pour les neutrons.*

Il faut remarquer que les écarts type moyens σ^2 sont nettement plus faibles que dans le cas de 6 paramètres, ce qui signifie que l'extrapolation des paramètres vers un noyau d'isospin élevé ou de grande masse est plus fiable dans ce cas. Cette extrapolation est importante pour tous les calculs relatifs aux éléments super-lourds par exemple.

De façon générale, la qualité des niveaux individuels obtenus avec l'hamiltonien de Dirac, que ce soit dans la version ou la masse effective varie comme le potentiel spin-orbite, ou bien dans la version « masse effective indépendant » est presque toujours meilleure que dans toutes les autres théories, qu'elles soient auto-cohérentes ou pas, relativiste ou pas. Ainsi, la possibilité de disposer d'un hamiltonien manifestement *réaliste* permet d'envisager avec une confiance assez grande toutes les applications futures. Dans le chapitre suivant, nous présenterons les calculs relatifs aux noyaux en rotation, où là encore, les résultats sont d'une qualité très satisfaisante.

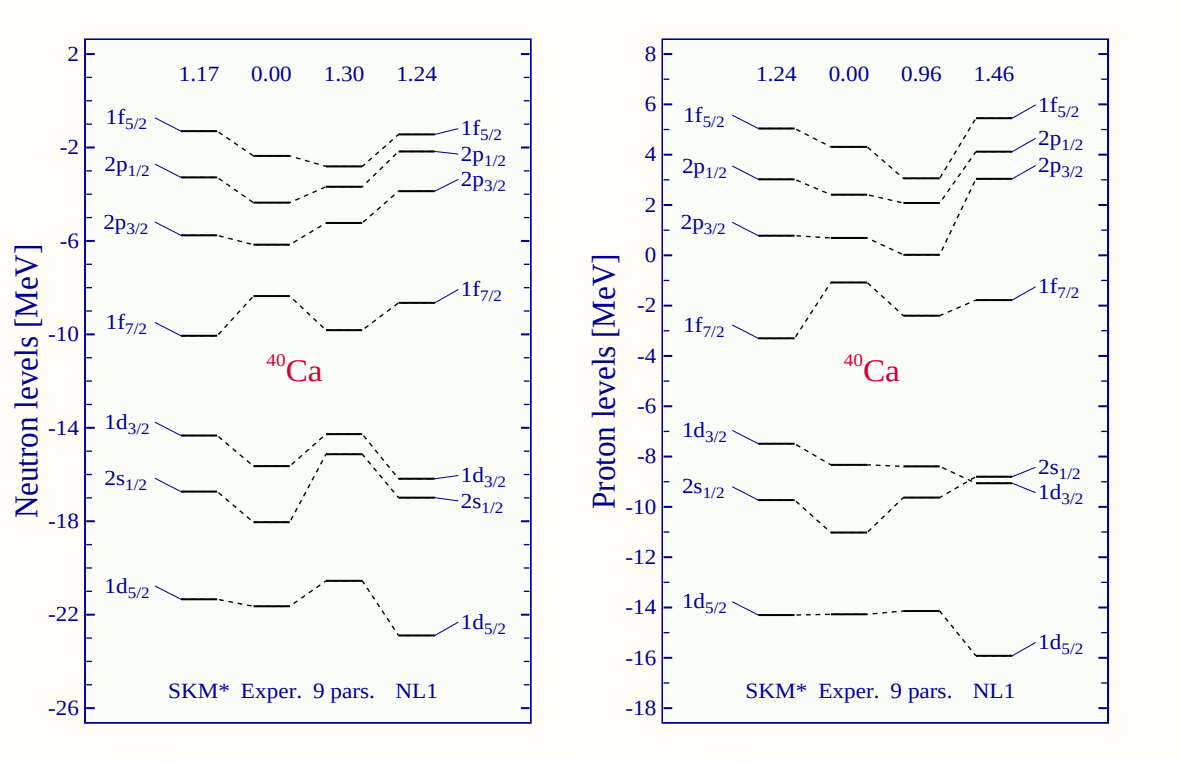


FIG. 3.18 – *Niveaux individuels dans* ^{40}Ca.

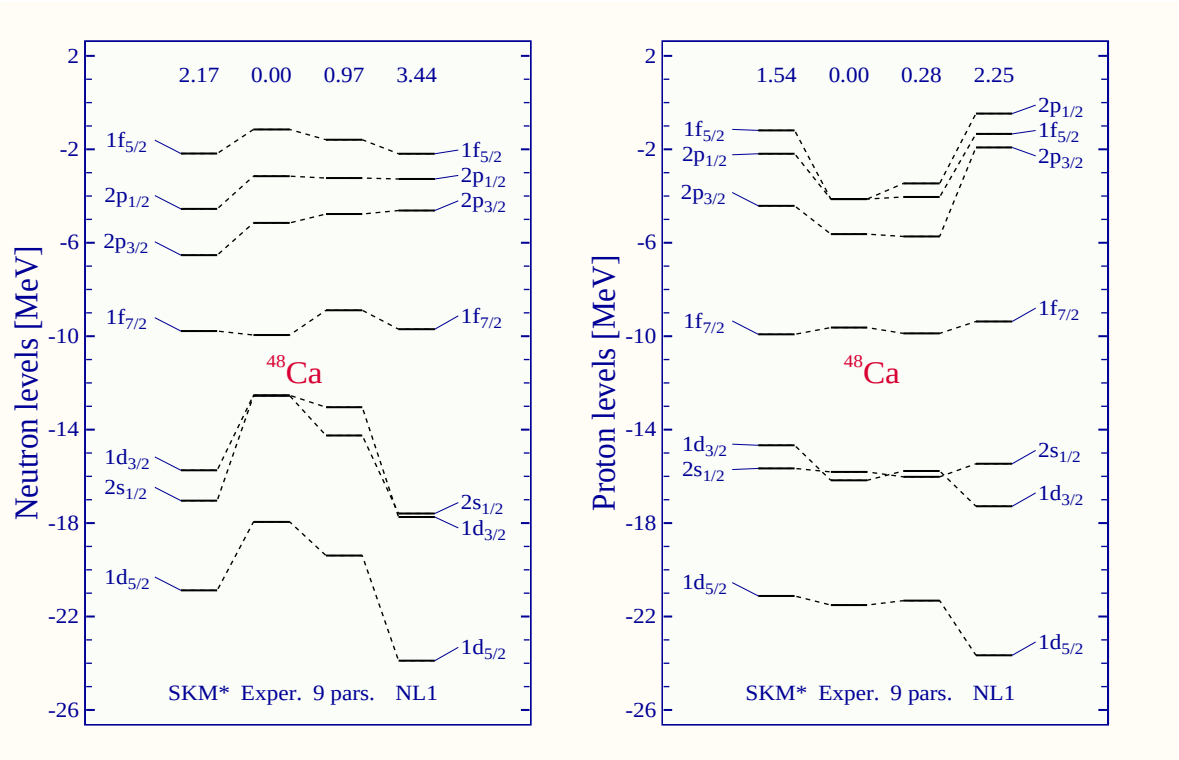


FIG. 3.19 – *Niveaux individuels dans* ^{48}Ca.

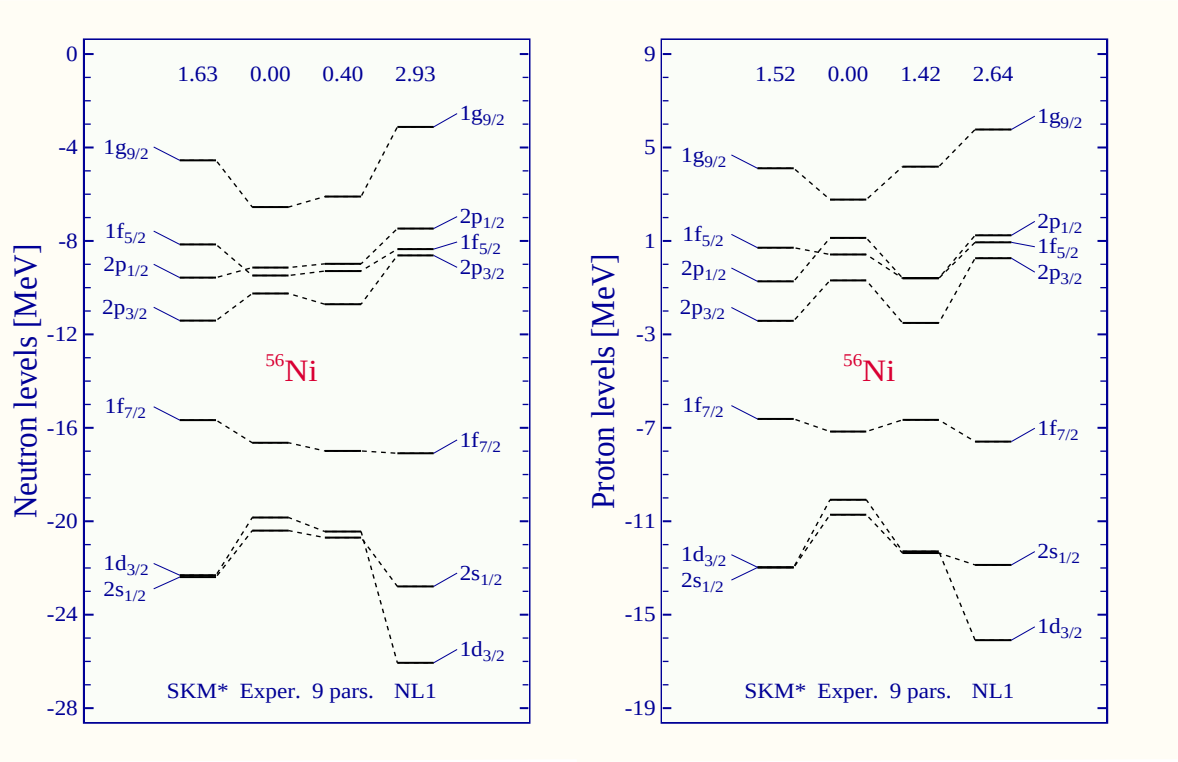


FIG. 3.20 – *Niveaux individuels dans* ^{56}Ni.

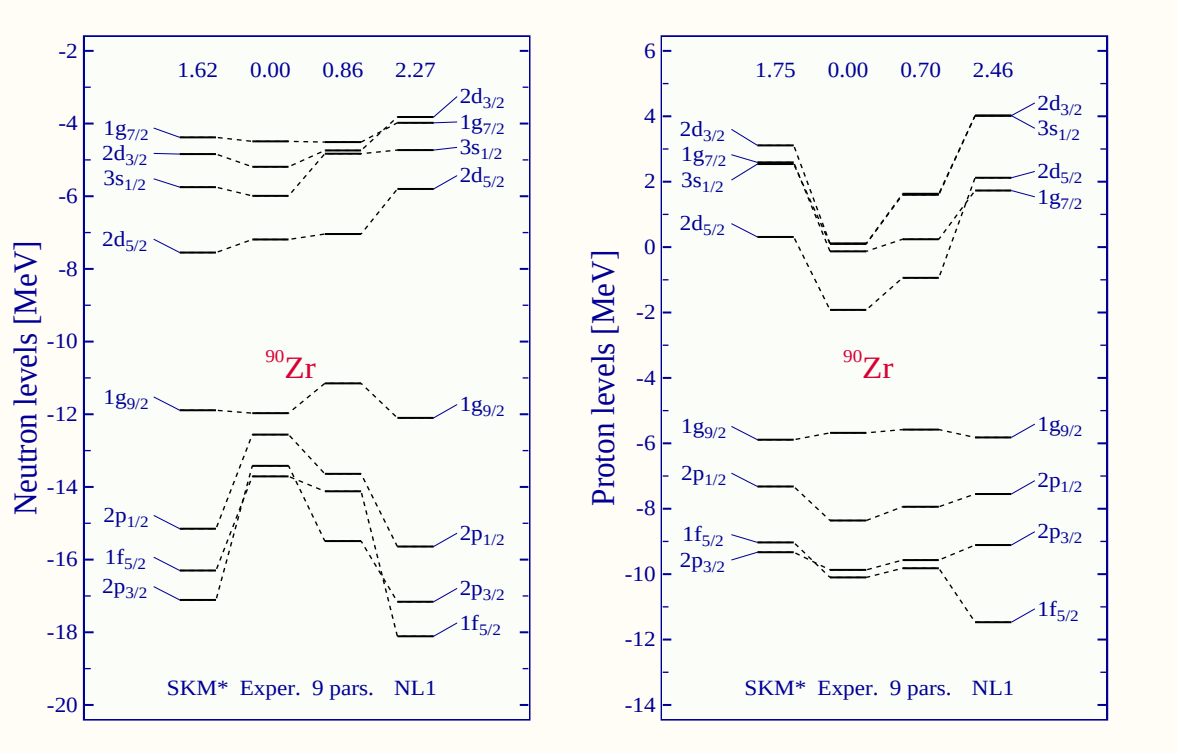


FIG. 3.21 – *Niveaux individuels dans* ^{90}Zr.

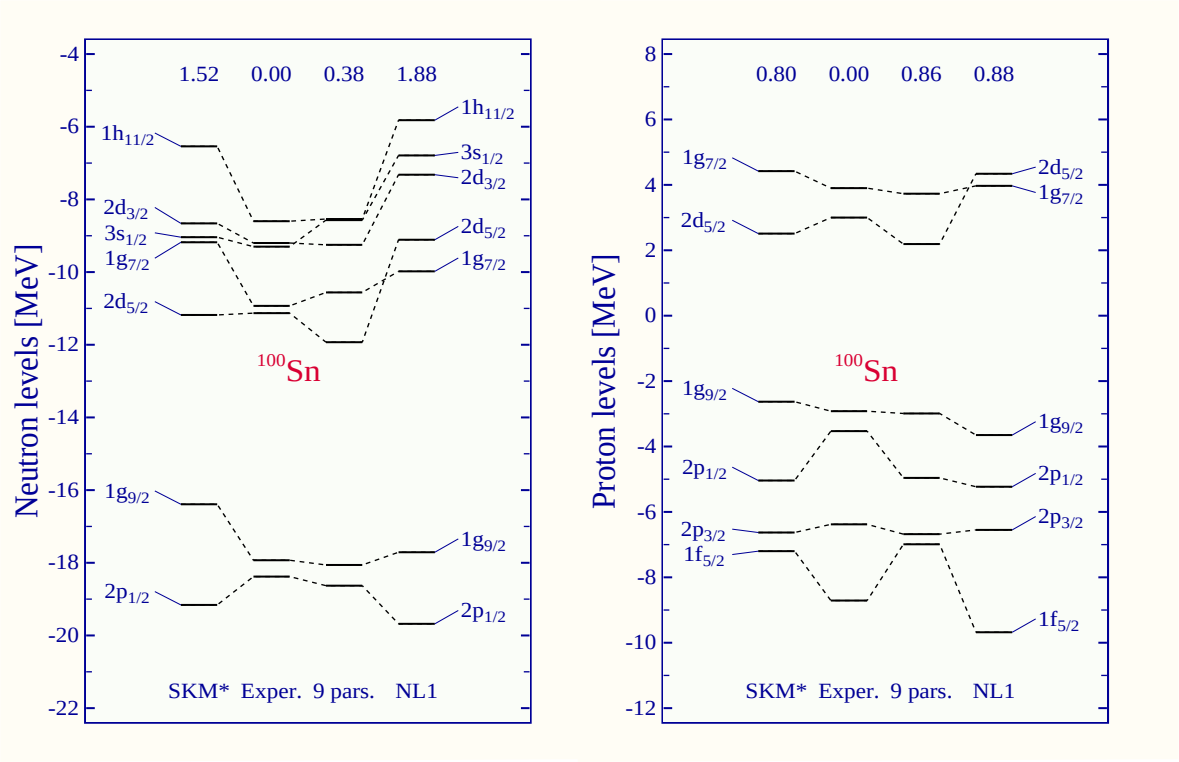


FIG. 3.22 – *Niveaux individuels dans* ^{100}Sn.

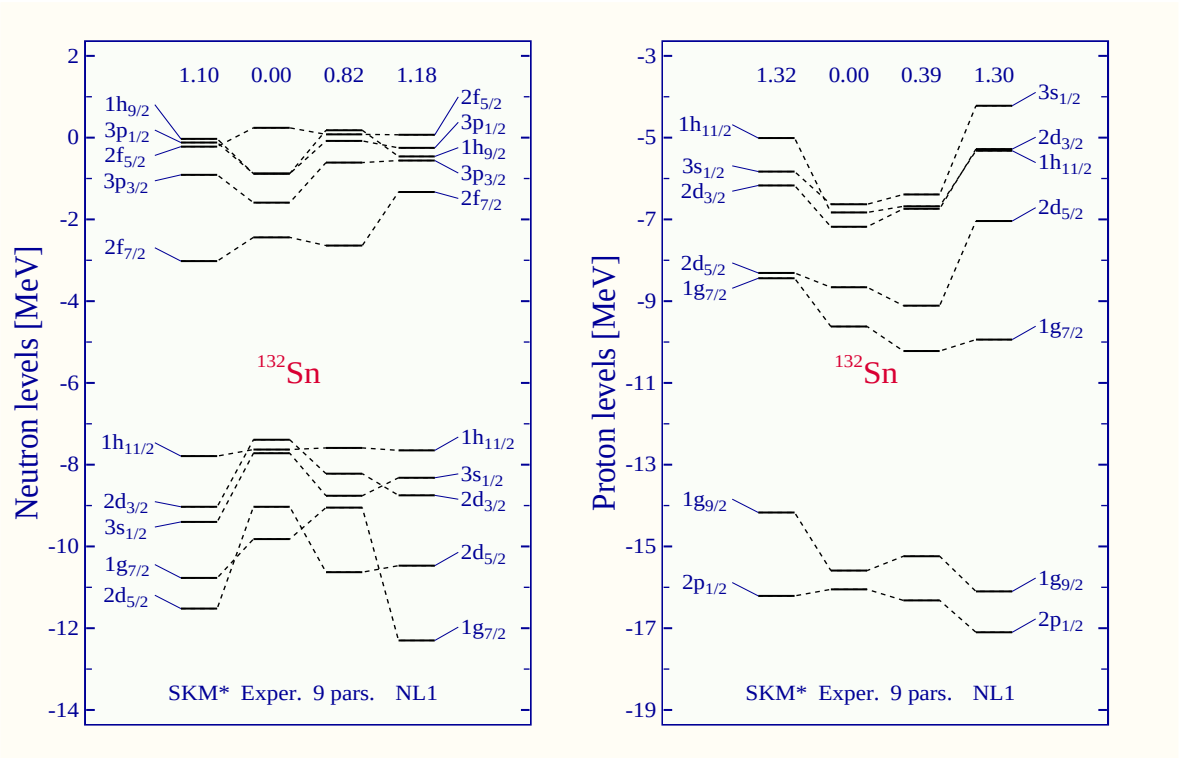


FIG. 3.23 – *Niveaux individuels dans* ^{132}Sn.

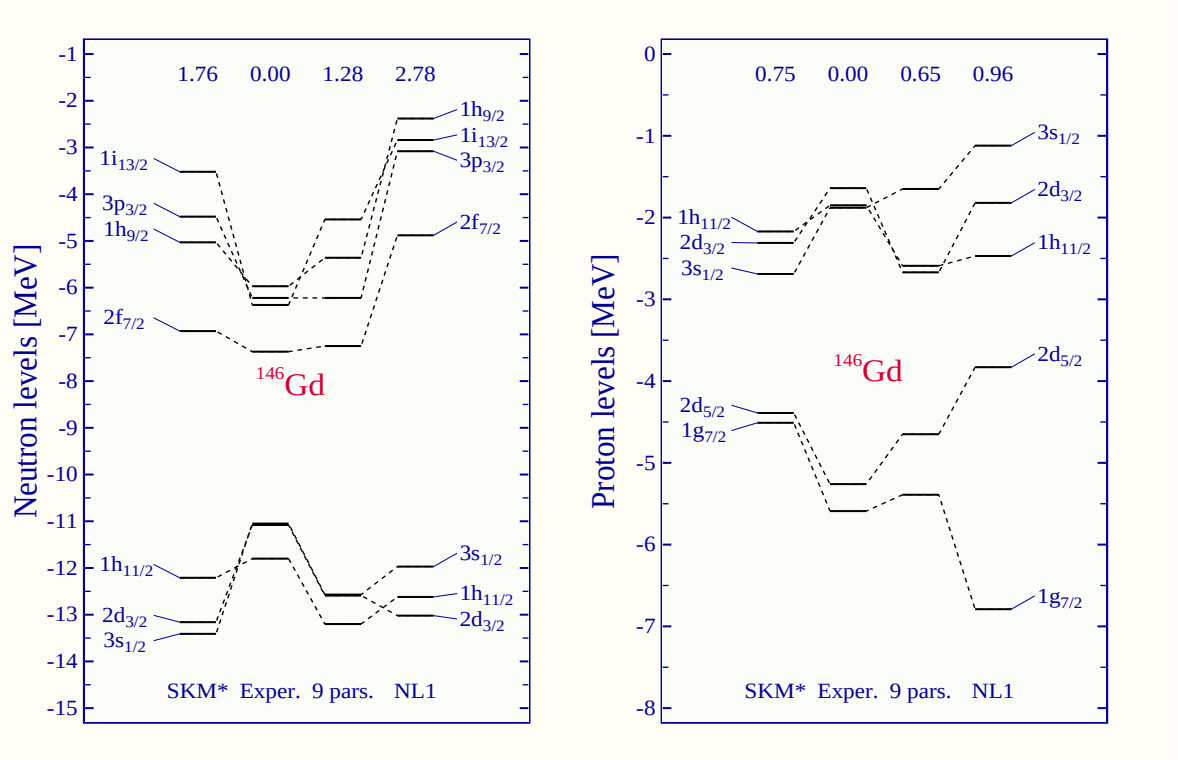


FIG. 3.24 – *Niveaux individuels dans* ^{146}Gd.

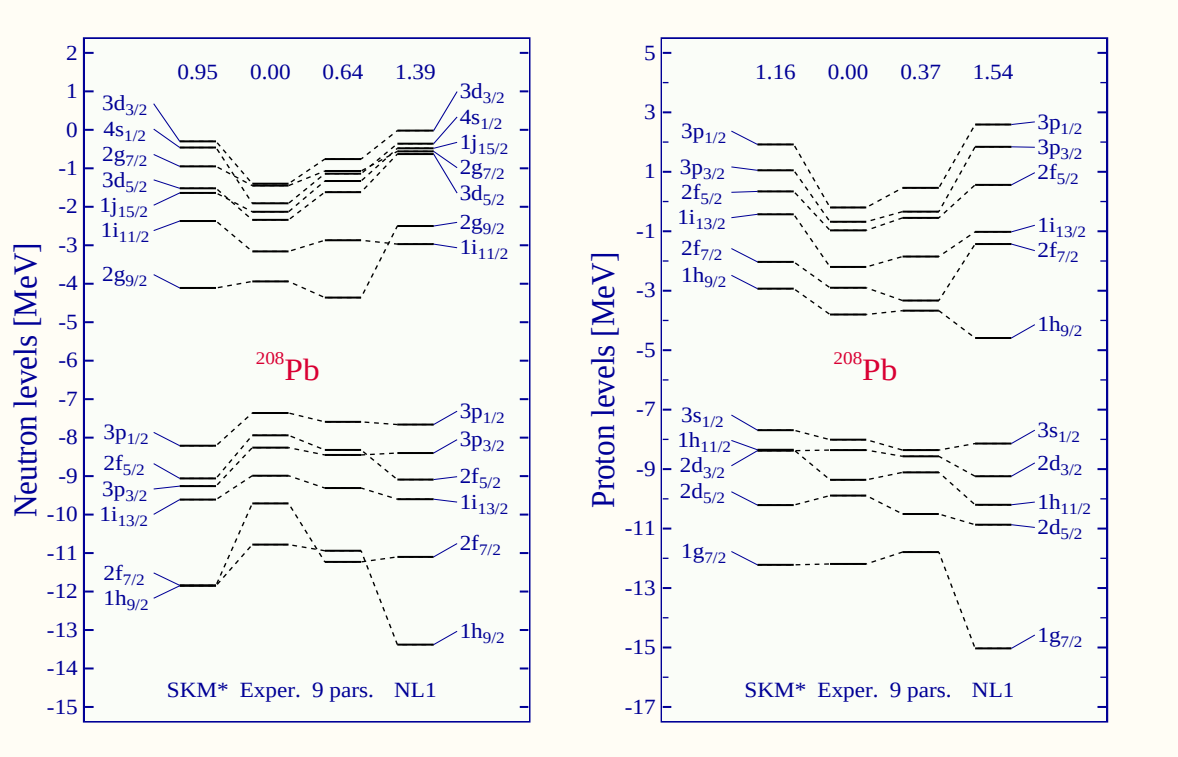


FIG. 3.25 – *Niveaux individuels dans* ^{208}Pb.

4. Rotation collective

La montée en puissance des grands détecteurs gamma (EUROGAM puis EUROBALL en Europe, GAMMASPHERE aux Etats-Unis) au cours des années 1990 a conduit à des progrès significatifs dans la compréhension de la dynamique des noyaux à haut-spins. L'accumulation de données expérimentales a permis de confirmer avec une précision remarquable des propriétés pressenties depuis longtemps, par exemple la superdéformation des noyaux. Mais la qualité des mesures qu'autorisent de tels dispositifs a également mis à jour des phénomènes nouveaux, surprenants, et à ce jour dépourvus d'une interprétation théorique complètement satisfaisante : « staggering » $\Delta I = 4$ dans les bandes rotationnelles, bandes identiques ([Byr90], [Bak95], où une explication théorique est proposée), rotation magnétique. La compréhension profonde de ces mécanismes reste un réel défi lancé aux théoriciens.

A coté de ces nouveaux champs d'investigation ouverts ces dernières années se trouve l'immense masse des données accumulées sur les bandes rotationnelles. La plupart des modèles de structure nucléaire, qu'ils soient relativistes ou non, auto-cohérents ou semi-phénoménologiques, de champ moyen ou à N-corps sont souvent à même de reproduire dans les grandes lignes le comportement de grandeurs telles que les moments d'inertie des noyaux $\mathfrak{J}^{(1)}$ et $\mathfrak{J}^{(2)}$ et l'alignement effectif I_{eff} entre deux bandes rotationnelles. Les moments quadrupolaires, lorsqu'ils sont connus, sont également bien reproduits. Néanmoins, on ne peut que constater que la précision fait parfois cruellement défaut, et ce aussi bien dans les approches auto-cohérentes que dans les approches phénoménologiques [ElA00] : dans le cas de ces derniers, on peut imputer cette imprécision à la simplicité du modèle : si l'on inclut des effets tels que le couplage aux vibrations ou bien encore un traitement réaliste de l'appariement (avec projection du nombre de particules), on parvient souvent à reproduire « assez » bien les données expérimentales, au prix d'une complexité plus grande du modèle. *A contrario*, dans les théories auto-cohérentes Hartree-Fock (non-relativiste) ou RMF, et leurs extensions Hartree-Fock-Bogoliubov-Cranking (HFBC) et Hartree-Bogoliubov-Cranking (HBC), les problèmes rencontrés sont plus difficiles à identifier puisque ces modèles reposent en général soit sur la paramétrisation d'une interaction nucléon-nucléon effective, soit sur celle de l'interaction méson-nucléon. Dans les deux cas, il semble assez illusoire de pouvoir rendre compte de phénomènes aussi faibles que le staggering, du moins dans l'état actuel de ces théories.

Par contre, d'un point de vue théorique, on peut beaucoup apprendre des différentes méthodes : l'interaction (sans mauvais jeu de mots) entre approches auto-cohérentes et approches semi-phénoménologiques par exemple, est souvent féconde. Si l'interprétation

physique concrète de ce qui se passe est souvent plus facile dans le cadre d'une théorie empirique, la compréhension qui en naît permet de remonter jusqu'au niveau microscopique de l'interaction nucléon-nucléon. De même, les différences marquantes entre la théorie RMF et les théories Hartree-Fock sont sources de progrès. Cependant, jusqu'ici, il n'existait pas de modèle « empirique » fondé sur une approche relativiste, et qui pouvait jeter un nouvel éclairage sur les mécanismes à l'œuvre dans le noyau atomique. C'est essentiellement l'objet de cette partie de montrer qu'une telle théorie, que nous avons présentée dans les deux chapitres précédents, outre les améliorations quantitatives qu'elle apporte dans la description des données expérimentales, permet une telle comparaison et justifie l'intérêt de cette démarche.

Nous commencerons donc par présenter succintement l'approximation de cranking, qui sert de cadre à notre travail, section 4.1, puis nous reviendrons dans la section 4.2 sur les différentes symétries qui sont en jeu dans cette physique, et enfin, la section 4.3 sera consacrée à la présentation de quelques-uns des résultats que nous avons obtenus. Ces derniers seront comparés à la fois aux données expérimentales, mais aussi à ceux de la théorie RMF.

4.1 QUELQUES ASPECTS THÉORIQUES DE LA PHYSIQUE DES HAUTS-SPINS

Il est naturellement nécessaire de rappeler quelques-uns des aspects les plus importants de la théorie des noyaux en rotation. Nous n'avons pas cherché à donner une présentation exhaustive de toutes les techniques utilisées dans ce domaine, mais seulement à rappeler les quelques points qui sont nécessaires à la bonne intelligence des méthodes utilisées dans nos calculs. Le lecteur pourra avantageusement consulter [Rin80] pour l'approche auto-cohérente des phénomènes de rotation collective et [Voi83] pour un état des lieux des techniques utilisées dans les méthodes semi-empiriques.

4.1.1 Introduction

De la même façon qu'en mécanique classique la rotation d'un objet se traduit par un moment angulaire non-nul, en mécanique quantique la « rotation » se manifeste par un moment angulaire *total* non nul (c'est-à-dire la somme du moment angulaire orbital et du moment angulaire intrinsèque, i.e. le spin). Par abus de langage, on utilisera plutôt le mot spin en lieu et place de moment angulaire total, suivant ainsi l'usage anglo-saxon.

Les états de haut spins pour les noyaux atomiques peuvent être dus à deux phénomènes différents :

- soit le noyau « tourne » dans son ensemble, ce que l'on appelle de façon plus exacte la rotation collective : tous les nucléons participent au mouvement de rotation. Dans ce cas, le noyau est obligatoirement déformé, car selon les règles de la mécanique quantique, un objet sphérique ne peut être en rotation collective.
- soit une partie seulement des nucléons crée le moment angulaire du noyau. Les direc-

tions de leurs moments angulaires deviennent similaires (« alignement des moments angulaires ») et induisent la rotation du noyau. Il a été observé que l'alignement des moments angulaires de quelques nucléons seulement suffit à produire des moments angulaires nucléaires assez importants, par exemple lorsque l'alignement est presque complet (les directions des $\hat{\vec{j}}$ sont presque identiques) et que les nucléons impliqués dans ce mécanisme ont un spin élevé. Ce type de rotation peut se produire dans les noyaux faiblement déformés, voire presque sphériques.

Dans la suite, nous ne nous préoccuperons que de la rotation collective. D'un point de vue expérimental, la rotation collective se caractérise par des séquences énergétiques très régulières (bandes rotationnelles) dont l'énergie est proportionnelle à $I(I+1)$, I étant le moment angulaire total du noyau.

4.1.2 L'approximation de cranking

L'un des modèles microscopiques les plus abondamment employés pour décrire la rotation collective des noyaux est le modèle du cranking[1]. Ce modèle ne s'applique qu'à des noyaux déformés, les règles de la mécanique quantique interdisant à un noyau sphérique de tourner de façon collective. La rotation du noyau peut être *a priori* quelconque : la figure 4.1 représente le cas particulier où le noyau tourne autour d'un axe perpendiculaire à son axe de symétrie.

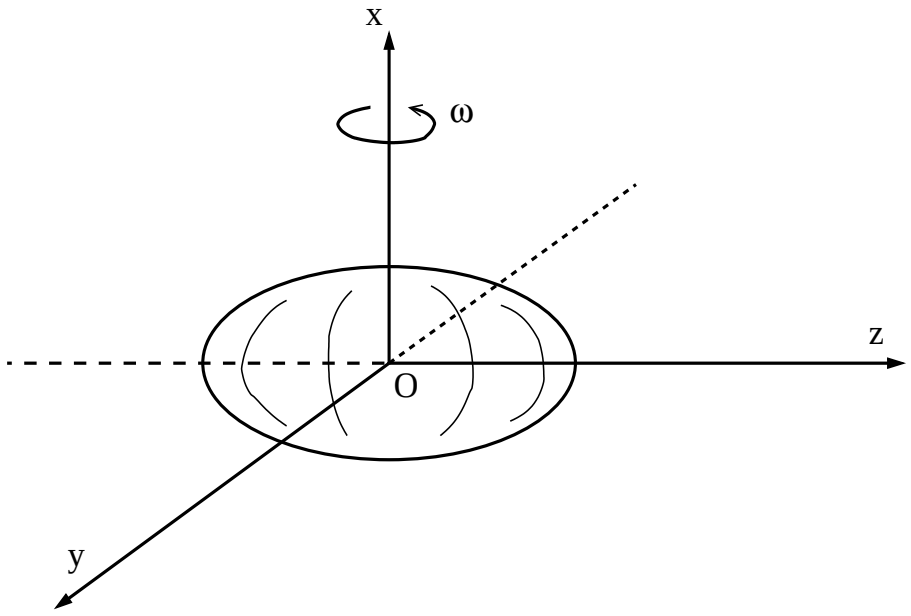


FIG. 4.1 – *Illustration de la rotation d'un noyau déformé « prolate » autour d'un axe $\mathcal{O}x$ perpendiculaire à son axe de symétrie $\mathcal{O}z$.*

[1]**Malgré tous mes efforts, je ne suis pas parvenu à trouver une traduction à la fois concise et satisfaisante de ce terme.**

a) Equation de Schrödinger dans le référentiel tournant

Introduisons le référentiel tournant $\mathcal{R}'$ lié au noyau. Le référentiel du laboratoire est noté $\mathcal{R}_0$. La fonction d'onde totale du noyau dans le référentiel du laboratoire est notée Ψ_0, et dans le référentiel tournant Ψ'. De même, l'hamiltonien total sera noté respectivement $\hat{H}_0$ et $\hat{H}'$. La fréquence de rotation est notée ω, et l'on suppose que la rotation se fait autour de l'axe $\mathcal{O}y$. L'équation de Schrödinger s'écrit[2] :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_0}{\partial t} = \hat{H}_0\Psi_0 \tag{4.1}$$

Introduisons l'opérateur de rotation autour de l'axe $\mathcal{O}y$. La rotation est caractérisée par l'angle $\alpha \equiv \omega t$. L'opérateur correspondant s'écrit[3] :

$$\hat{R}_y = e^{-it\omega\hat{J}_y} \tag{4.2}$$

et la fonction d'onde et l'hamiltonien se transforment respectivement selon :

$$\Psi_0 = \hat{R}_y\Psi' \tag{4.3}$$
$$\hat{H}_0 = \hat{R}_y\hat{H}'\hat{R}_y^{-1} \tag{4.4}$$

En insérant (4.3)-(4.4) dans (4.1), on arrive à :

$$i\hbar\frac{\partial\left(\hat{R}_y\Psi'\right)}{\partial t} = \hat{R}_y\hat{H}'\hat{R}_y^{-1}\hat{R}_y\Psi' = \hat{R}_y\hat{H}'\Psi' \tag{4.5}$$

Or l'opérateur de rotation dépend du temps, et donc :

$$i\hbar\frac{\partial\hat{R}_y}{\partial t}\Psi' + i\hbar\hat{R}_y\frac{\partial\Psi'}{\partial t} = \hat{R}_y\hat{H}'\Psi' \tag{4.6}$$

La dérivée de l'opérateur de rotation vaut :

$$\frac{\partial\hat{R}_y}{\partial t} = -i\omega\hat{J}_y\hat{R}_y$$

et on aboutit donc à l'équation de Schrödinger dans le référentiel tournant lié au noyau :

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} = \left(\hat{H}' - \hbar\omega\hat{J}_y\right)\Psi'} \tag{4.7}$$

[2]**Notons que dans le raisonnement qui va suivre, rien ne spécifie la forme de l'hamiltonien H. Dans la plupart des ouvrages, les auteurs prennent par défaut l'hamiltonien de Schrödinger, autrement dit la fonction d'onde est une simple fonction de 3 variables d'espace et d'une de temps. Mais le raisonnement resterait tout à fait valide si les fonctions d'onde étaient des bi-spineurs à 4 composantes.**

[3]**Dans le cadre de la théorie de Dirac, l'opérateur $\hat{J}_y$ serait en fait une représentation à 4 dimensions du moment angulaire total.**

L'hypothèse fondamentale du modèle du cranking est que le mouvement individuel des nucléons n'est pas perturbé par le mouvement collectif du noyau dans son ensemble. Autrement dit l'hamiltonien $\hat{H}'$, dans le référentiel tournant et pour le noyau étudié en rotation, est le même que l'hamiltonien du même noyau statique étudié dans le référentiel du laboratoire. En d'autres termes, supposons que le noyau étudié soit caractérisé par un hamiltonien $\hat{H}$, où $\hat{H}$ peut être un hamiltonien de champ moyen quelconque avec éventuellement des corrélations à plusieurs corps, par exemple des corrélations d'appariement. Cet hamiltonien décrit le noyau dans le cas statique, sans rotation. L'approximation de cranking stipule qu'en fait :

$$\hat{H}'(\vec{r}\,') = \hat{H}(\vec{r}) \qquad \text{avec} \qquad \vec{r}\,' = \hat{R}_y(t)\vec{r}$$

b) Energies propres et routhiens

Notons Ψ^ω la fonction d'onde dans le référentiel tournant : on peut réécrire l'équation du mouvement comme :

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\Psi^\omega}{\partial t} &= \hat{H}^\omega\Psi^\omega \qquad (4.8)\\ \hat{H}^\omega &= \hat{H} - \hbar\omega\hat{J}_y \qquad (4.9)\end{aligned}}$$

Dans une première étape, nous n'allons pas tenir compte de l'appariement, et nous prendrons donc un simple hamiltonien $\hat{H}$ de champ moyen, somme d'hamiltoniens individuels $\hat{h}_i$:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A}\hat{h}_i \qquad (4.10)$$

La fonction d'onde totale est donc un déterminant de Slater des fonctions d'onde nucléoniques :

$$\Psi(\vec{r_1},\ldots,\vec{r_A}) = \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r_1}) & \ldots & \psi_1(\vec{r_A}) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_A(\vec{r_1}) & \ldots & \psi_A(\vec{r_A}) \end{vmatrix} \qquad (4.11)$$

et pour trouver une fonction d'onde individuelle ψ_ν, on doit d'abord résoudre le problème aux valeurs propres dans le référentiel tournant (la fonction d'onde numéro ν est alors notée ψ^ω_ν) :

$$\hat{h}^\omega|\psi^\omega_\nu\rangle = \varepsilon^\omega_\nu|\psi^\omega_\nu\rangle \qquad (4.12)$$

Les quantités ε^ω_ν sont appelées *routhiens* individuels. Ces quantités ne représentent *pas* les énergies individuelles des nucléons du noyau. En effet, celles-ci sont données dans le référentiel du laboratoire par :

$$e_\nu = \langle\psi_\nu|\hat{h}|\psi_\nu\rangle \qquad (4.13)$$

Utilisons le fait que :

$$\hat{h}|\psi_\nu\rangle = i\hbar\frac{\partial|\psi_\nu\rangle}{\partial t}$$

On a alors :

$$e_\nu = \langle\psi_\nu|\, i\hbar\partial_t\,|\psi_\nu\rangle \tag{4.14}$$

Remplaçons maintenant ψ_ν par son expression en fonction de ψ_ν^ω (4.8) :

$$e_\nu = \langle\psi_\nu^\omega|\hat{R}_y^{-1}\, i\hbar\partial_t\, \hat{R}_y|\psi_\nu^\omega\rangle \tag{4.15}$$

La dérivée partielle agit sur le produit $\hat{R}_y|\psi_\nu^\omega\rangle$ et en développant, on trouve donc :

$$\begin{aligned} e_\nu &= \langle\psi_\nu^\omega|\hat{R}_y^{-1}(\hbar\omega)\,\hat{\jmath}_y\,\hat{R}_y|\psi_\nu^\omega\rangle + \langle\psi_\nu^\omega|\hat{R}_y^{-1}\hat{R}_y\,(i\hbar\partial_t)\,|\psi_\nu^\omega\rangle & (4.16)\\ &= \hbar\omega\,\langle\psi_\nu^\omega|\,\hat{\jmath}_y\,|\psi_\nu^\omega\rangle + \langle\psi_\nu^\omega|\,i\hbar\partial_t\,|\psi_\nu^\omega\rangle & (4.17)\end{aligned}$$

Or, d'après les équations (4.12) et (4.8), on a :

$$\langle\psi_\nu^\omega|\,i\hbar\partial_t\,|\psi_\nu^\omega\rangle = \langle\psi_\nu^\omega|\,\hat{h}^\omega\,|\psi_\nu^\omega\rangle = \varepsilon_\nu^\omega \tag{4.18}$$

D'où le résultat final :

$$\boxed{e_\nu(\omega) = \varepsilon_\nu^\omega + \hbar\omega\,\langle\psi_\nu^\omega|\,\hat{\jmath}_y\,|\psi_\nu^\omega\rangle} \tag{4.19}$$

Dans cette équation, les ε_ν^ω sont les énergies propres des nucléons dans le référentiel tournant, et les $e_\nu(\omega)$ sont les énergies individuelles des nucléons dans le référentiel du laboratoire, autrement dit celles que l'on mesurerait expérimentalement.

c) Moments d'« inertie »

L'un des problèmes majeurs qui se pose en mécanique quantique, et en particulier en physique nucléaire, est l'obtention de grandeurs directement ou disons facilement mesurables par l'expérience. Le problème est réel, d'une part parce que certaines grandeurs utilisées par les théoriciens ne sont pas des observables au sens de la mécanique quantique (c'est le cas par exemple de la fréquence de rotation ω), d'autre part parce que le monde de la mécanique quantique est le monde microscopique, où les mesures directes sont naturellement plus difficiles à faire. En ce sens, ce que l'on appelle communément (et abusivement) les moments d'inertie des noyaux tournants sont d'un formidable intérêt : non seulement ils se déduisent facilement de tout modèle théorique, ainsi que des données expérimentales, mais en plus, ils apportent des contraintes très fortes sur les dits modèles. Dans cette section, nous allons décrire quelques-unes des grandeurs habituellement utilisées en physique nucléaire des hauts spins.

En mécanique classique, un solide tournant autour d'un axe Δ possède une énergie cinétique :

$$E_c = \frac{1}{2}\mathfrak{J}_\Delta\omega^2$$

où $\mathfrak{J}_\Delta$ est le moment d'inertie par rapport à l'axe Δ. Si l'on introduit le moment angulaire $\vec{\ell}$, le moment d'inertie s'écrit simplement :

$$\mathfrak{J} = \frac{\ell}{\omega} \quad \Longrightarrow \quad E_c = \frac{\ell^2}{2\mathfrak{J}_\Delta} \tag{4.20}$$

de sorte que la fréquence de rotation peut se définir localement comme :

$$\omega = \frac{dE}{d\ell} \tag{4.21}$$

Comme il a été mentionné plus haut, la fréquence de rotation n'est pas une observable en mécanique quantique. On la *définit*, par analogie avec la relation (4.21), comme :

$$\boxed{\omega(I) = \frac{dE}{dI}} \tag{4.22}$$

De la même façon, pour un noyau atomique donné, et par analogie avec (4.20), on *définit* le moment dit moment cinématique par :

$$\boxed{\mathfrak{J}^{(1)}(I) = \frac{I}{\omega(I)}} \tag{4.23}$$

où I est le spin (le moment angulaire total) du noyau. Attention au changement de notation : pour ne pas confondre le spin avec les moments d'inertie, nous suivons la convention employée en physique nucléaire. Le moment angulaire total est noté $\hat{I}$, ses composantes à une particule $\hat{j}$. Les valeurs propres du carré de l'opérateur moment angulaire sont de la forme $I(I+1)$, et une bande rotationnelle se caractérise donc par une séquence énergétique de la forme :

$$E(I) \sim I(I+1) \tag{4.24}$$

Revenons maintenant à l'approximation de cranking : nous avons précisé que la rotation ne se faisait qu'autour de l'axe $\mathcal{O}y$. Autrement dit, la fréquence de rotation $\omega \equiv \omega_y$ s'écrit :

$$\omega_y = \frac{dE}{dI_y} = \frac{dE}{d\langle I_y \rangle} \tag{4.25}$$

Or expérimentalement, nous n'avons accès qu'à la valeur propre I du moment angulaire total I^2, et non à $I_y = \langle \hat{I}_y \rangle$. Pour passer outre, on se sert de :

$$\hat{I}^2 = \hat{I}_x^2 + \hat{I}_y^2 + \hat{I}_z^2 \quad \Longrightarrow \quad \langle I^2 \rangle = \langle I_x^2 \rangle + \langle I_y^2 \rangle + \langle I_z^2 \rangle \tag{4.26}$$

Pour extraire la valeur moyenne $\langle \hat{I}_y^2 \rangle$ nécessaire pour déterminer la fréquence de rotation, on fait deux hypothèses. La première est que le moment angulaire total du noyau est dans le plan $\mathcal{O}yz$, ce qui veut dire que la composante $\langle \hat{I}_x^2 \rangle$ est négligeable. La deuxième hypothèse est que :

$$\hat{I}_z \Psi = K \Psi \quad \Longrightarrow \quad \langle I_z^2 \rangle = K^2 \tag{4.27}$$

En vertu de ces deux approximations, la composante y du moment angulaire peut donc s'écrire :

$$\boxed{I_y(I) = \sqrt{I(I+1) - K^2}} \tag{4.28}$$

Contrairement à la mécanique classique, on introduit aussi en physique nucléaire un second moment d'« inertie », le moment dynamique, selon :

$$\boxed{\mathfrak{J}^{(2)}(I) = \left(\frac{d^2E}{dI^2}\right)^{-1}} \tag{4.29}$$

Comme on le voit, cette quantité joue un peu le rôle de rayon de courbure de la courbe $E = E(I)$ (ici, E est l'énergie totale du noyau en rotation, et I est son moment angulaire total). C'est donc une grandeur extrêmement sensible, et qui impose des contraintes très fortes sur les modèles théoriques. Il existe une relation entre le moment $\mathfrak{J}^{(1)}$ et le moment $\mathfrak{J}^{(2)}$:

$$\mathfrak{J}^{(2)} = \left[\frac{d}{dI}\left(\frac{dE}{dI}\right)\right]^{-1} = \left(\frac{d\omega}{dI}\right)^{-1} = \frac{dI}{d\omega} = \frac{d}{d\omega}(\omega\mathfrak{J}^{(1)}) = \mathfrak{J}^{(1)} + \omega\frac{d\mathfrak{J}^{(1)}}{d\omega} \tag{4.30}$$

donc :

$$\mathfrak{J}^{(2)} = \mathfrak{J}^{(1)} + \omega\frac{d\mathfrak{J}^{(1)}}{d\omega} \tag{4.31}$$

A la lumière de cette expression, on comprend que $\mathfrak{J}^{(2)}$ ne doive pas être considéré au sens strict comme un moment d'« inertie » puisqu'il peut prendre des valeurs négatives (suivant le signe de la dérivée de $\mathfrak{J}^{(1)}$). Par contre, c'est une grandeur très sensible à une variation de la fréquence de rotation, et qui par conséquent reflète de façon subtile les changements de configurations individuelles dans le noyau.

4.2 SYMÉTRIES

Comme toujours en physique nucléaire, et plus généralement en physique, l'analyse des symétries existant dans un système facilite grandement l'étude de ce système. En mécanique quantique par exemple, la présence d'une symétrie se traduit à la fois par une quantité conservée (exemple : le moment angulaire dans le cas d'une symétrie par rotation), et par une relation de commutation entre l'hamiltonien et l'opérateur correspondant au nombre quantique conservé. En physique des hauts-spins, les opérations de symétrie considérées sont le plus souvent la parité, la signature et la symétrie de simplex (la symétrie par renversement du temps étant brisée). La brisure ou non de ces symétries est importante tant sur le plan théorique (en permettant d'accélérer grandement les calculs entre autres) que sur le plan expérimental (en sélectionnant les transitions γ autorisées par exemple). Nous rappelons dans cette section les notions relatives à ces différentes grandeurs.

4.2.1 Parité

La section précédente nous a amené à définir certaines grandeurs utiles dans le cadre de la description des noyaux en rotation. Les moments d'inertie $\mathfrak{J}^{(1)}$ et $\mathfrak{J}^{(2)}$ sont abondamment utilisés dans tous les travaux traitant des hauts spins. Pour compléter notre arsenal théorique, il faut maintenant aborder le problème des symétries. Comme nous l'avons vu, un noyau ne peut tourner que si la symétrie sphérique est brisée. Dans les cas qui nous intéressent, nous supposerons toujours qu'il existe un plan de symétrie du noyau, le plan $\mathcal{O}xz$. Ce choix est légèrement restrictif, mais il permet néanmoins de traiter nombres de problèmes rencontrés en physique des hauts spins.

En mécanique quantique, une symétrie d'un système se traduit par l'existence d'un certain opérateur qui commute avec l'hamiltonien. Par voie de conséquence, les valeurs propres de l'opérateur de symétrie sont conservées, i.e. qu'on peut étiqueter les états quantiques du système avec ces nombres. Ainsi l'opérateur de *parité* correspond à un renversement de tous les axes du système ($x \to -x$, $y \to -y$ et $z \to -z$). L'opérateur de parité est noté $\hat{\pi}$ et ses valeurs propres sont ± 1. Pour un noyau sphérique, la parité est évidemment conservée. Pour les noyaux déformés, tout dépend des déformations : si les paramètres de déformation ne contiennent pas de termes impairs (par exemple α_{30}, α_{53} etc.), la parité reste conservée. Dans le cas contraire, cette symétrie est brisée.

4.2.2 Signature $\hat{\mathcal{R}}_y$

L'opérateur de signature décrit la rotation d'un angle π autour de l'axe $\mathcal{O}y$. Il a donc pour expression :

$$\boxed{\hat{\mathcal{R}}_y = e^{-i\pi \hat{J}_y}} \tag{4.32}$$

Par application de l'opérateur signature, on transforme ($x \to -x$, $y \to +y$ et $z \to -z$). Cet opérateur agit sur la fonction d'onde totale du noyau[4]. Cependant, il peut facilement s'écrire comme le produit d'opérateurs de signature individuels $\hat{R}_y$:

$$\hat{\mathcal{R}}_y = e^{-i\pi \sum_{i=1}^{A} \hat{j}_y^{(i)}} = \prod_{i=1}^{A} e^{-i\pi \hat{j}_y^{(i)}} = \prod_{i=1}^{A} \hat{R}_y^{(i)} \tag{4.33}$$

avec :

$$\hat{R}_y = e^{-i\pi \hat{j}_y} \tag{4.34}$$

En utilisant la décomposition du moment angulaire $\hat{j}_y = \hat{\ell}_y + \hat{s}_y$, on peut facilement démontrer que :

$$\hat{R}_y^2 = -1 \tag{4.35}$$

[4] **La rotation s'opère sur la fonction d'onde totale, qui contient donc le spin intrinsèque. En plus de la transformation sur les coordonnées spatiales, l'action de l'opérateur de signature inclut donc aussi une rotation dans l'espace de spin.**

Par conséquent, les valeurs propres de l'opérateur de signature individuelle sont $\pm i$. Par contre, pour l'opérateur de signature totale, c'est un tout petit peu plus compliqué. En effet, la signature totale est le produit de toutes les signatures individuelles. Donc :

$$\hat{\mathcal{R}}_y^2 = (-1)^A \tag{4.36}$$

Si A est pair la signature totale vaut ± 1. Si A est impair, la signature totale vaut $\pm i$. Par ailleurs, on peut montrer [Boh69] que l'expression générale de la signature pour un noyau ayant un moment angulaire I, dans le cadre du modèle de rotateur quantique, est :

$$\boxed{r = (-1)^I} \tag{4.37}$$

D'où les quatre cas possibles :

$$\text{Si A pair :} \quad \begin{cases} r = +1 & I = 0, 2, 4, \ldots \\ r = -1 & I = 1, 3, 5, \ldots \end{cases}$$

$$\text{Si A impair :} \quad \begin{cases} r = -i & I = \frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{9}{2} \ldots \\ r = +i & I = \frac{3}{2}, \frac{7}{2}, \frac{11}{2} \ldots \end{cases}$$

4.2.3 Simplex $\hat{\mathcal{S}}_y$

Un troisième opérateur de symétrie qui nous sera utile est l'opérateur de simplex $\hat{\mathcal{S}}_y$. Il est défini comme l'application de l'opérateur de parité, suivie de l'application de l'opérateur signature. Par conséquent, comme il est facile de s'en convaincre, il correspond à une réflection dans le plan $\mathcal{O}xz$. Autrement dit, les règles de transformation sont (nonobstant le spin) : $x \to +x$, $y \to -y$ et $z \to +z$. L'expression de l'opérateur de simplex est par définition :

$$\boxed{\hat{\mathcal{S}}_y = \hat{\mathcal{R}}_y \hat{\pi}} \tag{4.38}$$

Dans la pratique, cet opérateur a une influence cruciale, puisque le code WS-ODD que nous avons utilisé impose la conservation du simplex. La base cartésienne utilisée pour écrire la matrice de l'hamiltonien est en fait une base propre du simplex (Cf. Annexe C). Puisque l'opérateur de simplex est toujours conservé, et qu'il est le produit de la parité par la signature, cela signifie que la conservation de la parité (resp. signature) implique la conservation de la signature (resp. parité).

La relation (4.38) se traduit d'ailleurs sur les nombres quantiques individuels de parité, π, signature, r et simplex, s par :

$$s = r \times \pi \tag{4.39}$$

Autrement dit le simplex est le produit de la signature par la parité. Il est à noter que le simplex peut être conservé sans que la parité et la signature le soient.

4.2.4 Renversement du temps

La dernière symétrie qui nous intéressera est la symétrie par renversement du temps. Comme son nom l'indique, elle correspond à $t \rightarrow -t$ dans les équations. Une des difficultés est d'obtenir une *représentation* de cet opérateur dans l'espace des fonctions d'onde[5]. On montre qu'une représentation générale de l'opérateur de renversement du temps est ([Sch62]) :

$$\hat{T} = \hat{U}\hat{K} \tag{4.40}$$

où $\hat{U}$ est un opérateur unitaire et $\hat{K}$ est l'opérateur de conjugaison complexe. Pour une particule avec un spin 1/2 (un fermion), l'expression de $\hat{T}$ se simplifie en :

$$\hat{T} = +i\sigma_y\hat{K} \tag{4.41}$$

La convention de choisir un signe + est discutée plus en détail dans l'annexe C. Pour les noyaux statiques (qui ne tournent pas), la symétrie par renversement du temps est conservée (c'est la dégénérescence de Kramers). Par contre, pour les noyaux en rotation, cette symétrie est brisée.

4.3 RÉSULTATS DANS LA RÉGION DE MASSE $A \sim 150$

Dans l'étude des noyaux en rotation, de nombreux phénomènes peuvent venir compliquer l'interprétation des résultats. L'un des plus importants est l'interaction d'appariement. Comme nous souhaitons ici nous concentrer uniquement sur les aspects relatifs à la structure des orbitales individuelles dans le formalisme de Dirac, il est important de s'affranchir du mieux possible de tels phénomènes. Pour cette raison, nous avons choisi comme cas d'école la région de masse $A \sim 150$, centrée autour de ^{152}Dy, pour laquelle il est communément supposé que l'appariement y est très affaibli.

Par ailleurs, le modèle de rotation collective unidimensionnel (où une seule fréquence de rotation est prise en compte) n'est valable que si les spins nucléaires (les moments angulaires totaux) sont assez élevés. Là encore, la région de masse $A \sim 150$ se révèle un excellent laboratoire, puisque les spins atteints y sont typiquement de l'ordre de 40-50$\hbar$ ou plus.

4.3.1 Routhiens dans le noyau ^{152}Dy

Dans les théories auto-cohérentes, comme la théorie RMF ou les théories Hartree-Fock non relativistes, les paramètres de déformation du noyau sont automatiquement calculés à chaque étape de la convergence. Au contraire, dans les modèles semi-empiriques tels que l'approche Woods-Saxon que nous avons utilisée, il est nécessaire de fixer la valeur de la déformation d'équilibre à la valeur correcte. Pour cela, on peut soit procéder à des calculs

[5] **Les opérateurs de signature et de simplex que nous avons introduits sont en fait des représentations des symétries correspondantes dans l'espace des fonctions d'onde.**

de déformation d'équilibre pour chaque valeur de la fréquence de rotation ω (calculs de type « micro+macro », voir chapitre 5), soit déterminer de manière empirique les paramètres de déformation optimums.

Pour avoir plus rapidement l'information nécessaire, nous avons adopté la seconde solution. Nous étions guidés dans notre tâche par le fait que des calculs macro+micro avaient déjà été réalisés pour plusieurs centaines de noyaux dans le cadre des modèles non-relativistes avec un potentiel de Woods-Saxon ([ElA00, Wer95] par exemple). Pour ^{152}Dy, ces calculs avaient conduit à choisir les déformations suivantes :

$$\alpha_{20} = 0.61 \qquad \alpha_{40} = 0.12$$

Dans le cas relativiste, il s'est avéré que les paramètres de déformation les plus adéquats étaient :

$$\alpha_{20} = 0.64 \qquad \alpha_{40} = 0.12$$

Avec ces valeurs, on peut à la fois reproduire la valeur expérimentale du moment quadrupolaire $Q_{20} = 18.9$ (valeur qui reste remarquablement stable en fonction de ω), ainsi que les principales grandeurs caractéristiques, du type moments $\mathfrak{J}^{(1)}$, $\mathfrak{J}^{(2)}$, etc, que nous allons maintenant présenter.

Nous choisissons de commencer par les routhiens individuels pour les neutrons et les protons. Pour ^{152}Dy, les gaps superdéformés sont $Z = 66$ et $N = 86$. Le noyau ^{152}Dy étant souvent pris comme exemple typique de noyau superdéformé, de nombreux articles existent, qui présentent l'analyse détaillée de ses propriétés obtenue par différentes méthodes. Ainsi, on dispose des résultats du modèle dit « Cranked Nilsson » (CN), de l'approche Hartree-Fock avec force de Skyrme (par exemple [Rig99] avec la paramétrisation SLy4 de l'interaction de Skyrme), et plus récemment des résultats obtenus avec la théorie RMF [Afa96, Afa98].

Dans chaque modèle intervient, pour les neutrons, des orbitales intruses [770]1/2 (issues du niveau sphérique $j_{15/2}$), et pour les protons des orbitales, également intruses, [660]1/2 et [651]3/2. L'influence de ces orbitales intruses notamment sur l'évolution des moments $\mathfrak{J}^{(2)}$ ou de la déformation Q_{20} est reconnue depuis longtemps. Il est donc important pour la validité de n'importe quelle théorie, qu'elle prédise les positions énergétiques de ces orbitales intruses de façon correcte.

Les deux figures de la page suivante présentent les routhiens individuels protons et neutrons tels qu'obtenus avec l'hamiltonien de Dirac des chapitre 2 et 3. Les figures 4.4 et 4.5 de la page 114 ont elles été obtenues avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon (avec la paramérisation universelle [Dud78]). De façon globale, la structure est à peu près la même : les orbitales intruses [770]1/2 pour les neutrons et [651]3/2 pour les protons sont présentes, et les gaps magiques sont à leur place. En fait les configurations dans les deux cas sont strictement identiques.

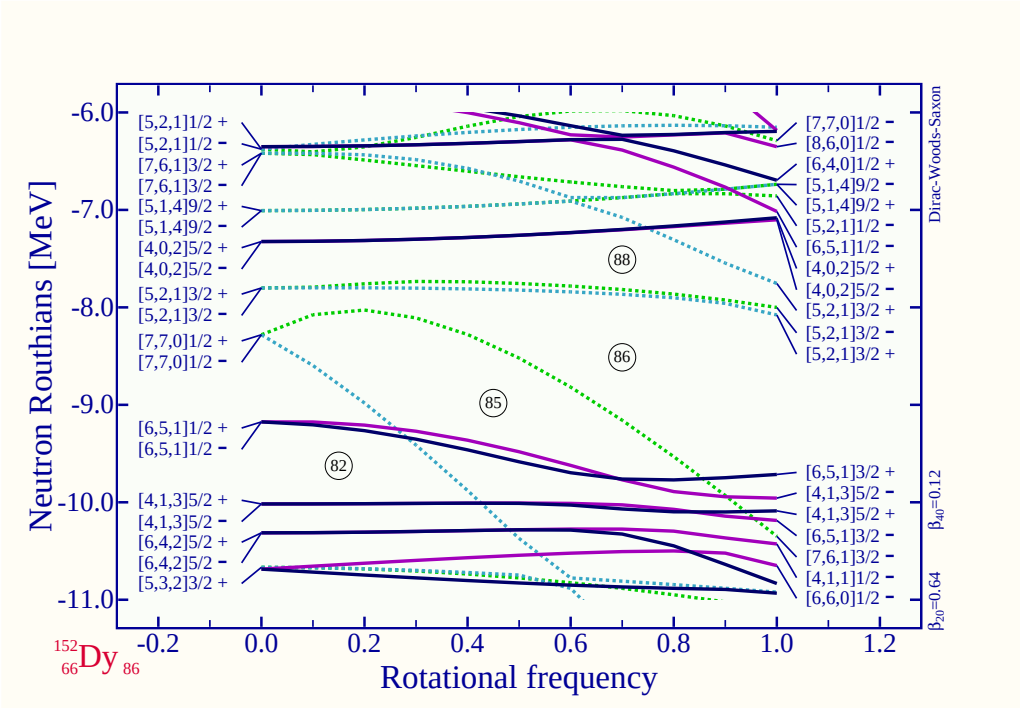


FIG. 4.2 – *Routhiens individuels pour les neutrons dans* ^{152}Dy. *Les paramètres de déformation sont* $\alpha_{20} = 0.64$ *et* $\alpha_{40} = 0.12$, *ce qui donne une valeur du moment quadrupolaire proton* $Q_{20} = 18.9$ *eb. Les lignes pleines correspondent à des états de parité positive, les lignes en pointillé à des états de parité négative. Pour chaque parité, deux couleurs sont associées aux deux valeurs possibles de la signature, qui est indiquée à droite du label de Nilsson.*

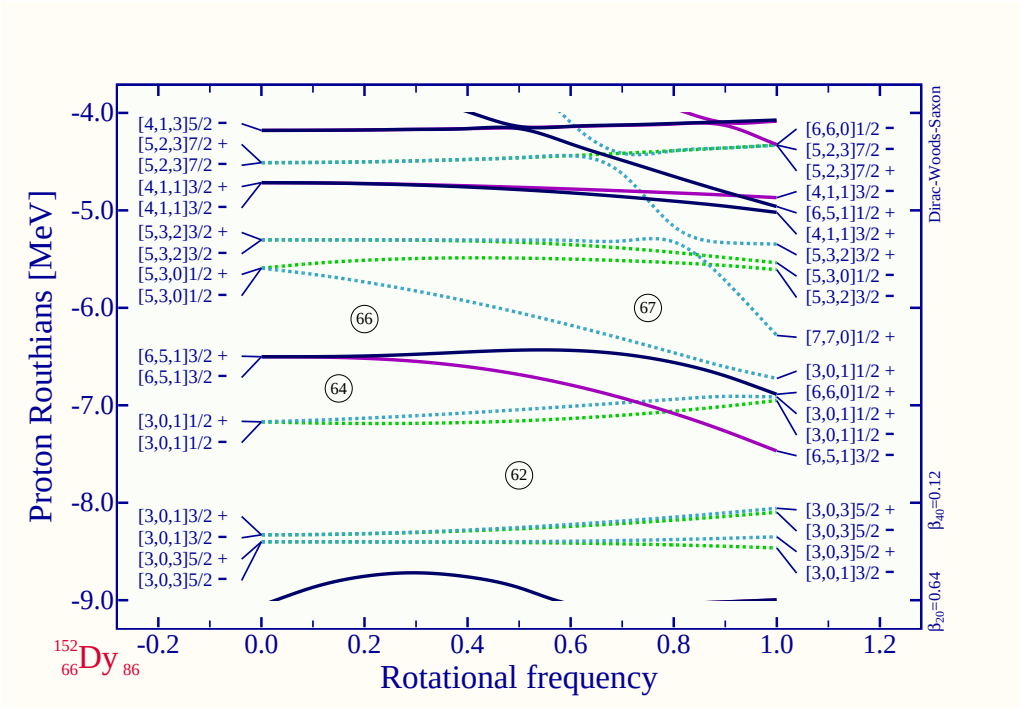


FIG. 4.3 – *Routhiens individuels pour les protons dans* ^{152}Dy. *Mêmes commentaires généraux que pour la figure 4.2*

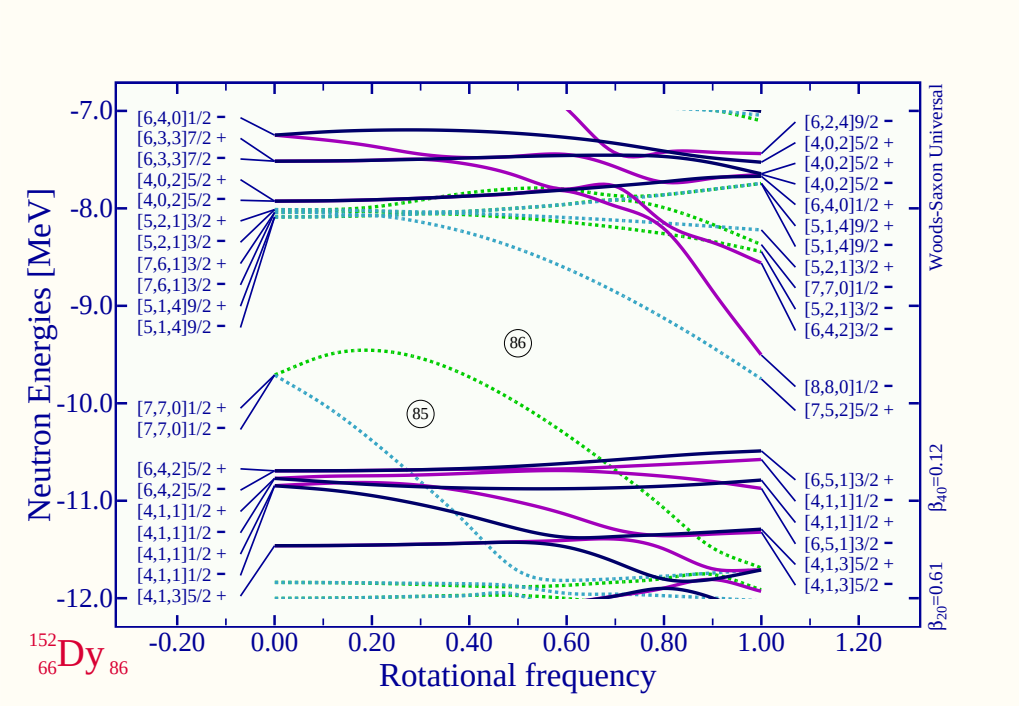


FIG. 4.4 – *Même figure que la figure 4.2 mais obtenue avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon et la paramétrisation universelle.*

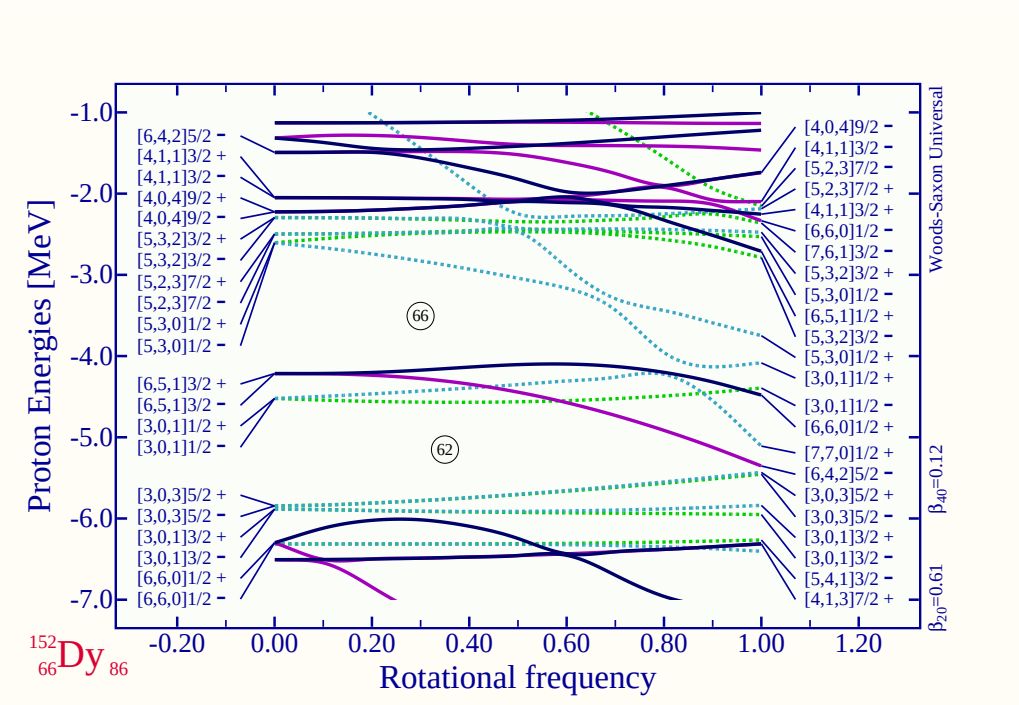


FIG. 4.5 – *Même figure que la figure 4.3 mais obtenue avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon et la paramétrisation universelle.*

4.3.2 Moment $\mathfrak{J}^{(2)}$

Le moment $\mathfrak{J}^{(2)}$ (parfois appelé moment dynamique), est l'une des quantités qui découle le plus naturellement de l'expérience. En effet, si l'on note $\Delta E_\gamma(I)$ l'écart en énergie de deux raies γ (la première passant de $I+2$ à I, la deuxième de I à $I-2$), alors le moment d'inertie dynamique peut s'écrire :

$$\mathfrak{J}^{(2)}(I) = \frac{4}{\Delta E_\gamma(I)} \tag{4.42}$$

Par ailleurs, rappelons la définition (4.29) du moment $\mathfrak{J}^{(2)}$:

$$\mathfrak{J}^{(2)} = \left(\frac{d^2E}{dI^2}\right)^{-1} = \frac{dI}{d\omega} \tag{4.43}$$

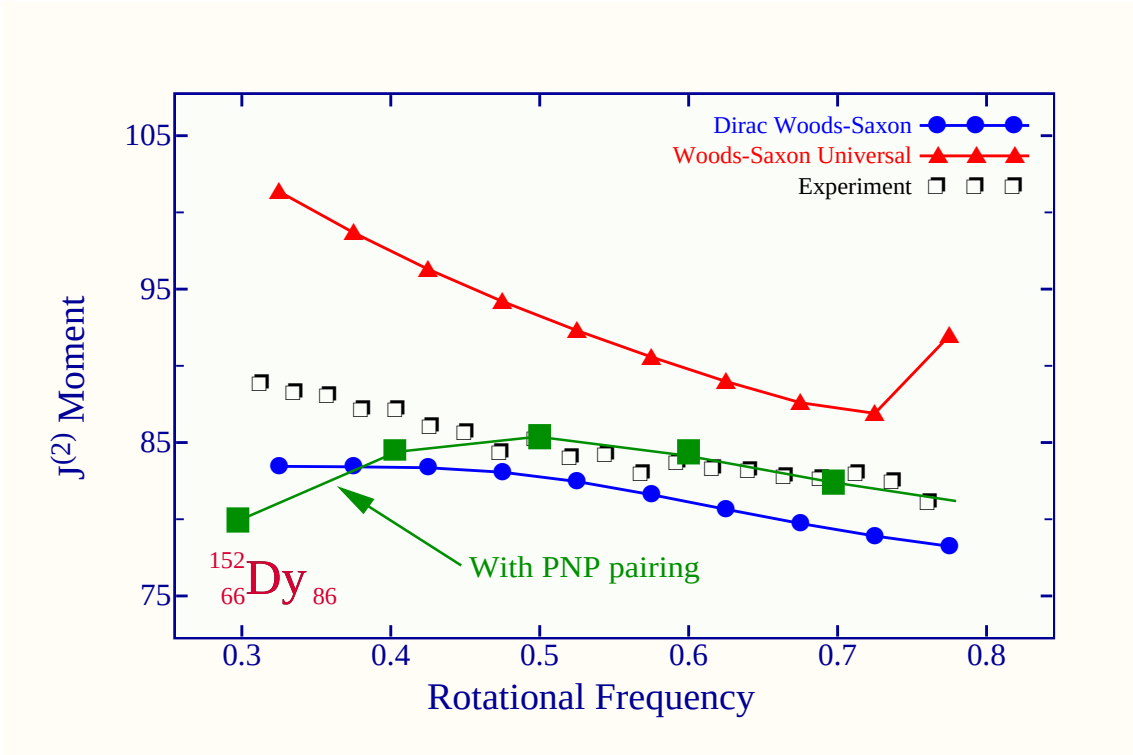


FIG. 4.6 – *Moment $\mathfrak{J}^{(2)}$ dans ^{152}Dy. La figure présente une comparaison entre le calcul de type relativiste (en bleu) et le calcul de type non-relativiste (en rouge).*

Dans le code WS-ODD, le moment d'inertie dynamique est calculé à partir de la deuxième relation :

$$\mathfrak{J}^{(2)} = \frac{dI}{d\omega} = \sum_\mu \frac{dj_\nu^\omega}{d\omega} \tag{4.44}$$

où l'on note j_ν^ω la valeur moyenne du moment angulaire total sur le routhien φ_ν^ω (voir (4.19)) :

$$j_\nu^\omega = \langle \psi_\nu^\omega | \hat{\jmath}_y | \psi_\nu^\omega \rangle \tag{4.45}$$

La figure 4.6 présente les résultats obtenus pour un hamiltonien de Woods-Saxon non relativiste (avec la paramétrisation « universelle » de [Dud78, Dud79]). La surestimation du moment $\mathfrak{J}^{(2)}$ dans l'approche Woods-Saxon non-relativiste est connue depuis longtemps, et a été récemment discutée dans [ElA00] : les auteurs présentent de plus les mêmes moments d'inertie calculés dans une théorie Hartree-Fock avec la force SKM*, et les prédictions théoriques excèdent également de 7-8% les valeurs expérimentales. C'est la raison pour laquelle il avait été proposé dans cet article d'appliquer un coefficient artificiel de réduction $f = 0.9$ sur les grandeurs calculées pour reproduire presque parfaitement l'expérience.

Cette surestimation (systématique, comme il est montré dans [ElA00]) des moments dynamique dans la région de masse $A \sim 150$ n'existe plus dans notre approche relativiste. Par ailleurs la figure indique quelle devrait être l'influence de l'appariement avec projection du nombre de particules (effet pris dans [ElA00]). Contrairement aux théories non-relativistes ou l'effet d'amplification de l'appariement dégrade encore plus la qualité des résultats, dans la théorie relativiste, l'appariement *améliore* la qualité. Les résultats pour le moment d'inertie cinématique sont encore plus spectaculaires.

4.3.3 Moment $\mathfrak{J}^{(1)}$

Le moment d'inertie cinématique est simplement défini par la relation (4.23) :

$$\mathfrak{J}^{(1)}(I) = \frac{I}{\omega(I)} \tag{4.46}$$

Dans le code WS-ODD, il a donc été calculé comme :

$$\mathfrak{J}^{(1)}(I) = \frac{I}{\omega} = \sum_\mu \frac{j_\nu^\omega}{\omega} \tag{4.47}$$

où j_ν^ω est défini par (4.45). D'un point de vue expérimental, le moment d'inertie cinématique se calcule comme :

$$\mathfrak{J}^{(1)} = \frac{2I - 1}{E_\gamma(I)} \tag{4.48}$$

où $E_\gamma(I)$ est l'énergie du rayonnement gamma pour passer du spin I au spin $I-2$. On voit sur cette dernière relation qu'il est nécessaire de connaître le spin I d'un état excité pour connaître le moment $\mathfrak{J}^{(1)}$. Comme les bandes rotationnelles connectent des états ayant une différence de spin $\Delta I = 2$, il « suffit » en fait de connaître le spin de sortie, i.e. le spin du dernier état de la bande (= le niveau le plus bas).

Dans la figure 4.7, nous avons pris le spin de sortie égal à 22 $\hbar$. Cette valeur nous a été communiquée par R. Janssens. On peut remarquer encore sur cette figure l'effet attendu de l'appariement tel qu'il est calculé dans [ElA00]. Là encore, inclure correctement les corrélations d'appariement améliore substantiellement les résultats.

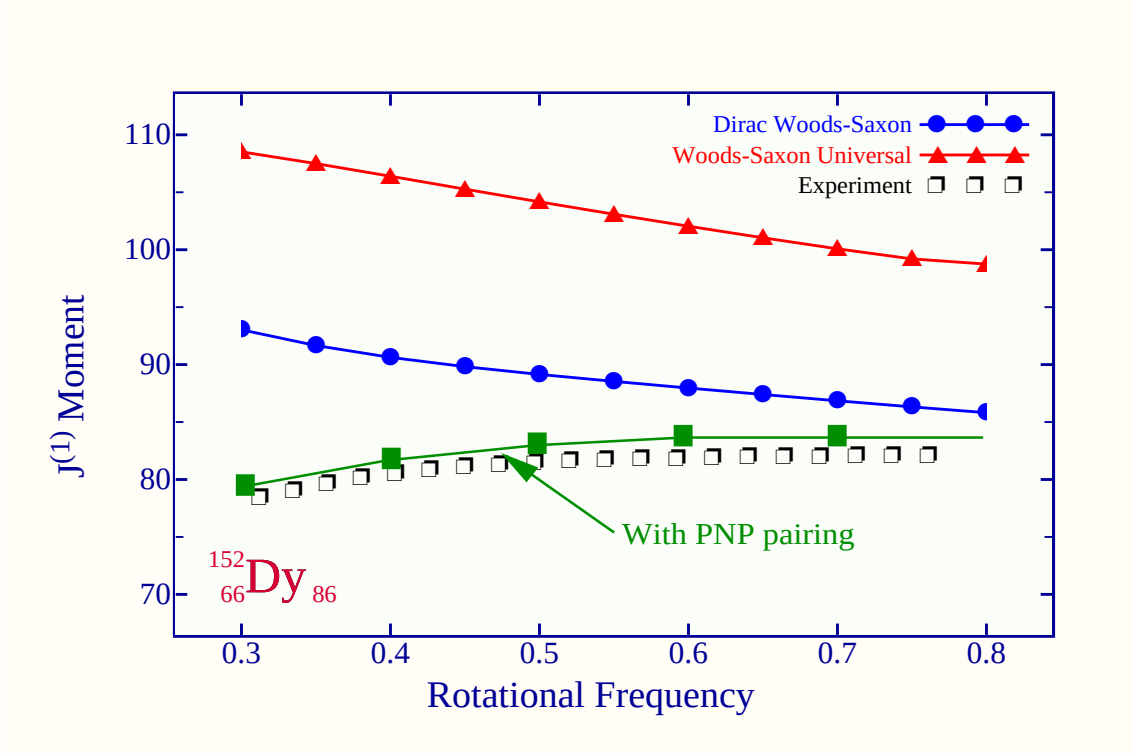


FIG. 4.7 – *Moment $\mathfrak{J}^{(1)}$ dans ^{152}Dy. La figure présente le même type de comparaison que la figure 4.6. La valeur du spin de sortie est de 22$\hbar$.*

4.3.4 Interprétation des différences relativiste/non-relativiste

Il est assez suprenant de constater que malgré des configurations nucléoniques relativement semblables, ce qui est illustré par les routhiens 4.2-4.5, les moments d'inertie $\mathfrak{J}^{(1)}$ et $\mathfrak{J}^{(2)}$ calculés dans les deux approches, relativiste avec l'hamiltonien de Dirac et non-relativiste avec la paramétrisation universelle soient si différents. Nous proposons dans les deux paragraphes suivants des explications possibles à ces différences systématiques.

a) Fonctions d'onde radiales : une analogie classique

Commençons par établir une analogie avec la physique classique. Nous avons vu, à la section c) page 106, que le moment cinématique avait comme définition :

$$\mathfrak{J}^{(1)} = \frac{I}{\omega} \tag{4.49}$$

s'inspirant en ce sens de la formule de physique classique. En mécanique des solides, justement, le moment d'inertie d'un solide en rotation autour d'un axe Δ a pour expression :

$$I_\Delta = \iiint_{surface} r^2 \mu(\vec{r})\, d^3\vec{r} \tag{4.50}$$

où r est la distance du point courant à l'axe, et $\mu(\vec{r})$ est la masse volumique au point $\vec{r}$. On voit sur cette expression que plus la matière se répartit proche de l'axe de rotation (r

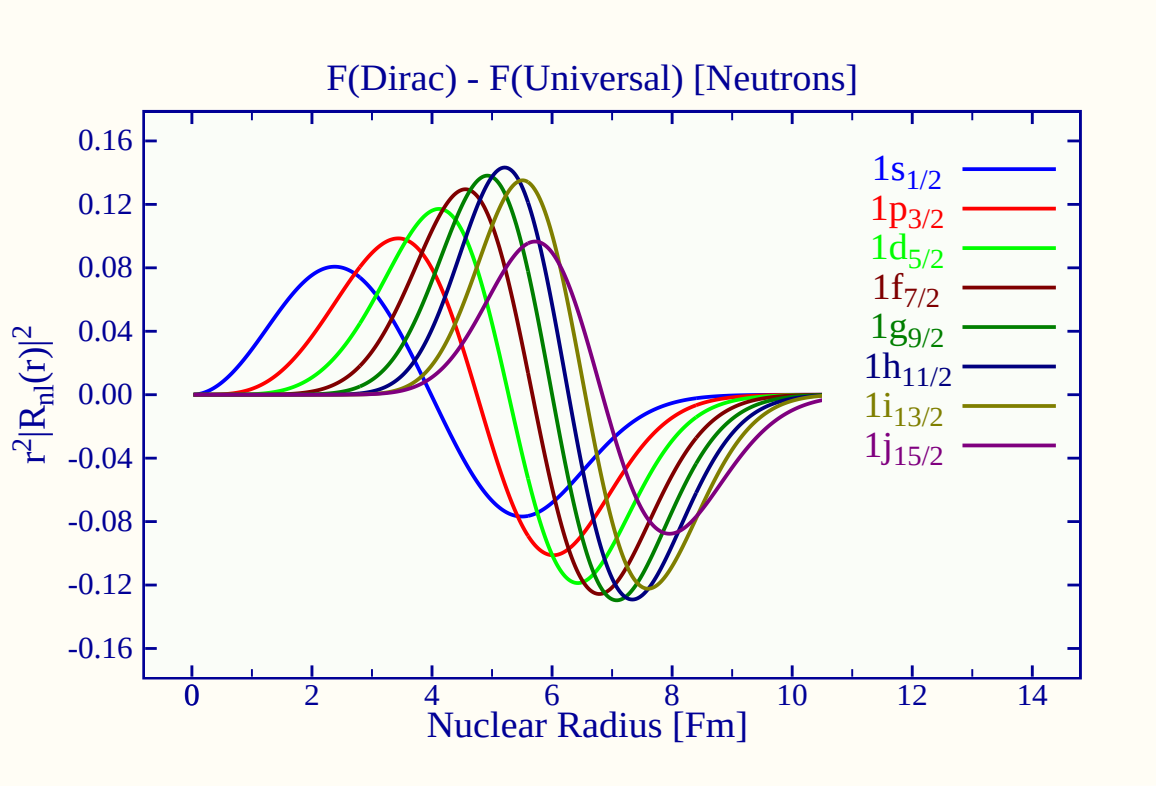


FIG. 4.8 – *Différence entre les fonctions d'onde radiales dans le cas relativiste (champ moyen de Dirac) et non relativiste (potentiel de Woods-Saxon et paramétrisation universelle) dans ^{208}Pb. Les états individuels sont ceux des neutrons.*

petit), plus le moment d'inertie sera faible.

La figure 4.8 présente la distribution de probabilité des nucléons individuels occupant les orbitales intruses dans ^{208}Pb. Le noyau ayant la symétrie sphérique, on peut décomposer la fonction d'onde en une partie purement radiale, et une partie purement angulaire qui se trouve être les harmoniques sphériques (et même les harmoniques *solides* si l'on tient compte du spin). La partie radiale donne la distribution de probabilité, i.e. la probabilité de trouver un nucléon au point r (voir l'annexe B pour des explications plus détaillées).

Plus exactement, la figure 4.8 présente la *différence* entre la distribution de probabilité calculée avec un hamiltonien de Dirac (relativiste) et celle calculée avec un hamiltonien de Woods-Saxon non relativiste. On voit que les différences sont importantes : les états individuels ont des pics de probabilité d'environ 0.5, et donc les différences relativiste/non-relativiste peuvent atteindre jusqu'à 30-35% des maxima (0.15/0.5). Une autre caractéristique remarquable de cette figure est que les amplitudes de probabilité dans le cas relativiste sont systématiquement plus grandes à l'*intérieur* du noyau, et plus faible à l'extérieur. Autrement dit, la distribution des nucléons dans le cas relativiste est plus localisée vers le centre du noyau.

Si l'on accepte l'analogie avec la physique classique, on conçoit donc aisément que, les nucléons donnant sa masse au noyau, les moments d'inertie dans le cas relativiste seront systématiquement plus faibles que dans le cas non-relativiste. Par ailleurs, cette différence

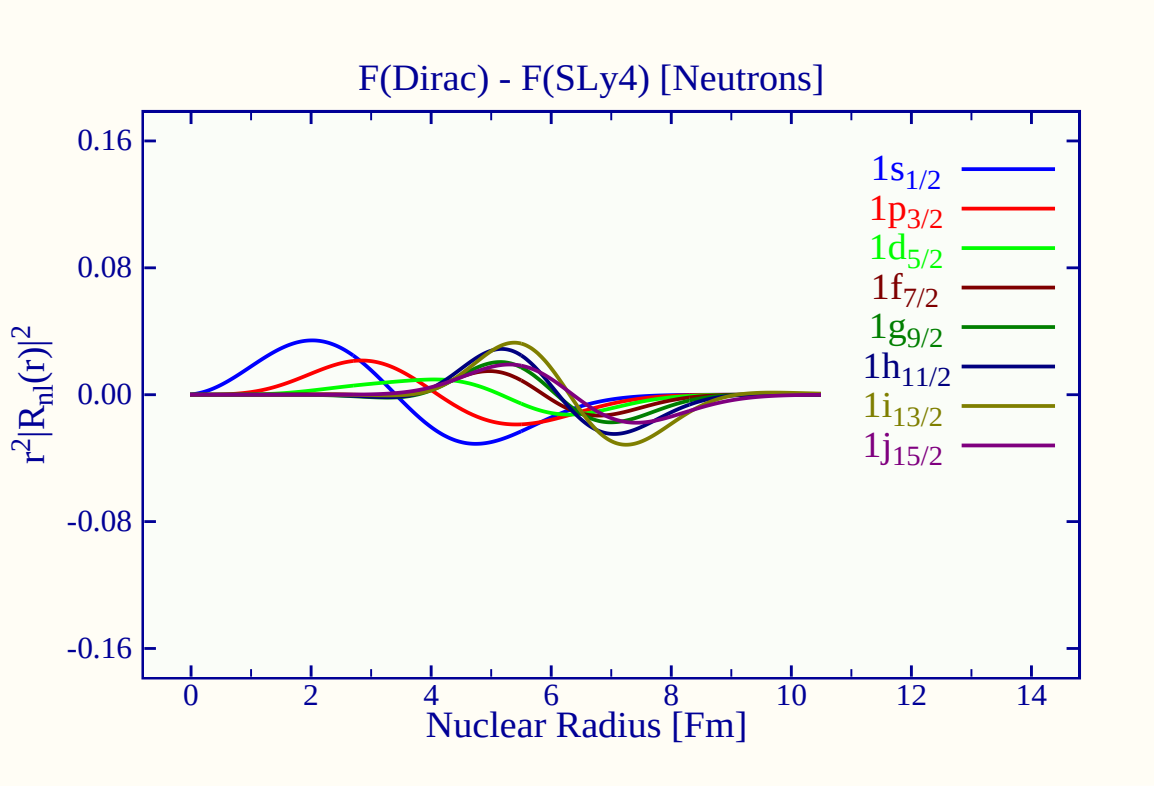


FIG. 4.9 – *Même type de figure que 4.8, mais cette fois, c'est la différence entre l'approche Dirac et l'approche Hartree-Fock avec force de Skyrme (paramétrisation SLy4) qui est illustrée.*

de distribution ne doit pas surprendre, puisque le puits de potentiel central relativiste est beaucoup plus profond que le puits non-relativiste. Les nucléons, notamment les états les plus profonds, sont plus liés que dans le cas non-relativiste, et à cause de la diffusivité du potentiel, sont donc plus près du centre du noyau.

Nous avions vu à la section 3.2.1 du chapitre 3 que les positions des états profondément liés calculées dans notre approche ou dans les théories auto-cohérentes (relativiste ou pas) étaient assez similaires, alors que le puits de potentiel central dans le modèle de Woods-Saxon non-relativiste était manifestement sous-estimé. Il nous a donc semblé intéressant d'effectuer le même type de calculs que ceux illustrés sur la figure 4.8, mais en prenant comme référence une de ces méthodes auto-cohérentes, en l'occurence l'approche Hartree-Fock avec interaction de type Skyrme et paramétrisation SLY4. Les résultats figurent sur la figure 4.9.

Pour faciliter la comparaison, remarquons que l'échelle de l'axe y est la même dans les deux cas. Par conséquent, les *structures générales des fonctions d'onde dans les cas Hartree-Fock et relativiste non auto-cohérent, notamment en termes de géométrie, sont assez semblables, mais très différentes de celles du modèle non-relativiste de Woods-Saxon* avec la paramétrisation universelle.

b) L'effet Landau-Zener : une justification quantique ?

Plutôt que de faire appel à des comparaisons avec la mécanique non-relativiste, on peut essayer de trouver une explication plus « quantique » au fait que les moments d'inertie dynamiques soient plus faibles dans le cas relativiste que dans le cas non-relativiste. Une telle explication reposerait sur la règle de non croisement de Wigner-von Neumann (appelée aussi effet Landau-Zener). Dans le cas général, cette règle est la suivante : soit un hamiltonien $\hat{h}_0$ ayant un spectre de valeurs propres e_i ; on applique une perturbation $\lambda\hat{V}$ sur cet hamiltonien. Les niveaux d'énergie individuels e_i deviennent des fonctions de λ, $e_i(\lambda)$. La règle stipule que deux niveaux ayant les mêmes symétries (i.e. les mêmes nombres quantiques, ou appartenant à la même représentation irréductible d'un groupe de symétrie donné) ne peuvent jamais se croiser lorsque la valeur de λ augmente [Lan77].

Imaginons un puits de potentiel central de 30 MeV de profondeur (comme c'est à peu près le cas pour les protons dans le modèle Woods-Saxon non-relativiste). L'hamiltonien non perturbé est l'hamiltonien de champ moyen, et la perturbation est la rotation :

$$\lambda\hat{V} = -\hbar\omega\,\hat{\jmath}_y \tag{4.51}$$

Sous l'effet de cette perturbation, les niveaux de même symétrie ne pouvant se croiser vont se repousser, ce qui explique tous les effets de courbure des routhiens en fonction de ω.

Supposons maintenant que le puits a une profondeur de 45 MeV, soit 50% de plus. Comme on étudie le même noyau, le nombre de particules est toujours le même, ainsi que la position du niveau de Fermi (au moins en première approximation). Par conséquent, la densité de niveaux dans le second cas devrait en moyenne être plus faible que dans le premier. Comme l'intensité de la répulsion de Landau-Zener entre deux niveaux est proportionnelle à l'écart énergétique entre ces niveaux, il s'ensuit que cette répulsion devrait, toujours en moyenne, être plus faible dans le cas d'un puit profond. Mais comme la courbure des niveaux en fonction de ω est également proportionnelle à l'intensité de la répulsion, cela implique que les niveaux individuels seront plus « plats ». Et puisque le moment d'inertie $\mathfrak{J}^{(1)}$ est directement proportionnel aux dérivées de ces niveaux individuels par rapport à ω, on s'attend donc à ce que le moment $\mathfrak{J}^{(1)}$ soit plus faible dans le cas d'un puits profond, donc ici dans le cas relativiste.

4.3.5 Comparaison avec la théorie RMF

Comme notre modèle s'appuie sur le formalisme de la théorie du champ moyen relativiste, il semble naturel de comparer nos résultats sur les noyaux en rotation avec ceux obtenus par la RMF (comme nous l'avons fait pour les noyaux statiques par exemple). Cette comparaison s'avère d'autant plus nécessaire que nous avons vu, au chapitre 3 combien la géométrie des différents potentiels pouvait influencer les niveaux individuels et par voie de conséquence les propriétés à haut spin. Or il se trouve que nous disposons d'une étude [Bar00] des différentes interactions effectives de la RMF où l'auteur a extrait du formalisme du champ moyen relativiste les paramètres des potentiels de Woods-Saxon « équivalents », paramètres que nous pouvons comparer avec ceux de notre hamiltonien.

Naturellement, cette comparaison entre deux modèles très différents dans leurs méthodes ne peut servir que de base de discussion, mais nous verrons nénamoins que les résultats sont très instructifs.

a) Le magnétisme nucléaire

L'un des points les plus intéressants de l'étude des noyaux en rotation vient de ce que la symétrie par renversement du temps y est brisée. Nous avons brièvement mentionné dans la première partie de cette thèse les modifications entrainées par cette brisure de symétrie sur l'équation de Dirac (équation (1.54) page 34). Rappelons ici cette expression :

$$\left\{-i\,\vec{\alpha}\cdot(\vec{\nabla}-\vec{V})+\beta(m+S)\right\}\phi_i(\vec{r},t)=\varepsilon_i\phi_i(\vec{r},t) \tag{4.52}$$

Le terme supplémentaire $-\vec{\alpha}\cdot\vec{V}$, qui ne dépend que des composantes spatiales des mésons, est appelé *magnétisme nucléaire*. Par ailleurs, les équations de propagation des mésons sont également modifiées comme il est montré au paragraphe 1.2.2 page 32, puisque des termes en ω^2 (ω étant la fréquence de rotation) doivent être pris en compte.

Initialement, pour simplifier les calculs, le terme $-\vec{\alpha}\cdot\vec{V}$ dans l'équation de Dirac et les termes en ω^2 dans les équations de Klein-gordon ont été négligés : les résultats sur les moments $\mathfrak{J}^{(1)}$ et $\mathfrak{J}^{(2)}$ obtenus dans le noyau ^{152}Dy étaient près de 25 à 30% inférieurs aux valeurs expérimentales, alors même que les configurations proton et neutron correspondaient aux configurations habituellement utilisées (même nombre d'orbitales intruses, etc.). Dans une deuxième étape, le terme de magnétisme nucléaire fut pris en compte *via* une correction semi-classique : les résultats obtenus pour le noyau de ^{152}Dy sont présentés dans [Koe91], et s'avérèrent environ 10% supérieurs aux valeurs expérimentales. Ce n'est que lorsque le terme de magnétisme nucléaire fut pris en compte de manière complètement auto-cohérente qu'un accord convenable avec l'expérience fut obtenu [Kon93, Afa96, Afa98]. La conclusion des auteurs était donc qu'*« ... il s'avère très important de prendre en compte [ce terme] pour une description correcte des courants, des moments magnétiques et des moments d'inertie. »* [Afa96]. Néanmoins, souvenons-nous que les calculs RMF faits dans les noyaux sphériques avaient produit une densité de niveaux près du niveau de Fermi beaucoup trop faible. Par conséquent, il semblait assez logique que cette trop faible densité se répercute dans les calculs à haut-spin, indépendamment de la présence ou non du magnétisme nucléaire. En d'autres termes, on peut s'interroger sur la pertinence de l'argument qui met en évidence ce mécanisme de magnétisme nucléaire (qui n'existe que dans les noyaux tournants), alors même que les résultats sur les noyaux sphériques laissaient déjà augurer les difficultés effectivement rencontrées.

b) Géométrie du potentiel Spin-orbite

Pour pouvoir comparer le plus rigoureusement possible les résultats en théorie RMF et dans notre modèle, nous avons mis à profit un article de A. Baran [Bar00]. Dans cet article, l'auteur a extrait des calculs auto-cohérents avec deux interactions effectives différentes, NL3 et NLSH, les paramètres des potentiels de Woods-Saxon équivalents. On dispose ainsi

d'une base de comparaison entre l'approche directe que nous avions choisie, et l'approche auto-cohérente. Un examen approfondi des résultats présentés dans [Bar00] a mis en lumière le fait que deux paramètres parmi les 6 que compte le modèle étaient systématiquement très différents : la diffusivité du potentiel central, beaucoup plus petite dans la théorie RMF - environ 0.6 Fm - que dans notre modèle - autour de 1.1 Fm, et le rayon du potentiel spin-orbite (qui est aussi le rayon de la masse effective), qui lui est beaucoup plus grand - 1.1 dans la RMF contre 0.8.

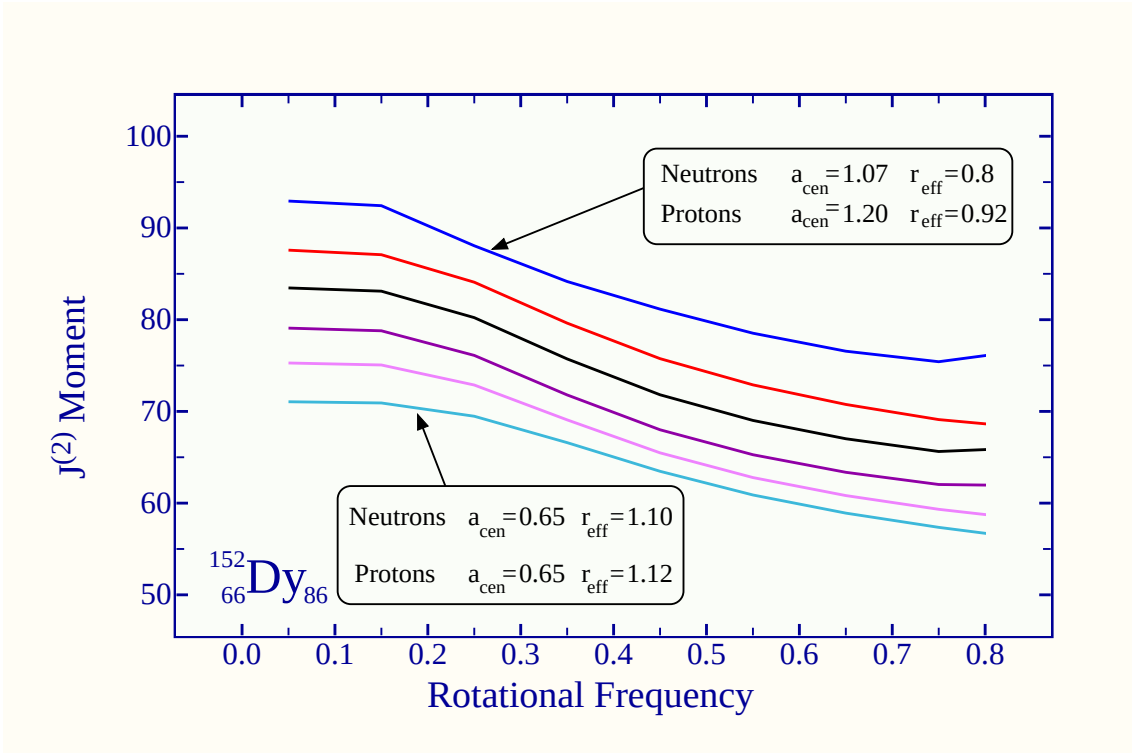


FIG. 4.10 – *Moments d'inertie $\mathfrak{J}^{(2)}$ dans ^{152}Dy obtenus pour différentes géométries des potentiels. La courbe la plus haute (en bleu) est obtenue avec des paramètres très proches de ceux que nous avons déterminés à partir des noyaux sphériques, celle du bas correspond aux paramètres de la* RMF. *En passant d'un ensemble de paramètres à l'autre, les rayons r.m.s. restent à peu près constants. L'unité de la diffusivité et du rayon est le Fermi.*

Ces différences sont très importantes, comme cela est illustré au chapitre 3, et il nous a semblé intéressant de voir quelles étaient leurs conséquences sur les moments d'inertie. La figure 4.10 présente une telle comparaison. Sur cette figure, chaque courbe correspond au moment d'inertie dynamique dans le noyau de ^{152}Dy, à chaque fois pour une paramétrisation différente des potentiels. La courbe la plus basse correspond aux paramètres issus de la théorie RMF, celle la plus haute à une paramétrisation très proche de celle que nous avons adoptée à partir des noyaux sphériques. *Les seuls paramètres* qui varient en passant d'une courbe à l'autre sont le rayon du potentiel spin-orbite r_{so} et la diffusivité du puits central a_{cen}. Cette figure doit être mise en regard avec par exemple la figure 1 dans [Afa96].

L'importance des variations des moments $\mathfrak{J}^{(2)}$ entre chacune des courbes suggère une possible influence des orbitales intruses. Par conséquent, pour vérifier que les différences

obtenues ne sont dues qu'à des raisons *géométriques* et ne sont pas un artifice dû à des configurations différentes, nous avons examiné les routhiens proton et neutron correspondant à chacune de ces configurations. Les figures des deux pages suivantes présentent les routhiens individuels protons et neutrons pour les deux cas extrêmes de la figure 4.10, c'est-à-dire pour les paramétrisations équivalentes à celle de la RMF (courbe la plus basse dans la figure 4.10), et pour notre meilleure paramétrisation avec 6 paramètres (courbe la plus haute dans la figure 4.10).

Quelques remarques :

- dans chaque figure, nous avons essayé de faire ressortir la partie du spectre située juste au-dessous du niveau de Fermi. On peut constater sur les figures que dans les deux cas (paramétrisation RMF et optimale), les configurations contiennent les mêmes orbitales intruses ([770]1/2 pour les neutrons, [651]3/2 et [660]1/2 pour les protons). Nous avons d'ailleurs vérifié que les configurations étaient les mêmes pas seulement en termes d'orbitales intruses ;
- les autres niveaux caractéristiques de cette région de masse, tels que [301]1/2 et [301]3/2 pour les protons, ou [651]1/2 pour les neutrons sont également présents ;
- les « gaps » superdéformés apparaissent presque tous ;
- la seule réelle différence entre les figures présentées dans [Kon93, Afa96] et les figures 4.11 et 4.13 est le décalage vers le haut du spectre. Il y a plusieurs raisons à cela : d'une part, pour les protons, nous n'avons pas pris exactement la profondeur du puits central égale à celle de la RMF. La raison en était que nous souhaitions conserver des rayons carrés moyens constants tout en changeant le moins de paramètres possibles. D'autre part, dans [Bar00], seules les interactions NL3 et NLSH ont été étudiées, et malheureusement, les calculs dans les noyaux supedéformés se font surtout avec l'interaction NL1. Les différences, à en juger par celles existant entre NL3 et NLSH, peuvent ne pas être négligeables. Enfin, l'étude de [Bar00] est statistique : pour un noyau présentant un isospin donné $(N-Z)/A$, il existe de fortes variations pour la valeur des paramètres et l'article ne donne pas accès aux paramètres de chaque noyau.

La conclusion à tirer de ces résultats est qu'il est possible d'obtenir de très fortes différences de comportement pour les moments $\mathfrak{J}^{(2)}$ avec des paramétrisations de l'hamiltonien de Dirac assez semblables. Cette remarque découle naturellement des différentes figures analysées au chapitre 3, où nous avions mentionné l'importante sensibilité des niveaux individuels à la géométrie des potentiels, notamment les potentiels spin-orbite et de masse effective. Mais cela a pour conséquence que la différence théorie-expérience observée dans les calculs RMF de [Afa96] pourrait très bien être due, non pas à l'absence du magnétisme nucléaire, mais à une « mauvaise » paramétrisation de l'interaction nucléon-méson.

Quant au magnétisme nucléaire, si sa présence dans l'équation de Dirac semble entièrement justifiée sur le plan théorique, il est possible qu'il soit compensé par un terme actuellement négligé dans le formalisme. Cela pourrait ainsi expliquer l'excellent accord obtenu avec notre formalisme aussi bien pour les noyaux sphériques que pour les noyaux déformés et ceux en rotation.

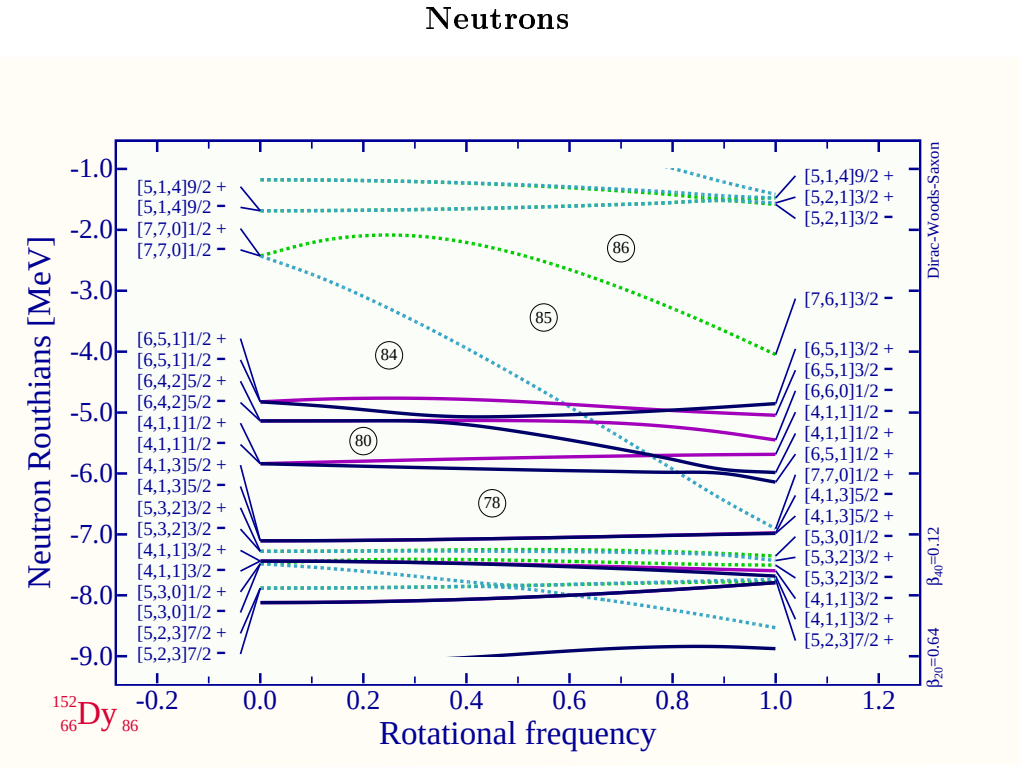


FIG. 4.11 – *Routhiens individuels neutrons dans* ^{152}Dy *- Paramètrisation équivalente à la théorie* RMF.

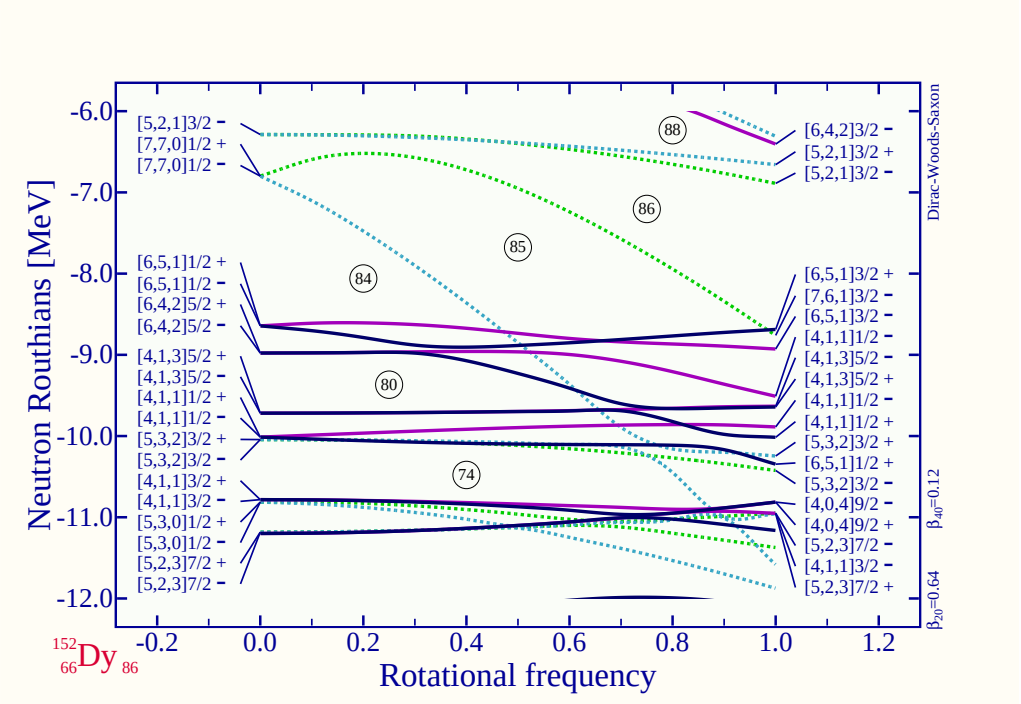


FIG. 4.12 – *Routhiens individuels neutrons dans* ^{152}Dy *- Paramètrisation optimale de l'hamiltonien de Dirac.*

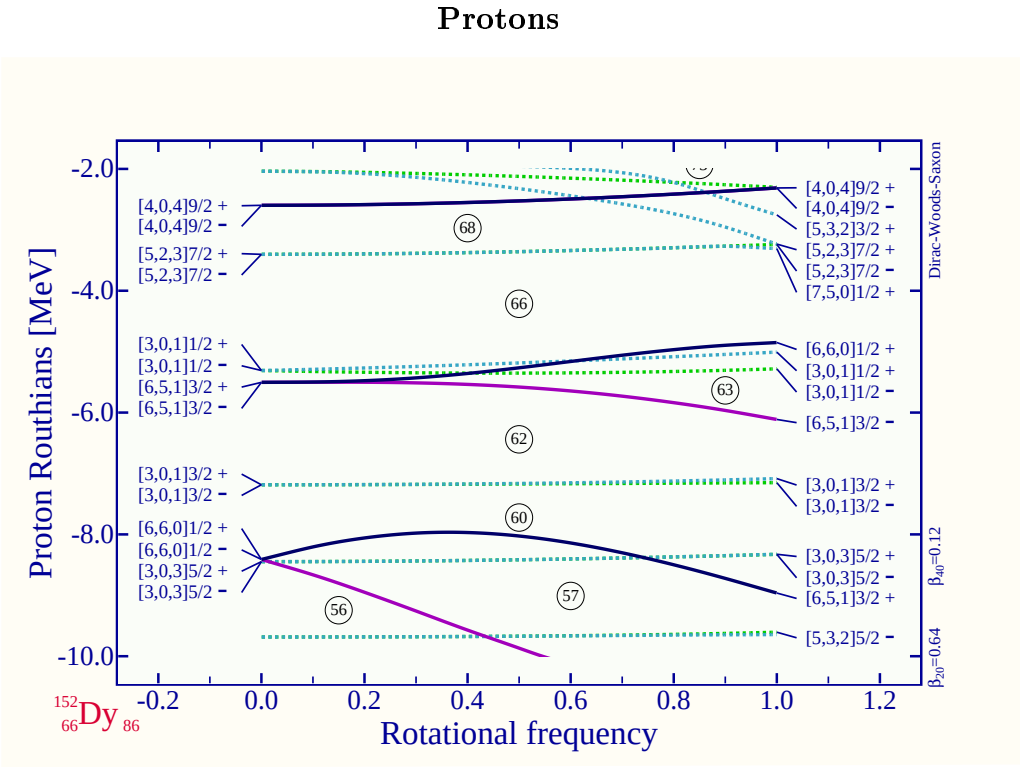


FIG. 4.13 – *Routhiens individuels protons dans* ^{152}Dy *- Paramètrisation équivalente à la théorie* RMF.

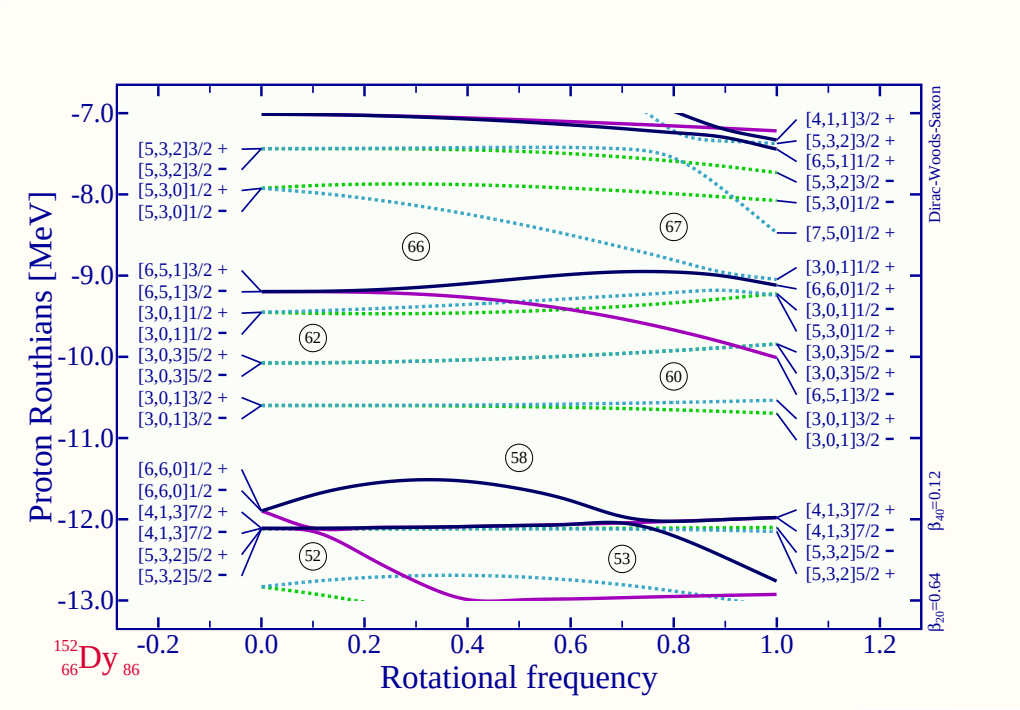


FIG. 4.14 – *Routhiens individuels protons dans* ^{152}Dy *- Paramètrisation optimale de l'hamiltonien de Dirac.*

4.4 RÉSULTATS AVEC LA MASSE EFFECTIVE INDÉPENDANTE

Nous suivons dans ce chapitre la même démarche qu'au chapitre 3, c'est-à-dire qu'après avoir validé notre méthode dans le cas cas standard, celui où l'hamiltonien comprend 6 paramètres, nous effectuons également les calculs avec une masse effective indépendante pour vérifier si l'on ne peut de cette façon améliorer encore la qualité des résultats obtenus. Dans cet esprit, nous présentons de nouveau les moments $\mathfrak{J}^{(1)}$ et $\mathfrak{J}^{(2)}$ dans le noyau de ^{152}Dy. Il faut insister sur le fait que, contrairement aux théories non-relativistes (auto-cohérentes ou pas) qui surestiment systématiquement le moment $\mathfrak{J}^{(2)}$, l'inclusion de l'appariement dans les calculs *améliorera* les résultats (voir la figure 4.16).

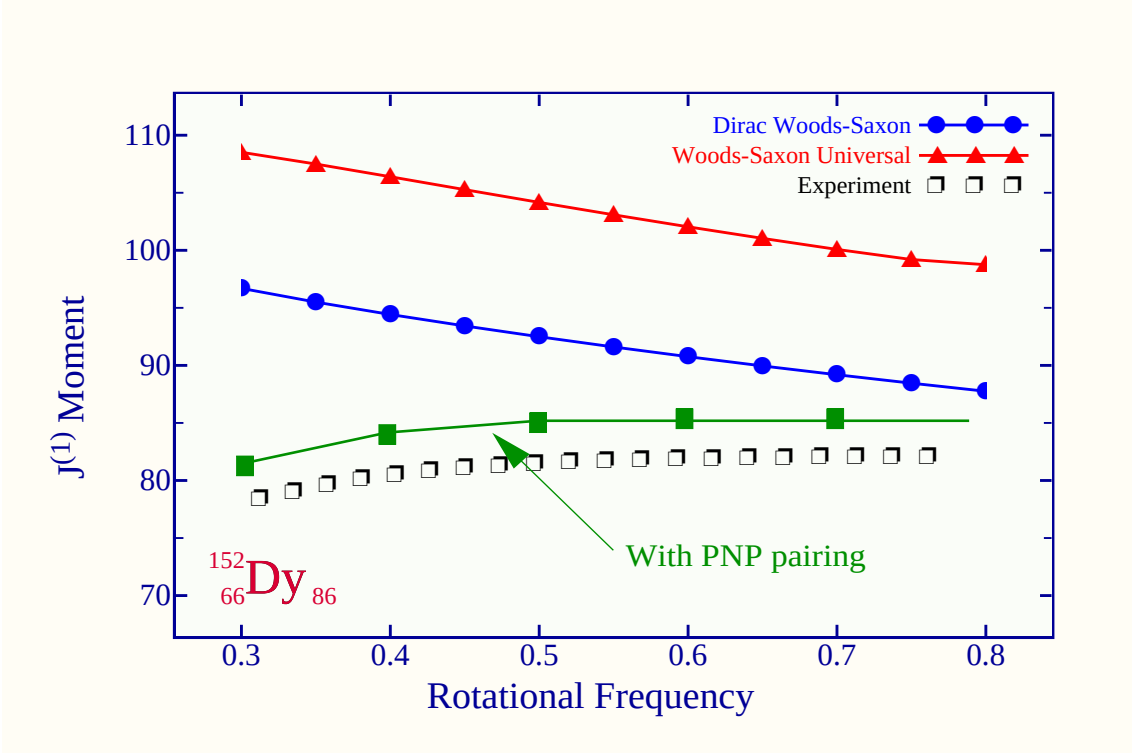


FIG. 4.15 – *Moment $\mathfrak{J}^{(1)}$ dans ^{152}Dy dans l'approximation de masse effective indépendante.*

Outre les moments $\mathfrak{J}_{(1)}$ et $\mathfrak{J}_{(2)}$, l'une des observables abondamment utilisées en physique des hauts-spins est l'alignement effectif entre deux bandes. L'alignement effectif est une observable qui a été introduite par Ragnarsson ([Rag93]) et qui permet d'étudier minutieusement les contributions des orbitales individuelles au spin total du noyau (et cela en fonction de la fréquence de rotation). En effet, on définit l'alignement effectif entre deux bandes A et B comme :

$$\boxed{i_{eff}(\omega) = I_B(\omega) - I_A(\omega)} \tag{4.53}$$

où $I_{A,B}(\omega)$ représente le spin de la bande (A ou B) à la fréquence ω. Si les deux bandes A et B correspondent par exemple aux bandes Yrast de deux noyaux différants par un nucléon seulement (un proton ou un neutron), alors la quantité i_{eff} représente le moment angulaire

total de ce nucléon. L'inconvénient de cette approche, inconvénient déjà rencontré d'ailleurs pour les études reposant sur le moment $\mathfrak{J}^{(1)}$, est qu'il est nécessaire de connaître les spins de sortie de chacune des deux bandes. Or cette quantité est difficile d'accès expérimentalement, et seuls quelques spins de sortie ont été mesurés.

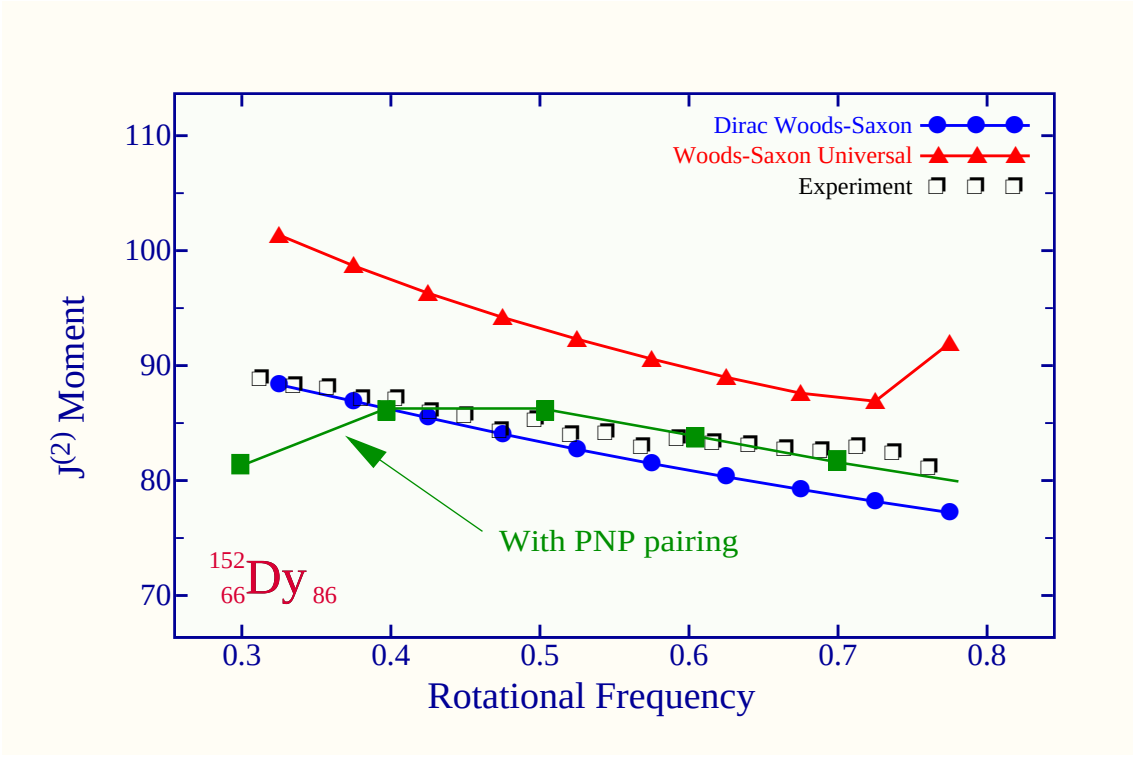


FIG. 4.16 – *Moment $\mathfrak{J}^{(1)}$ dans ^{152}Dy. La figure présente le même type de comparaison que la figure 4.15. La valeur du spin de sortie est de 22ħ.*

La figure de la page suivante représente l'alignement effectif entre les bandes Yrast de plusieurs noyaux dans la région du ^{152}Dy. Comme il a déjà été mentionné, il est nécessaire de connaître les spins de sortie pour tracer ce type de figure. Dans nos calculs, nous avons utilisé les valeurs suivantes : 22ħ pour ^{152}Dy et 30.5ħ pour ^{151}Tb, ces deux valeurs nous ayant été communiqués dans des communications privées, ainsi que 19.5ħ pour ^{151}Dy, 24ħ pour ^{150}Tb et 30ħ pour ^{150}Gd (ces valeurs correspondent aux prédictions de [Rag93]). On peut voir que, hormis l'alignement effectif entre ^{151}Tb et ^{150}Gd, les résultats sont d'une qualité tout à fait acceptable. Cela signifie donc que la structure des niveaux à une particule est problablement fidèlement reproduite dans cette région de masse. Il faut d'ailleurs remarquer que dans ces calculs ne figurent pas les corrélations d'appariement. Or il est connu [ElA00] que ces corrélations jouent un rôle important, particulièrement dans les isotopes du Gadolinium.

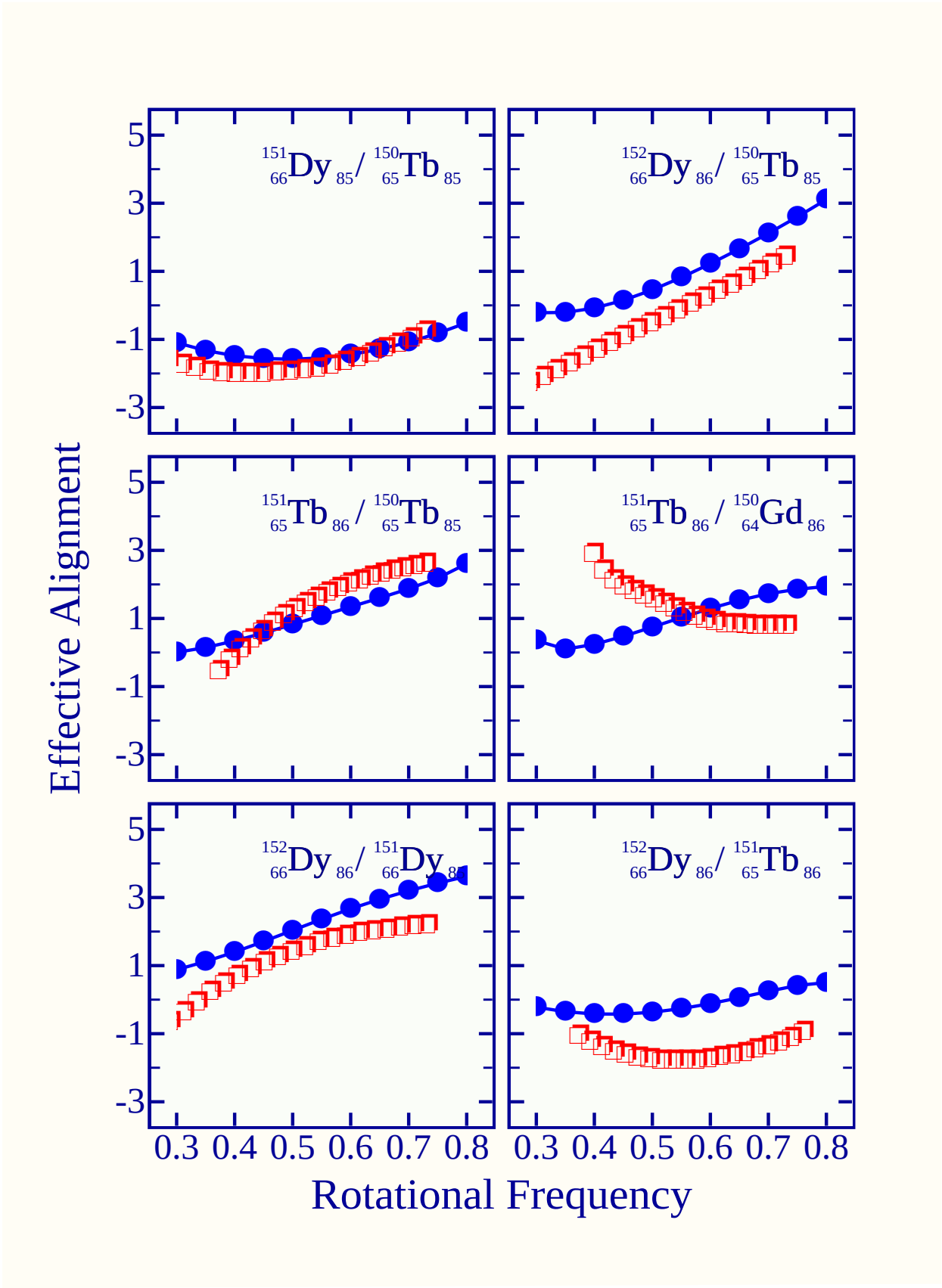


FIG. 4.17 – *Alignement effectif entre bandes Yrast dans la région de masse* $A \sim 150$.

5. Déformations d'équilibre

Nous avons abordé dans la partie précédente l'étude des bandes rotationnelles, et nous avons vu que la rotation collective des noyaux atomiques était synonyme de déformation. Les potentiels intervenant dans l'équation de Dirac, qu'on paramétrise par des fonctions de Woods-Saxon, sont naturellement sensibles à cette déformation puisqu'ils font intervenir la distance d'un point à la surface du noyau. Celle-ci s'écrit, rappelons-le :

$$R(\theta,\varphi) = r_0 A^{1/3} c(\alpha) \left\{ 1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi) \right\} \tag{5.1}$$

où $R(\theta,\varphi)$ est la valeur du rayon du noyau en un point de coordonnées sphériques (θ,φ), R_0 correspond à la valeur du rayon pour le même noyau mais avec la symétrie sphérique, $c(\alpha)$ est un facteur dépendant des paramètres de déformation $\alpha_{\lambda\mu}$ qui exprime la conservation du volume du noyau, et $Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)$ sont les harmoniques sphériques. Mais pour un noyau donné, quelles sont les valeurs des paramètres de déformation ? Dans les approches microscopiques auto-cohérentes (du type Hartree-Fock non relativiste ou RMF), la question ne se pose pas car la déformation est calculée simultanément avec les fonctions d'onde et les énergies propres[1]. Mais dans les modèles semi-empiriques, il faut spécifier la valeur de chacun des paramètres de déformation. Pour les noyaux dont la déformation ne change « pas trop » avec la rotation, on peut se contenter d'ajuster les valeurs à la main, en essayant de reproduire par exemple les moments quadrupolaires expérimentaux Q_{20}. Mais dans certains noyaux, la déformation évolue en fonction de la fréquence de rotation ω, et une telle solution est quasi-impossible à mettre en œuvre.

La solution consiste évidemment à *calculer* ces paramètres de déformation, un peu à l'instar de ce qui est fait dans les méthodes auto-cohérentes. La procédure utilisée est la méthode dite « macro+micro ». Le noyau atomique est vu comme une goutte liquide quantique, possédant une certaine énergie macroscopique E_{macro}. Mais le noyau est également constitué d'un certain nombre de nucléons, disposés sur des orbitales individuelles, et la présence des couches modifie la valeur de l'énergie totale : un noyau avec toutes ses couches pleines sera plus lié qu'un noyau similaire mais avec une couche supplémentaire à moitié pleine. A l'énergie macroscopique s'ajoute donc une correction microscopique, dite correc-

[1] **Une petite réserve : les contraintes à prendre en compte dans le modèle sont laissées au choix de l'utilisateur. Si l'on décide par exemple d'inclure des déformations quadrupolaires et hexadécapolaire, les valeurs α_{20} et α_{40} seront effectivement déterminées automatiquement. Mais dans ce cas, les autres déformations vaudront 0.**

tion de couche, E_{micro}. L'énergie totale s'écrit donc :

$$E_{total} = E_{macro} + E_{micro} \tag{5.2}$$

Dans un premier temps, nous allons brièvement rappeler comment calculer chacun des deux termes, d'énergie macroscopique et d'énergie microscopique, puis nous appliquerons cette procédure à la recherche de déformations octupolaires statiques. Quelques résultats sur les éléments super-lourds seront également présentés.

5.1 MODÈLE DE LA GOUTTE LIQUIDE

Une première approche du modèle de la goutte liquide se fait par l'intermédiaire de la formule de Bethe-Weiszäcker donnant l'énergie de liaison d'un noyau atomique :

$$B(Z,N) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_a \frac{(N-Z)^2}{A} + c \tag{5.3}$$

Le premier terme (terme de *volume*) indique que l'énergie de liaison est proportionnelle au nombre de constituants du noyau. Le deuxième terme (terme de *surface*) simule les effets de surface : les nucléons proches de la surface sont moins liés que les autres, et ce déficit se retrouve dans l'énergie totale. Le troisième terme (terme de *Coulomb*) rappelle qu'un noyau est entre autres constitué de protons, qui subissent une répulsion électromagnétique. Cette répulsion diminue d'autant l'énergie de liaison. Le quatrième terme (terme de *Wigner*, ou terme d'*asymétrie*) est une conséquence de la nature quantique de la goutte liquide : c'est une juxtaposition de deux gaz de Fermi, un pour les neutrons, un pour les protons. Pour une énergie coulombienne fixée (Z fixé), la nature tend à privilégier un nombre de neutrons N égal à Z. Le cinquième terme représente l'ensemble de toutes les corrections nécessaires pour affiner le modèle.

La formule de Bethe-Weiszäcker est particulièrement utile pour comprendre les différentes contributions à l'énergie totale du noyau, et elle donne un accord remarquable avec l'expérience, eu égard à sa simplicité. Cependant, avec le temps, des modèles plus fins ont été élaborés, qui reposent tous plus ou moins sur le même schéma (la somme des quatre termes sus-cités, plus des corrections), mais qui s'appliquent dans un cadre plus général. En effet, le modèle de Bethe-Weiszäcker n'est valable que pour des noyaux sphériques, et ne tient pas compte des effets de déformation. Par exemple, la répulsion coulombienne devient un peu plus délicate à calculer si le noyau a une géométrie un peu fantaisiste.

Dans ce modèle, l'énergie totale est la somme de plusieurs termes, qu'il n'est pas utile de donner ici : le lecteur intéressé est renvoyé à [Mol81]. L'important pour les applications pratiques est de connaître les termes qui dépendent de la déformation, et ceux qui nécessitent des calculs numériques importants. Ainsi, seuls deux termes correspondent à cette description : l'énergie de surface dépend évidemment de la forme de cette surface. Dans le cas général, elle est donnée par [Mol81] :

$$E_{surf.} = -\frac{c_s A^{2/3}}{8\pi^2 R_0^2 a^3} \int d\vec{r} \int d\vec{r}\,' \left(\frac{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}{a} - 2 \right) \frac{\exp(-|\vec{r}-\vec{r}\,'|/a)}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \tag{5.4}$$

Dans cette expression, A est le nombre de masse du noyau, $R_0 = r_0 A^{1/3}$ est le rayon standard du même noyau avec une forme sphérique et a est la diffusivité de Yukawa qui vaut environ : $a = 0.68$. Cette forme en $e^{-r/a}/r$ permet de tenir compte dans le terme de surface de la portée finie de l'interaction nucléon-nucléon (dans le modèle de Yukawa originel, via l'échange de méson π).

Le calcul de (5.4) nécessite une intégration sur 6 variables. Le théorème de Gauss permet de réduire le nombre de variables d'intégration de 6 à 4 (ce qui d'un point de vue numérique accélère considérablement le calcul) :

$$E_{surf.} = -\frac{c_s A^{2/3}}{8\pi^2 R_0^2} \oint\oint \left\{ 2 - \left[\left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}{a} \right)^2 + 2\frac{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}{a} + 2 \right] \exp(-|\vec{r} - \vec{r}\,'|/a) \right\} \times \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|^4} [(\vec{r} - \vec{r}\,') \cdot d\vec{S}][(\vec{r} - \vec{r}\,') \cdot d\vec{S}\,'] \quad (5.5)$$

Notons également que pour des noyaux à symétrie axiale, le nombre de variables d'intégration peut encore être réduit de quatre à trois.

L'énergie de Coulomb fait également intervenir la géométrie du noyau. Elle est constituée d'un terme direct, qui est l'intégrale de la distribution de charge sur le noyau, et d'un terme correctif dû au fait que la surface du noyau n'est pas franchement délimitée, mais possède une certaine extension spatiale. La somme de ces deux termes s'écrit :

$$E_{Coul.} = \frac{1}{2} \left(\frac{3Ze}{4\pi R_0^3} \right)^2 \left\{ \iint \frac{d\vec{r} d\vec{r}\,'}{|\vec{r} - \vec{r'}|} - \iint \left(1 + \frac{|\vec{r} - \vec{r'}|}{2a_{den}} \right) \frac{\exp(-|\vec{r} - \vec{r'}|/a_{den})}{|\vec{r} - \vec{r'}|} d\vec{r} d\vec{r}\,' \right\} \quad (5.6)$$

Dans cette expression, le paramètre a_{den} est pris égal à $0.99/\sqrt{2}$.

Dans l'expression générale de l'énergie macroscopique, seuls les deux termes, de surface (5.4) et de Coulomb (5.6), dépendent de la géométrie du noyau.

5.2 CORRECTIONS DE COUCHE - PROCÉDURE DE STRUTINSKY

La formule originelle de Bethe-Weiszäcker et ses améliorations successives ne tiennent pas compte de la structure en couche des nucléons dans le noyau. Pour pallier cette lacune, Strutinsky a proposé une méthode qui consiste essentiellement à séparer en deux termes distincts l'énergie totale, l'un reproduisant l'énergie dite macroscopique qui, comme son nom l'indique tient compte des propriétés globales du noyau dans son ensemble, l'autre, appelée énergie microscopique, qui provient de la structure en couches des orbitales individuelles. Après avoir fait quelques brefs rappels sur l'énergie macroscopique dans la section précédente, nous présentons ici la méthode de Strutinsky. Le lecteur est renvoyé aux ouvrages [Bol72, Bra72, Rin80] et aux thèses de [Bou96, Men86] pour plus de détails.

5.2.1 Justification de la méthode

Le modèle de la goutte liquide permet de reproduire les données expérimentales qui ne dépendent pas trop du nombre de nucléons du noyau, comme par exemple la dépendance en A de l'énergie de liaison. *A contrario*, il s'avère nettement insuffisant pour toutes les applications qui dépendent de façon critique du nombre de particules. Or il est connu que les nucléons dans le noyau se répartissent dans des orbitales qui forment une structure en couches, et cette structure en couche a une influence considérable sur bon nombre de propriétés des noyaux. La méthode de Strutinsky est une « correction » à apporter à la valeur de l'énergie de liaison déterminée par le modèle de la goutte liquide, et cette correction tient précisément compte des effets de couche. Il faut souligner que c'est cette « correction » qui contient la plus grande part de la dynamique du système

Dans le cadre du modèle en couches, on dispose de la séquence des états à une particule $\{e_k\}$. La somme de ces énergies jusqu'au niveau de Fermi définit l'énergie totale du noyau *dans ce modèle*. On peut décomposer cette énergie en une partie moyenne (qui varie lentement en fonction du nombre de particules) et une partie oscillante (qui *a contrario* varie fortement en fonction du nombre de particules) :

$$E_{shell} = \tilde{E}_{shell} + E_{oscil.} \tag{5.7}$$

Les corrections de couches sont représentées par la partie $E_{oscil.}$, la partie $\tilde{E}_{shell}$ représentant une contribution moyenne. Par ailleurs, puisque E_{shell} est simplement la somme de toutes les énergies individuelles jusqu'au niveau de Fermi, on a simplement :

$$\boxed{E_{oscil.} = \sum_{k=1}^{\lambda_F} e_k - \tilde{E}_{shell}} \tag{5.8}$$

et le problème revient en fait à déterminer la valeur moyenne $\tilde{E}_{shell}$.

5.2.2 Cas des noyaux statiques

a) Expression de l'énergie lissée

Pour résoudre ce problème (la détermination de l'énergie « lissée » $\tilde{E}_{shell}$), il est préférable de passer à une représentation des énergies en termes de densité de niveaux. On définit ainsi la densité de niveaux $g(e)$ telle que $g(e)de$ représente le nombre de niveaux compris entre e et $e+de$ (e étant ici une variable continue). Quel que soit le spectre réellement calculé e_k, la densité de niveau peut toujours s'écrire :

$$g(e) = \sum_{k=1}^{+\infty} \delta(e - e_k) \tag{5.9}$$

où $\delta(x)$ est la distribution de Dirac. Toute l'idée de la procédure consiste à remplacer la distribution (5.9) par une fonction régulière et relativement « douce » de l'énergie. Ainsi,

on cherche une densité de niveaux « lissée » $\tilde{g}(e)$ telle que :

$$\tilde{g}(e) = \sum_{k=1}^{+\infty} S(e - e_k) \tag{5.10}$$

où S est une fonction qui reste à déterminer. Supposons pour l'instant que cette fonction soit connue. Dans ce cas, on pourra écrire :

$$g(e) = \tilde{g}(e) + \delta g(e) \tag{5.11}$$

L'énergie de la partie lissée sera alors :

$$\boxed{\tilde{E}_{shell} = \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}_F} e\, \tilde{g}(e) de} \tag{5.12}$$

où $\tilde{\lambda}$ représente le niveau de Fermi « lissé », c'est-à-dire le niveau de Fermi correspondant à la densité de niveaux $\tilde{g}(e)$. Il s'écrit donc :

$$Z \text{ (ou } N) = \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}_F} \tilde{g}(e) de \tag{5.13}$$

Par conséquent, si nous parvenons à trouver une fonction S qui satisfasse à (5.10), nous pourrons, au moins en principe, calculer l'énergie lissée (5.12).

b) Détermination de la fonction de lissage

Revenons maintenant à la forme de cette fonction $\tilde{g}(e)$. Pour cela, exprimons la relation (5.9) en utilisant la décomposition de la distribution de Dirac en fonction des polynômes d'Hermite :

$$\delta(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \sum_{n=0}^{+\infty} c_n H_n(x) \tag{5.14}$$

Cette série peut être simplifiée un peu plus en utilisant les propriétés des polynômes d'Hermite, mais cela n'a pas un intérêt immédiat. Introduisons plutôt la nouvelle variable :

$$u_k = \frac{e - e_k}{\gamma} \tag{5.15}$$

où γ est un paramètre dont nous discuterons la valeur un peu plus loin. Dans ce cas, on a :

$$\delta(e - e_k) = \delta(\gamma u_k) = \frac{1}{\gamma} \delta(u_k)$$

Et la relation (5.9) se réécrit donc :

$$g(e) = \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{\gamma \sqrt{\pi}} e^{-u_k^2} \sum_{m=0}^{+\infty} c_m H_m(u_k) \tag{5.16}$$

Dans la série des polynômes d'Hermite, séparons les polynômes d'ordre élevé $m > p$ où p est un entier, des premiers polynômes. On sait que l'ordre n d'un polynôme d'Hermite est plus ou moins relié au nombre d'oscillations de ce polynôme. Les fonctions $H_{m>p}(x)$ sont donc fortement oscillantes si p est assez élevé. Au contraire, les premiers polynômes d'Hermite sont peu oscillants. On peut donc qualitativement s'attendre à ce que la fonction $\tilde{g}(e)$ soit représentée par la somme de quelques-uns des premiers polynômes d'Hermite, tandis que $\delta g(e)$ sera représenté par le reste de la série (5.16) :

$$\tilde{g}(e) = \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} e^{-u_k^2} \sum_{m=0}^{p} c_m H_m(u_k) \tag{5.17}$$

$$\delta g(e) = \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} e^{-u_k^2} \sum_{m=p+1}^{+\infty} c_m H_m(u_k) \tag{5.18}$$

Réécrivons l'équation (5.17) en introduisant la fonction $S(x)$ définie par :

$$\boxed{S(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \sum_{m=0}^{p} c_m H_m(x)} \tag{5.19}$$

Il vient :

$$\tilde{g}(e) = \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{\gamma} S\left(\frac{e - e_k}{\gamma}\right) = \sum_{k=1}^{+\infty} S(e - e_k) \tag{5.20}$$

La preuve de la dernière égalité s'obtient aisément en considérant les propriétés de la distribution de Dirac. On a donc bien déterminé la fonction S que l'on cherchait, cf. equation (5.10). Par ailleurs, on peut réécrire une nouvelle fois la dernière relation :

$$\begin{aligned}
\tilde{g}(e) &= \sum_{k=1}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(e - e_k) S(e) de \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\sum_{k=1}^{+\infty} \delta(e - e_k) \right] S(e) de \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} g(e) S(e) de
\end{aligned}$$

On arrive donc au résultat :

$$\boxed{\tilde{g}(e) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(e) S(e) de} \tag{5.21}$$

Cette dernière relation est importante sur le plan théorique car elle permet d'étendre le concept de « lissage » à des grandeurs autres que l'énergie. On peut par exemple définir une densité de spin, et calculer de la même façon sa valeur lissée sur les orbitales individuelles.

La résolution des équations (5.13), pour déterminer le niveau de Fermi, et de (5.12) pour calculer l'énergie totale moyenne permettent de déterminer la correction de couches

de Strutinsky E_{oscil} donnée par (5.8). Nous avons vu que la procédure faisait intervenir deux paramètres libres, γ et p. La valeur de γ doit être de l'ordre de la taille d'une couche énergétique. Pour :

$$\gamma = 1.2\ \hbar\omega \quad \text{avec} \quad \hbar\omega \sim 41 A^{-1/3}\ \text{MeV} \tag{5.22}$$

les résultats restent stables (condition de « plateau » : une petite modification de ces constantes ne modifie pas trop le résultat). De même, la stabilité est atteinte pour $p = 6$. Les calculs que nous présenterons seront faits avec ces deux valeurs.

c) Implémentation de la procédure

Cette section présente un résumé de la méthode utilisée pour calculer les corrections de couche de Strutinsky dans le cas statique.

1. On commence par calculer la fonction $\tilde{g}(e)$ selon la formule (5.17) :

$$\tilde{g}(e) = \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} e^{-u_k^2} \sum_{m=0}^{p} c_m H_m(u_k) \tag{5.23}$$

   expression dans laquelle :

$$u_k = \frac{e - e_k}{\gamma}$$

2. On calcule ensuite la fonction :

$$f(\tilde{\lambda}) = N - \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} \tilde{g}(e) de \tag{5.24}$$

   où N est le nombre de particules dans le système (Z dans le cas des protons). On peut montrer que la fonction f (5.24) avec l'expression (5.23) s'écrit en fait [Abr64] :

$$f(\tilde{\lambda}) = N - \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{2}\left[1 + \mathrm{erf}(\tilde{u}_k)\right] + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{+\infty} e^{-\tilde{u}_k^2} \sum_{m=2}^{p} c_m H_m(\tilde{u}_k) \tag{5.25}$$

   avec :

$$\tilde{u}_k = \frac{\tilde{\lambda} - e_k}{\gamma}$$

3. La solution de l'équation : $f(x) = 0$ donne le niveau de Fermi de la distribution lissée, $\tilde{\lambda}$, par construction de la fonction f.
4. Une fois connu $\tilde{\lambda}$, on peut calculer l'énergie lissée (5.12) :

$$\tilde{E}_{shell} = \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}_F} e\, \tilde{g}(e) de \tag{5.26}$$

Là encore, les propriétés des polynômes d'Hermite font que l'expression (5.26) a une expression analytique, un peu compliquée [Abr64] :

$$\tilde{E}_{shell} = \sum_{k=0}^{+\infty} \left\{ \frac{1}{2} e_k \left[1 + \mathrm{erf}(\tilde{u}_k)\right] - \frac{\gamma}{2\sqrt{\pi}} e^{-\tilde{u}_k^2} \right. \\ \left. - \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\tilde{u}_k^2} \sum_{m=2}^{p} c_m \left[\frac{1}{2} \gamma H_m(\tilde{u}_k) + e_k H_{m-1}(\tilde{u}_k) + m\gamma H_{m-2}(\tilde{u}_k) \right] \right\} \quad (5.27)$$

où la quantité u_k a la même expression qu'au point numéro 2.

5.2.3 Comment inclure l'appariement ?

a) Présentation de la méthode

L'une des contributions importantes à l'énergie de couche provient des corrélations d'appariement. La méthode que l'on va maintenant exposer brièvement est développée dans [Bol72] et [Bra72]. Elle repose sur une interaction d'appariement de type BCS monopolaire.

Commençons par définir ce que l'on appelera l'énergie des *corrélations d'appariement*. Il s'agit en fait simplement de la différence entre l'énergie du noyau dans l'état BCS et celle que le même noyau aurait en l'absence d'appariement :

$$P = E_{BCS} - E_0 = E_{BCS} - \sum_{k=1}^{n_F} e_k \quad (5.28)$$

où $n_F = Z$ ou N et les $\{e_k\}$ sont les énergies individuelles. Cette corrélation d'appariement peut, comme toute autre observable, s'écrire comme la somme d'une partie régulière $\tilde{P}$, qui ne varie pas beaucoup avec la déformation, et d'une partie oscillante P_{oscil} qui elle varie fortement. La contribution régulière aux corrélations d'appariement est supposée être déjà incluse dans l'expression de l'énergie macroscopique, et il ne nous reste donc plus qu'à calculer le terme P_{oscil}, selon une méthode de correction de couches très similaire à celle présentée au paragraphe précédent.

Pour déterminer la partie oscillante, on part de l'équation BCS (D.24) page 207 : c'est l'équation de gap dans le cas d'un appariement monopolaire caractérisé par une constante G (et dans lequel on a négligé le terme en v^2) :

$$\sum_{\alpha=n_F-n_c}^{n_F+n_c} \frac{1}{\sqrt{(e_\alpha - \lambda)^2 + \Delta^2}} = \frac{2}{G} \quad (5.29)$$

Dans cette équation, la sommation va de $n_F - n_c$ à $n_F + n_c$ où n_F correspond au niveau de Fermi, et n_c est le nombre de paires. La relation (5.29) correspond à un spectre discret en énergie. Pour une distribution continue, elle devient approximativement :

$$\frac{2}{G} = \int_{\tilde{\lambda}-\Omega}^{\tilde{\lambda}+\Omega} \frac{\tilde{g}(e)de}{\sqrt{(e-\tilde{\lambda})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \quad (5.30)$$

L'énergie de coupure Ω est reliée au nombre de paires n_c *via* :

$$2\Omega = 2\frac{n_c}{\tilde{g}(\tilde{\lambda})} \tag{5.31}$$

La densité moyenne de paires est donnée par :

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{2}\tilde{g}(\tilde{\lambda}) \tag{5.32}$$

On peut montrer (voir par exemple [Bol72], ou bien [Bra72]) que l'équation de gap, pour une distribution de niveaux uniforme, s'écrit :

$$\frac{1}{G} = \tilde{\rho}\,\ln\left\{\frac{n_c}{2\tilde{\rho}\tilde{\Delta}} + \sqrt{\left(1+\frac{n_c}{2\tilde{\rho}\tilde{\Delta}}\right)^2}\right\} \tag{5.33}$$

Dans ce cas, on démontre que la partie régulière de la corrélation d'appariement[2], $\tilde{P}$ s'écrit :

$$\boxed{\tilde{P} = -\frac{1}{4}\frac{n_c^2}{\tilde{\rho}}\left\{\sqrt{\left(1+\frac{2\tilde{\rho}\tilde{\Delta}}{n_c}\right)^2} - 1\right\} + \frac{1}{2}\tilde{\rho}\tilde{\Delta}G\tan^{-1}\left(\frac{n_c}{2\tilde{\rho}\tilde{\Delta}}\right)} \tag{5.34}$$

A partir de cette expression, on peut en déduire facilement la *correction* sur la corrélation d'appariement (le terme P_{oscil}).

b) Implémentation de la procédure

La mise en œuvre de la correction sur les corrélations d'appariement est en fait plus « simple » que celle de la correction de couche. En effet :

1. on commence par calculer l'énergie totale du noyau avec appariement dans le cadre de la théorie BCS (relation (D.15) page 205) ;
2. on calcule ensuite la corrélation d'appariement totale (5.28) :

$$P = E_{BCS} - E_0 = E_{BCS} - \sum_{k=1}^{n_F} e_k$$

3. de cette corrélation d'appariement totale, on soustrait la partie régulière $\tilde{P}$ donnée par la relation (5.34) : le résultat est la correction sur la corrélation d'appariement.

[2]**Il s'agit ici de la partie régulière telle que calculée à partir des énergies individuelles. Cette partie régulière-ci ne nous intéresse pas, puisque nous utilisons à la place le terme ajusté sur l'expérience présent dans l'énergie macroscopique. Seule la partie oscillante nous intéresse ici.**

5.2.4 Cas des noyaux en rotation

a) Principe de la méthode

Dans le cas des noyaux en rotation, le système présent un degré de liberté supplémentaire, la fréquence de rotation ω. Ici, on supposera que la rotation se fait autour de l'axe $\mathcal{O}y$, de sorte que $\omega \equiv \omega_y$. Si I ($\equiv I_y$) est le moment angulaire total du noyau, la relation entre l'énergie totale dans le référentiel du laboratoire E et celle dans le référentiel tournant lié au noyau R (i.e. le routhien total) est :

$$E = R + \omega I \tag{5.35}$$

C'est en fait la relation (4.19). Notons que la fréquence de rotation dépend du spin I selon la relation (4.22) :

$$\omega(I) = \frac{dE}{dI} \tag{5.36}$$

Plaçons-nous dans le référentiel tournant lié au noyau. L'énergie totale dans ce référentiel, c'est-à-dire le routhien total, s'écrit naturellement, par analogie avec la relation (5.7) :

$$\boxed{R^{\omega}_{total} = R^{\omega}_{macro} + R^{\omega}_{oscil}} \tag{5.37}$$

où l'exposant ω rappelle que nous sommes dans un référentiel tournant à la vitesse ω par rapport au référentiel du laboratoire. Nous reviendrons dans la section suivante sur la méthode de calcul de $R^{\omega}_{oscil.}$ (qui diffère un peu de celle présentée à la section précédente), mais avant tout, donnons la procédure de calcul de l'énergie totale en fonction du spin (= du moment angulaire total du noyau) :

1. on calcule d'abord les routhiens individuels et les valeurs moyennes du moment angulaire pour une certaine séquence de valeurs de ω. A partir des routhiens individuels, on peut calculer l'énergie totale dans le référentiel tournant selon la formule générale (5.37).
2. pour chaque ω de cette séquence, on calcule la valeur moyenne du moment angulaire total en faisant la somme des moments angulaires individuels jusqu'au niveau de Fermi. Ce faisant, on obtient une séquence de valeurs pour le spin I, et donc on dispose de la correspondance $\omega \rightarrow I$ (ainsi que de $I \rightarrow \omega$).
3. la fréquence de rotation n'étant pas une observable, il nous faut passer à une représentation en terme de spin. Suivant que le nombre de masse du noyau étudié est pair ou impair, il nous faut des valeurs entières ou demi-entières du spin. Comme rien ne garantit que la correspondance $\omega \leftrightarrow I$ produise une telle séquence particulière pour I, on utilise une procédure d'interpolation.
4. grâce à cette procédure d'interpolation, on peut alors calculer l'énergie totale *à spin fixé* selon la relation (5.35) :

$$E_{total}(I) = R^{\omega(I)}_{total} + \omega(I) I \tag{5.38}$$

Cette procédure peut sembler un peu compliquée, mais c'est en réalité la seule possible : si l'on décidait de se placer dès le départ à spin I donné, il faudrait être capable de déduire la fréquence de rotation ω telle que :

$$\sum_n \langle \varphi_n^\omega | \hat{j}_y | \varphi_n^\omega \rangle = I$$

ce qui est concrètement très difficile. Les inconvénients (traditionnels) de cette approche viennent de ce que seul le spin est une observable, alors que la fréquence de rotation, qui n'en est pas une, se prête beaucoup mieux aux calculs.

b) Calcul des différents termes

Maintenant que nous avons présenté la méthode générale de calcul de l'énergie totale dans le cas des noyaux tournants, nous pouvons nous concentrer sur l'expression de chacun des termes intervenants, E_{macro} et E_{shell}.

L'énergie *macroscopique* totale d'une goutte liquide en rotation à la fréquence ω est simplement :

$$E^\omega_{macro} = E^{\omega=0}_{macro} + \frac{1}{2}\Im_{macro}\,\omega^2 \tag{5.39}$$

Cette quantité est exprimée dans le référentiel du *laboratoire*. On peut l'exprimer également dans le référentiel tournant lié au noyau, grâce à la relation canonique (5.35) :

$$\boxed{R^\omega_{macro} = R^{\omega=0}_{macro} - \frac{1}{2}\Im_{macro}\,\omega^2} \tag{5.40}$$

où il a été tenu compte du fait que, pour la goutte liquide :

$$I(\omega) = \omega \Im_{macro} \tag{5.41}$$

Dans le référentiel *tournant* lié au noyau, la correction de couche pour les états de la ligne Yrast s'écrit, par analogie avec (5.8) :

$$R^\omega_{shell} = \sum_{n=1}^{\lambda_F} e^\omega_n - \tilde{R}^\omega_{shell} \tag{5.42}$$

où les e^ω_n sont les routhiens individuels (dépendant de la fréquence de rotation naturellement), et $\tilde{R}^\omega_{shell}$ est un « routhien total lissé ». Par un jeu d'écriture, on peut réécrire (5.42) :

$$\begin{aligned}
R^\omega_{shell} &= \sum_{n=1}^{\lambda_F} e^\omega_n - \tilde{R}^\omega_{shell} \\
&= \left\{ \sum_{n=1}^{\lambda_F} e^{\omega=0}_n - \tilde{R}^{\omega=0}_{shell} \right\} + \left\{ \tilde{R}^{\omega=0}_{shell} - \tilde{R}^\omega_{shell} \right\} + \left\{ \sum_{n=1}^{\lambda_F} (e^\omega_n - e^{\omega=0}_n) \right\} \\
&= R^{\omega=0}_{shell} + \left\{ \tilde{R}^{\omega=0}_{shell} - \tilde{R}^\omega_{shell} \right\} + \left\{ \sum_{n=1}^{\lambda_F} (e^\omega_n - e^{\omega=0}_n) \right\}
\end{aligned}$$

Or on peut montrer que le deuxième de ces termes, pour un potentiel de type Woods-Saxon ou « Folded-Yukawa », se ramène à :

$$\tilde{R}^{\omega=0}_{shell} - \tilde{R}^{\omega}_{shell} = -\frac{1}{2}\Im_{macro}\,\omega^2 \tag{5.43}$$

Cette approximation conduit à des erreurs systématiques inférieures à 2%. Compte tenu de (5.43), la correction de couche R^{ω}_{shell} se réécrit :

$$\boxed{R^{\omega}_{shell} = R^{\omega=0}_{shell} + \frac{1}{2}\Im_{macro}\,\omega^2 + \sum_{n=1}^{\lambda_F}(e^{\omega}_n - e^{\omega=0}_n)} \tag{5.44}$$

En combinant (5.40) et (5.44), on peut réécrire le routhien total (5.37) :

$$R^{\omega}_{total} = \left[R^{\omega=0}_{macro} + R^{\omega=0}_{shell}\right] + \sum_{n=1}^{\lambda_F}(e^{\omega}_n - e^{\omega=0}_n) \tag{5.45}$$

et l'on voit que le deux premiers termes se ramènent tout simplement au routhien total à $\omega = 0$, c'est-a-dire à l'énergie totale du noyau statique :

$$\boxed{R^{\omega}_{total} = E^{\omega=0}_{total} + \sum_{n=1}^{\lambda_F}(e^{\omega}_n - e^{\omega=0}_n)} \tag{5.46}$$

L'expression (5.46) l'une des formes les plus simples du « théorème » de Strutinsky dans le cas particulier de potentiels tournant ayant une forme de Woods-Saxon ou de Folded-Yukawa. Une fois R^{ω}_{total} selon (5.46), l'étape 3 de notre procédure est terminée, et il nous suffit, pour déterminer entièrement l'énergie totale dans le référentiel du laboratoire à spin fixé, de calculer :

$$E_{total}(I) = R^{\omega(I)}_{total} + \omega(I)I \tag{5.47}$$

5.3 RÉSULTATS

Les sections précédentes nous ont permis de donner l'expression des deux termes intervenant dans l'énergie totale du noyau, à savoir l'énergie macroscopique calculée selon la formule de la goutte liquide, et l'énergie microscopique selon la méthode des corrections de couche de Strutinsky. Dans cette section, nous allons présenter les résultats que nous avons obtenus pour les calculs d'énergie totale dans les noyaux avec cette méthode « macro+micro » et l'hamiltonien de Dirac.

Naturellement, comme il existe plusieurs milliers de noyaux atomiques connus, il faut se donner un champ d'investigation précis, nous avons donc centré notre étude sur deux points principaux : d'une part la recherche d'instabilités octupolaires exotiques dans l'état fondamental, i.e. la présence de déformations $\alpha_{3\mu}$ (en particulier celles avec $\mu \neq 0$), d'autre part

l'étude des noyaux super-lourds (minima d'énergie, ouverture-fermeture de gaps d'énergie, nombres magiques, etc.). Deux outils principaux étaient à notre disposition : d'une part le code WS-ODD utilisé en conjonction avec des programmes graphiques permettait de tracer des cartes géographiques de l'énergie totale en fonction de la déformation (par exemple des cartes (β, γ), et plus généralement $(\alpha_{\lambda\mu}, \alpha_{\lambda'\mu'})$) ; d'autre part, nous avons adapté le programme de minimisation utilisé pour déterminer les paramètres de l'hamiltonien de Dirac. L'utilisation d'une telle méthodologie dans ce contexte est, à notre connaissance, une première par rapport aux calculs existants. Cela revient d'une certaine façon à simuler avec un hamiltonien phénoménologique des calculs Hartree-Fock avec contraintes (avec l'avantage qu'il n'y a pas de problèmes de convergence : si le minimum existe, le programme le trouve). Nous reviendrons sur ces aspects un peu plus loin.

5.3.1 Quelques détails pratiques

Avant de présenter quelques uns des résultats obtenus avec la méthode « macro+micro » rappelée à la section précédente, il est nécessaire de donner quelques précisions sur la présentation des résultats. La surface nucléaire est paramétrisée par l'expression (5.1) :

$$R(\theta, \varphi) = r_0 A^{1/3} c(\alpha) \left\{ 1 + \sum_{\lambda=1}^{\lambda_{max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) \right\} \tag{5.48}$$

où les $\alpha_{\lambda\mu}$ sont les paramètres de déformation. Il est de tradition en physique nucléaire d'utiliser, en lieu et place de α_{20} et α_{22} les coordonnées dites de Hill-Wheeler (β, γ) qui sont telles que :

$$\alpha_{20} = \beta \cos\gamma \tag{5.49}$$

$$\alpha_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin\gamma \tag{5.50}$$

Dans nos calculs, nous avons abondamment utilisé cette convention.

Cependant, pour des raisons purement techniques liés aux programmes utilisés, il n'était pas très commode de travailler directement en coordonnées (β, γ), qui sont des coordonnées polaires, et nous avons utilisé à la place les coordonnées cartésiennes :

$$x = \beta \cos(\gamma + 30) \tag{5.51}$$

$$y = \beta \sin(\gamma + 30) \tag{5.52}$$

Outre la facilité d'utilisation, les coordonnées cartésiennes présentent l'avantage de fournir un moyen pratique des tester les calculs. En effet le système est invariant par rotation de 120°. Autrement dit, le noyau a la même forme pour $\gamma = 0°$, $\gamma = 120°$ et $\gamma = 240°$, seuls les axes de symétrie changent [Rin80].

La figure (5.1) illustre ces différentes symétries. Une conséquence intéressante en est que, en coordonnées cartésiennes, il y a symétrie par rapport à l'axe y. Une autre conséquence d'un grand intérêt pratique est qu'il suffit de faire les calculs pour $0 \leq \gamma \leq 60°$, tous les autres secteurs se déduisant par symétrie de ce secteur particulier.

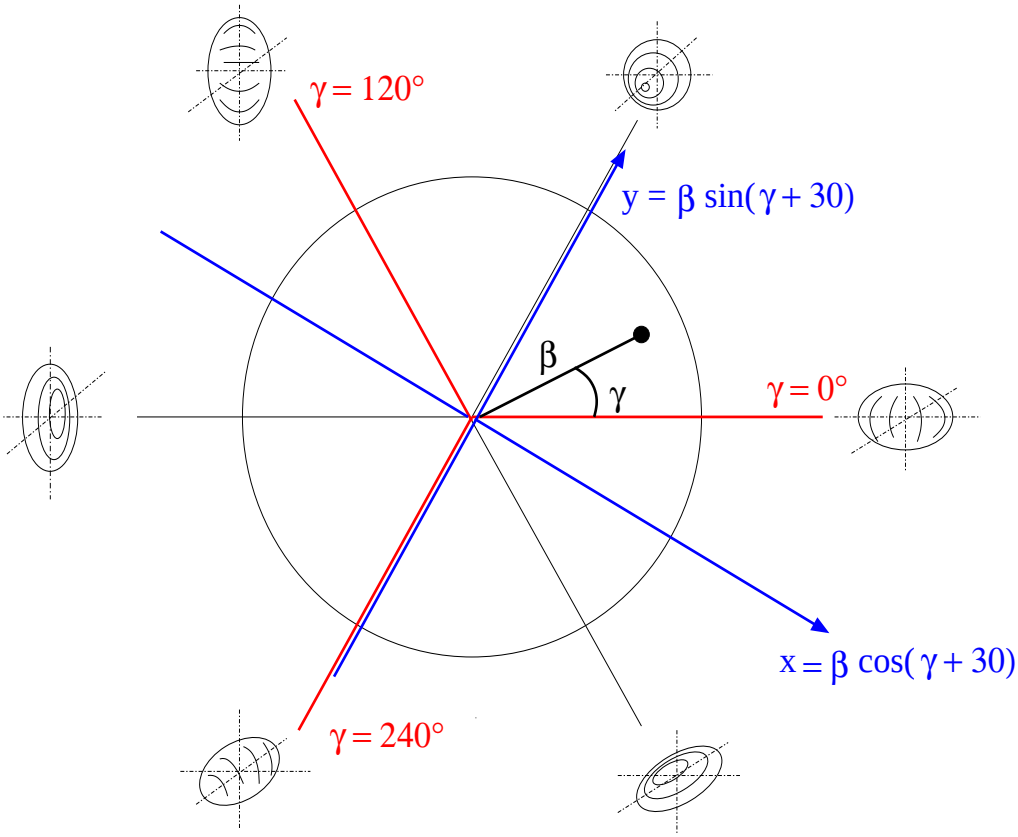


FIG. 5.1 – *Illustration des symétries existant dans le cas de déformations purement quadrupolaires dans le plan* (β, γ). *La forme du noyau est la même pour* $\gamma = 0°$, $\gamma = 120°$ *et* $\gamma = 240°$, *seuls les axes de symétrie changent. Dans le système cartésien* (x, y), *il y a symétrie par rapport à l'axe y.*

5.3.2 Recherche de déformations octupolaires exotiques

Le mécanisme microscopique à l'origine des déformations statiques des noyaux atomiques provient de l'occupation seulement partielle d'un groupe de niveaux originellement dégénérés au voisinage du niveau de Fermi. En effet, supposons un noyau possédant la symétrie sphérique : les niveaux sont dégénérés $(2j+1)$ fois (en comptant la dégénérescence de Kramers due à la conservation de la symétrie par renversement du temps). Ce nombre $(2j+1)$ correspond à la dimension de la représentation irréductible associée à la symétrie, dans le cas d'un noyau sphérique, la symétrie sphérique. Supposons maintenant que l'on enlève quelques nucléons du dernier niveau occupé. Si le noyau possède une symétrie moindre que la symétrie sphérique, ce dernier niveau (dégénéré $(2j+1)$ fois, rappelons-le) va se scinder en plusieurs niveaux : la dimension de la représentation irréductible associée à la nouvelle symétrie est nécessairement moindre que celle associée à la symétrie sphérique. Supposons pour simplifier que sous l'effet de la nouvelle symétrie, le dernier niveau occupé se scinde en deux : un niveau vers le bas, un autre vers le haut. Si le niveau du bas est tel que tous les nucléons qui restaient peuvent s'y mettre, le noyau gagne en stabilité : la nouvelle symétrie sera favorisée.

On conçoit sur cet exemple empirique pourquoi seuls les noyaux ayant des couches j incomplètes peuvent se déformer statiquement dans le référentiel propre du noyau : pour un noyau ayant une couche j pleine, la levée de dégénérescence n'apporte aucun gain en énergie, puisque si certains niveaux s'abaissent, les autres s'élèvent, et ceux-ci sont occupés par des nucléons. Cette brisure spontanée de la symétrie sphérique est l'effet Jahn-Teller[3]. Je n'en ai fait qu'une présentation qualitative, mais on peut le démontrer grâce aux outils de la théorie des groupes de symétrie (et de leurs représentations), voir par exemple [Lan77].

Concrètement, les déformations (λ, μ) sont contrôlées par l'opérateur multipolaire associé $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ (pour peu que ces déformations ne soient pas trop grandes) :

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = f_\lambda(r) Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) \tag{5.53}$$

L'énergie du système ayant la déformation (λ, μ) fait intervenir les éléments de matrice réduit de l'opérateur $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ sur les états sphériques individuels. Ainsi, pour les déformations octupolaires ($\lambda = 3$), c'est l'opérateur $\hat{Q}_{3\mu}$ qui intervient, et cet opérateur ne peut coupler que des états $\Delta\ell = 3$ et $\Delta j = 3$. Les noyaux dans lesquels on peut suspecter la présence de fortes instabilités octupolaires sont donc ceux dans lesquels l'orbitale intruse (caractérisée par le moment orbital ℓ) issue de la couche $N+1$ interagit avec le niveau $\ell-3$ de la couche N [But96]. Les nombres de particules correspondants sont 34, 56, 88 et 134.

a) Quelques rappels de la théorie des groupes de symétrie

Il y a plusieurs opérateurs de déformation octupolaire différents, et nous verrons un peu plus loin qu'ils n'ont pas tous la même importance dans la perspective des minima d'énergie totale. Pour faciliter la discussion du rôle de chaque paramètre de déformation, il est nécessaire de faire quelques rappels sur la théorie des groupes de symétrie ponctuel.

Supposons que l'hamiltonien d'un système quantique possède une certaine symétrie géométrique : cela signifie, d'une part que le système reste invariant par certaines transformations géométriques (du type réflexions, rotations, inversions, etc.), d'autre part que l'hamiltonien commute avec les opérateurs associés à chaque symétrie (parfois appelés les générateurs du groupe de symétrie). Supposons de plus que l'ensemble des transformations de symétrie forme un groupe, au sens mathématique du terme. Pour exprimer l'action des éléments des ce groupe sur les fonctions d'onde du système, il est nécessaire de trouver une ou plusieurs *représentation* de ce groupe, c'est-à-dire un ensemble d'opérateurs agissant dans l'espace des fonctions d'onde. Ces représentations se classent en deux catégories, les représentations réductibles et les représentations irréductibles (notées en abrégé « irreps. »). Nous ne parlerons que de ces dernières (pour un exposé plus complet de la théorie des groupes ponctuels de symétrie en mécanique quantique, voir [Lan77]).

Il se trouve qu'il existe un lien très profond entre les symétries d'un système et les dégénérescences de ses niveaux d'énergie. En effet, on peut *classer* les différents niveaux

[3] **De même que l'évolution des routhiens en fonction de la fréquence de rotation est une conséquence naturelle de la règle de non-croisement de Von-Neumann (aussi appelée effet Landau-Zener), de même l'existence de déformations statiques dans les noyaux est une conséquence de l'effet Jahn-Teller.**

d'énergie en fonction des représentations irréductibles du groupe de symétrie auquel obéit l'hamiltonien, et de plus, la dégénérescence d'un niveau d'énergie attaché à une certaine irrep. est égale à la dimension de cette irrep. Par exemple, supposons un groupe de symétrie possédant deux irreps. unidimensionnelles A1, A2, une irrep. bi-dimensionnelle E et deux irreps. tri-dimensionnelles F1 et F2. Alors :

- les niveaux d'énergie se répartissent en niveaux non-dégénérés, dégénérés deux fois ou dégénérés trois fois ;
- pour les niveaux non dégénérés, certains correspondent à l'irrep. A1, d'autres à l'irrep. A2. Idem pour les niveaux dégénérés 3 fois.

Cet exemple est illusté schématiquement sur la figure 5.2

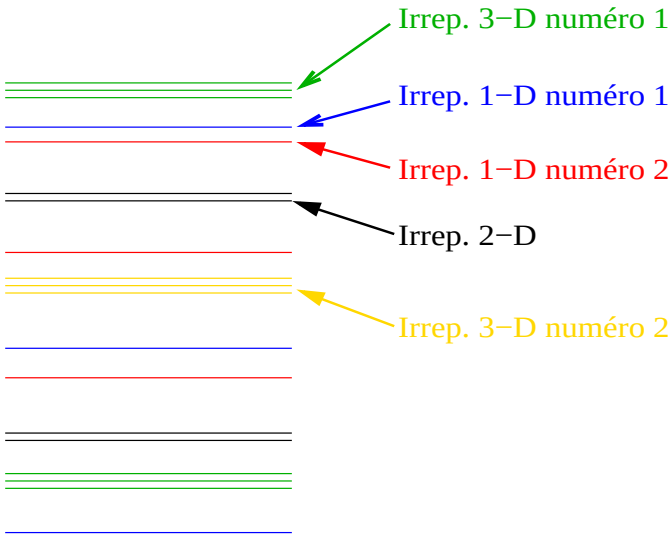


FIG. 5.2 – *Illustration de la classification des niveaux d'énergie en fonction des représentations irréductibles d'un groupe de symétrie. Pour faciliter la compréhension, les niveaux dégénérés ont été dessinés légèrement espacés.*

Cette propriété très générale a d'importantes conséquences lorsqu'on applique au système une perturbation (qui conserve la symétrie en question). En effet, deux niveaux d'énergie appartenant à la même représentation irréductible ne peuvent pas se croiser (c'est l'effet Landau-Zener, que nous avons déjà rencontré au chapitre 4). Prenons l'exemple d'un spectre individuel ne possédant qu'un seul groupe de symétrie n'ayant qu'une seule représentation irréductible. Comme tous les niveaux appartiennent à la même irrep., ils ne peuvent se croiser. A mesure que l'intensité de la perturbation augmente, l'ensemble du spectre tend donc vers une distribution de niveaux uniforme. Dans cet exemple particulier, il ne peut donc y avoir de « gaps ». Au contraire, les gaps éventuels existant sans perturbation doivent disparaître lorsque celle-ci augmente.

b) Comparaison de l'influence des différentes symétries d'ordre $\lambda = 3$

A l'aide des quelques outils de la théorie des groupes que nous avons brièvement rappelés au paragraphe précédent, nous pouvons maintenant étudier l'influence de chaque paramètre

de déformation octupolaire.

Pour les déformations octupolaires, et dans le cadre de la paramétrisation (5.1) de la surface, quatre paramètres différents sont à envisager : α_{30}, α_{31}, α_{32} et α_{33}. La question est la suivante : s'il existe des noyaux présentant des déformations octupolaires stables dans leur état fondamental, quel peut être le paramètre de déformation impliqué ? Pour avoir une première indication du rôle de chacun, nous avons tracé les niveaux d'énergie individuels en fonction de $\alpha_{3\mu}$ pour $\mu = 0, 1, 2, 3$, tous les autres paramètres de déformation étant fixés à 0. Les figures des deux pages suivantes présentent les résultats obtenus dans ^{208}Pb pour les neutrons avec l'hamiltonien non relativiste de Woods-Saxon et la paramétrisation universelle.

On peut faire les remarques suivantes :

- la symétrie C_{2v} associée à la déformation α_{31} ne comprend qu'une seule représentation irréductible. Conformément à la discussion faite au paragraphe précédent, on constate sur la figure 5.4 que les gaps disparaissent tous sans que jamais les niveaux ne se croisent. Il apparaît donc peu vraisemblable que cette déformation soit impliquée seule dans les minima d'énergie. Tous les niveaux sont deux fois dégénérés ;
- *a contrario*, la déformation α_{32} qui correspond au groupe de symétrie T_d (la symétrie du tétraèdre, autrement dit celle de la molécule NH_3) est beaucoup plus riche en représentations irréductibles, puisqu'elle contient deux irreps. bi-dimensionnelles et une irrep. quadri-dimensionnelle. Par conséquent, les niveaux ont tous une dégénérescence 2 ou une dégénérescence 4. On peut observer cette dégénérescence 4 par exemple en haut à droite sur la figure 5.5 : les gaps 136 et 142 ne sont séparés que par deux niveaux, l'un dégénéré 2 fois, le niveau [523]7/2, l'autre 4 fois, contenant les niveaux [606]3/2 et [651]1/2 (chacun degénéré deux fois en raison de la dégénérescence de Kramers). Ce regroupement des niveaux d'énergie a pour conséquence l'apparition de nombreux gaps magiques tels que 112 ou 136 autour du Plomb.
- le groupe D_3 caractéristique de la déformation α_{33} possède seulement 3 représentations irréductibles uni-dimensionnelles. Par conséquent, les niveaux peuvent se croiser (du moins certains d'entre eux), et tous sont dégénérés deux fois (à cause de la dégénérescence de Kramers).

Ces résultats démontrent donc qu'il est beaucoup plus avantageux de chercher des déformations octupolaires de type α_{32} que n'importe quelle autre. Pour accélérer les calculs, nous avons étudié les noyaux plus légers, autour de ^{80}Zr en calculant les surfaces d'énergie totale correspondantes.

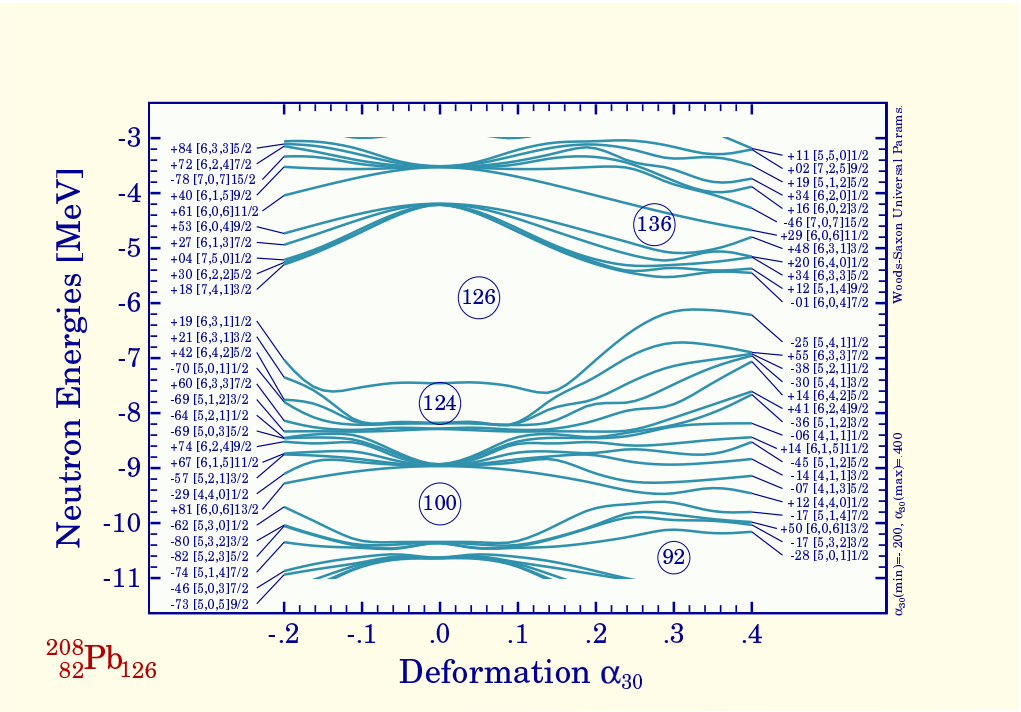


FIG. 5.3 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{208}Pb en fonction de la déformation octupolaire α_{30} pour les neutrons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0, et l'hamiltonien correspond au champ moyen non-relativiste de Woods-Saxon. Les nombres indiqués à gauche des labels de Nilsson correspondent à la parité moyenne de l'état individuel.*

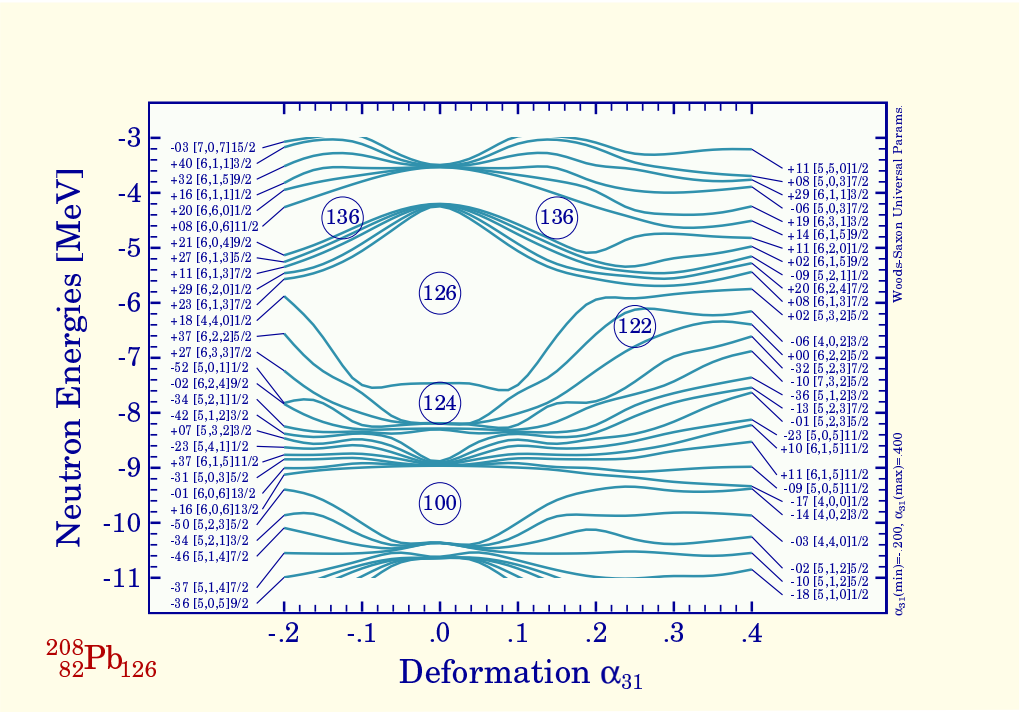


FIG. 5.4 – *Même type de figure que la figure 5.3, mais cette fois en fonction de la déformation α_{31}. Un œil expert peut voir la différence entre cette figure et la figure 5.3 : ici, TOUS les gaps disparaissent, et AUCUN niveau ne se croise.*

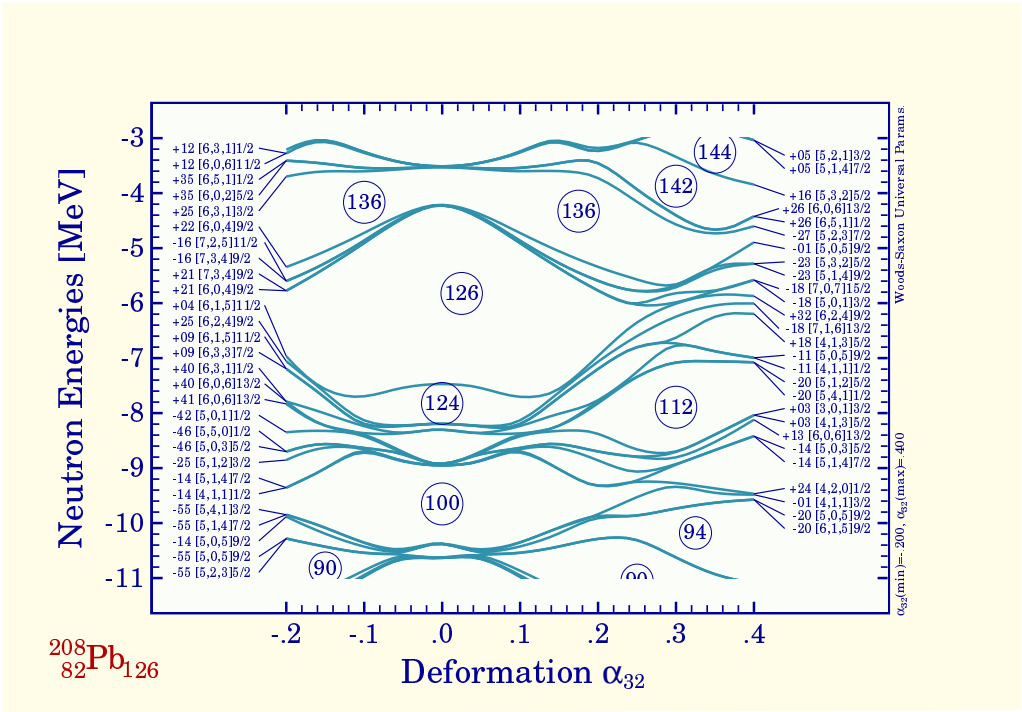


FIG. 5.5 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{208}Pb en fonction de la déformation octupolaire α_{32} pour les neutrons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0. Les nombres indiqués à gauche des labels de Nilsson correspondent à la parité moyenne de l'état individuel. Cette figure doit être en particulier comparée à la figure 5.4.*

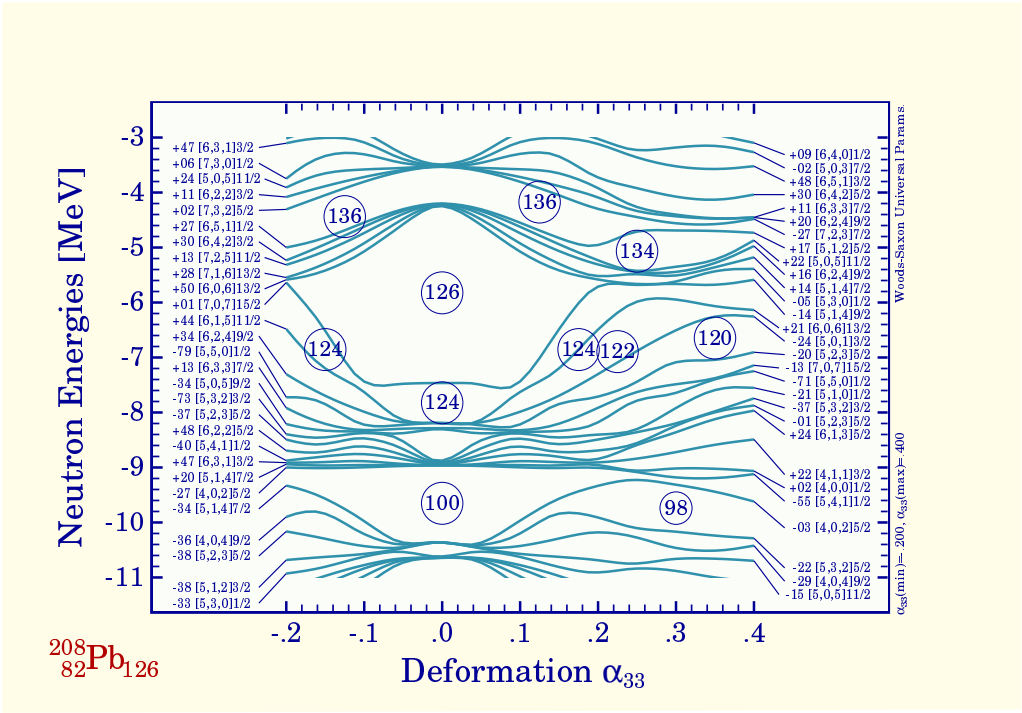


FIG. 5.6 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{208}Pb en fonction de la déformation octupolaire α_{33} pour les neutrons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0.*

c) *Recherches de déformations octupolaires exotiques dans ^{80}Zr*

Avant de calculer les surfaces d'énergie totale dans la région de ^{80}Zr, nous allons montrer la variation des niveaux individuels en fonction des différents paramètres de déformation. Nous avons vu au paragraphe précédent que la déformation α_{31} conduisait à une densité de niveaux presque uniforme, nous ne reviendrons pas sur ce type de déformation. Par contre, les autres déformations présentent toutes quelques caractéristiques intéressantes.

Les figures 5.7-5.12 des pages 149-151 présentent les niveaux d'énergie individuels neutrons et protons, respectivement en fonction de α_{30}, α_{32} et α_{33}. Les calculs sont faits avec l'hamiltonien de Dirac, dans la région de ^{90}Zr. Plusieurs remarques additionnelles par rapport à celles du paragraphe précédent peuvent être faites :

- à chaque page, les deux figures sont une magnifique illustration de l'invariance d'isospin de la force nucléaire[4]. En effet, on peut remarquer que non seulement l'allure visuelle des figures est la même, mais l'examen des labels de Nilsson montre que les mêmes niveaux d'énergie se retrouvent chez les protons et les neutrons, et que la structure est globalement identique. Cette remarque n'a pas seulement un intérêt pédagogique : d'une part, elle confirme le caractère réaliste de l'hamiltonien de Dirac, d'autre part, elle implique que les mêmes gaps doivent se retrouver chez les protons comme chez les neutrons.
- on peut également remarquer que certains gaps magiques se retrouvent pour chaque déformation. Par exemple, le gap 40 ($Z = 40$ et $N = 40$) existe à la fois avec les déformations α_{30}, α_{32} et α_{33}. Par conséquent, il apparaît donc nécessaire de tenir compte dans les calculs de tous les types de déformations, et de ne pas se restreindre aux déformations axiales, par exemple $\beta_3 \equiv \alpha_{30}$.

A la lumière des figures 5.7-5.12, il apparaît clairement que l'un des candidats les plus sérieux pour des déformations octupolaires statiques dans son état fondamental est ^{80}Zr, qui semble être doublement magique en $Z = 40$ et $N = 40$. Aussi avons-nous effectué des calculs de surface d'énergie totale autour de ce noyau. La figure 5.13 page 152 présente la carte $(\alpha_{20}, \alpha_{32})$ de l'énergie totale du noyau ^{80}Zr. En chaque point, l'énergie est minimisée par rapport à α_{30}. On voit très clairement l'existence d'un minimum d'énergie assez profond. Néanmoins, il faut être sûr que ce minimum existe réellement, et n'est pas un artefact de calcul lié au fait que toutes les déformations possibles ne sont pas prises en compte. Par exemple, une parabole présente un minimum, mais si cette parabole est en fait la coupe à deux dimensions d'une « selle de cheval », le point qui semble être un minimum à deux dimensions n'en est en fait pas du tout un à trois dimensions. Pour s'assurer que le minimum de la figure 5.13 est bien ce qu'il semble être, nous avons procédé en deux étapes : dans un premier temps, nous avons utilisé le programme de minimisation présenté au chapitre 3 en laissant varier α_{20} (déformation quadrupolaire), $(\alpha_{40}, \alpha_{42}, \alpha_{44})$ (déformation hexadécapolaire), et $(\alpha_{30}, \alpha_{32})$ (déformation octupolaire) pour vérifier que ce minimum n'implique que des déformations $\alpha_{3\mu}$ et que toutes les autres sont nulles. Les résultats sont présentés dans le tableau 5.1 page 152.

[4] **L'invariance d'isospin de la force nucléaire ressort ici car le nombre de protons est peu élevé, et donc la répulsion coulombienne moins importante. Dans les noyaux plus lourds, cette dernière perturbe beaucoup plus le spectre proton, qui diffère donc plus fortement de celui des neutrons.**

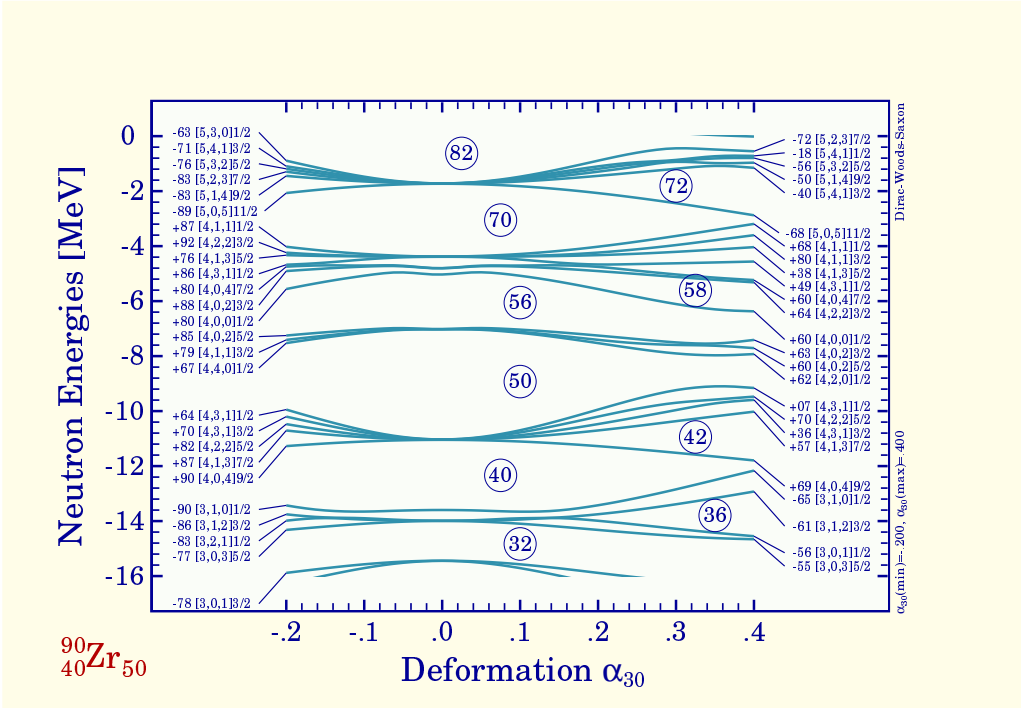


FIG. 5.7 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{30} pour les neutrons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0, et l'hamiltonien correspond au champ moyen de Dirac. Les nombres indiqués à gauche des labels de Nilsson correspondent à la parité moyenne de l'état individuel.*

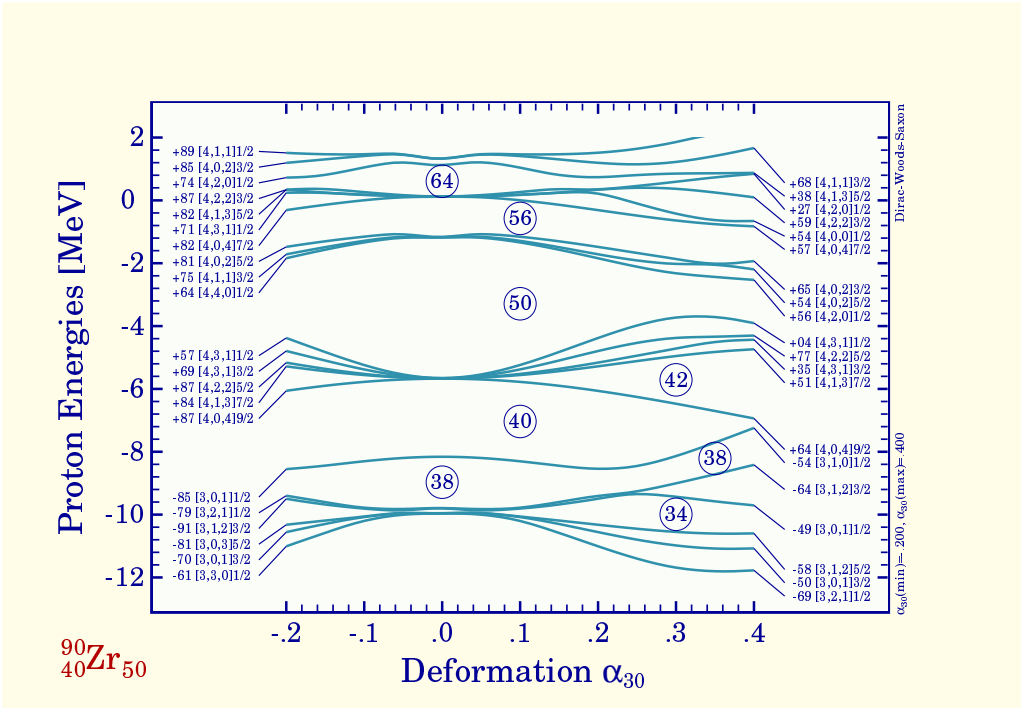


FIG. 5.8 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{30} pour les protons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0.*

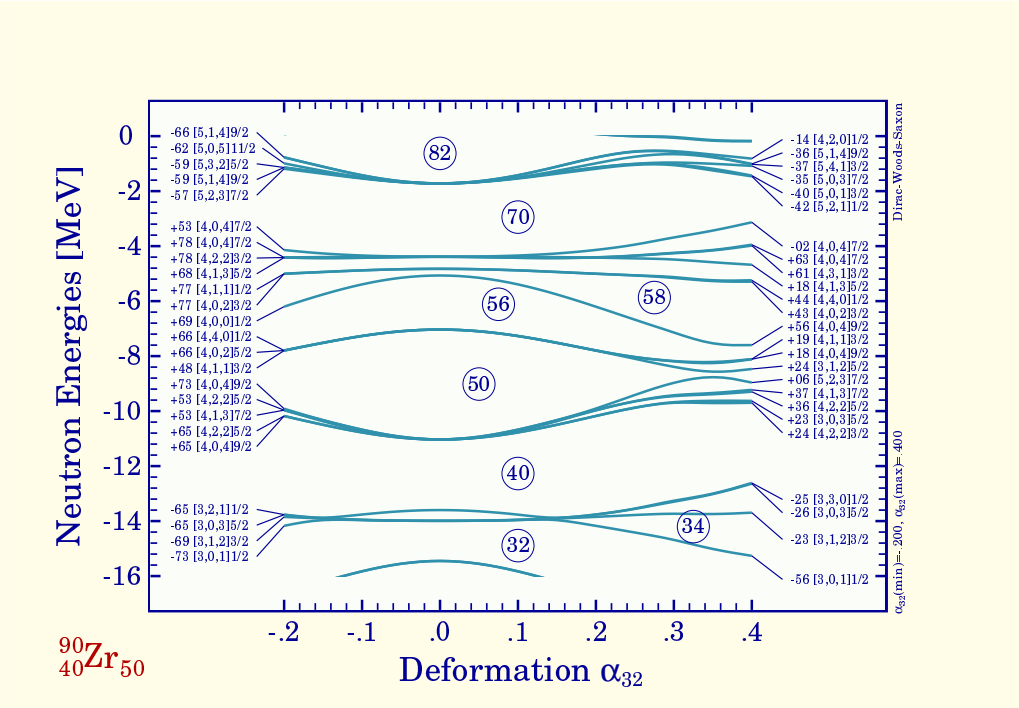


FIG. 5.9 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{32} pour les neutrons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0. Les nombres indiqués à gauche des labels de Nilsson correspondent à la parité moyenne de l'état individuel.*

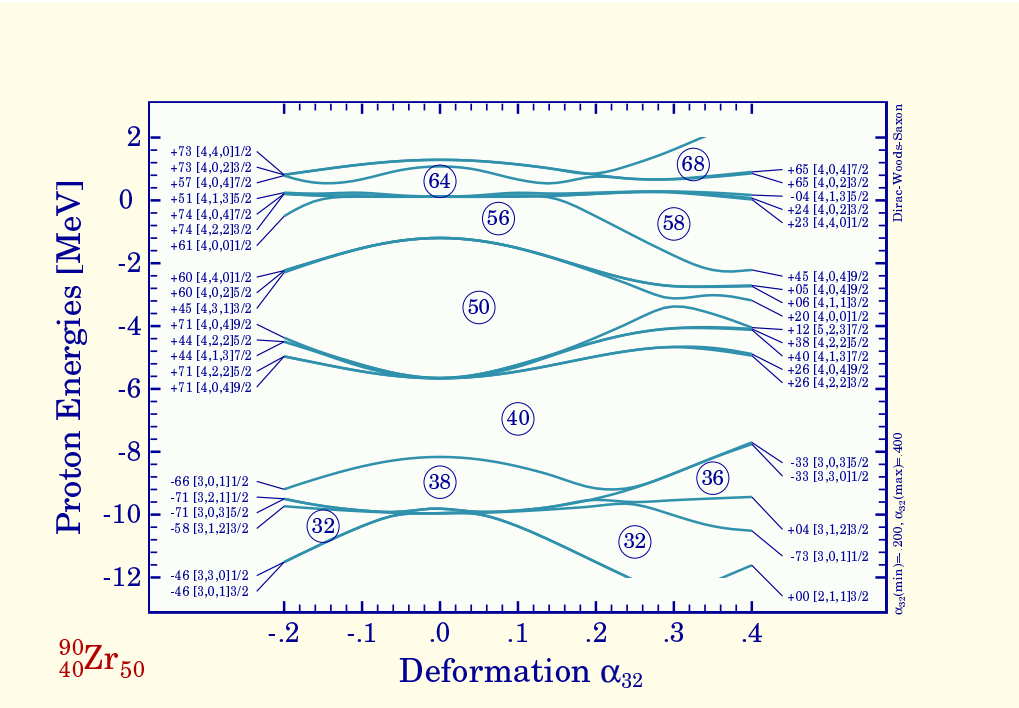


FIG. 5.10 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{32} pour les protons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0.*

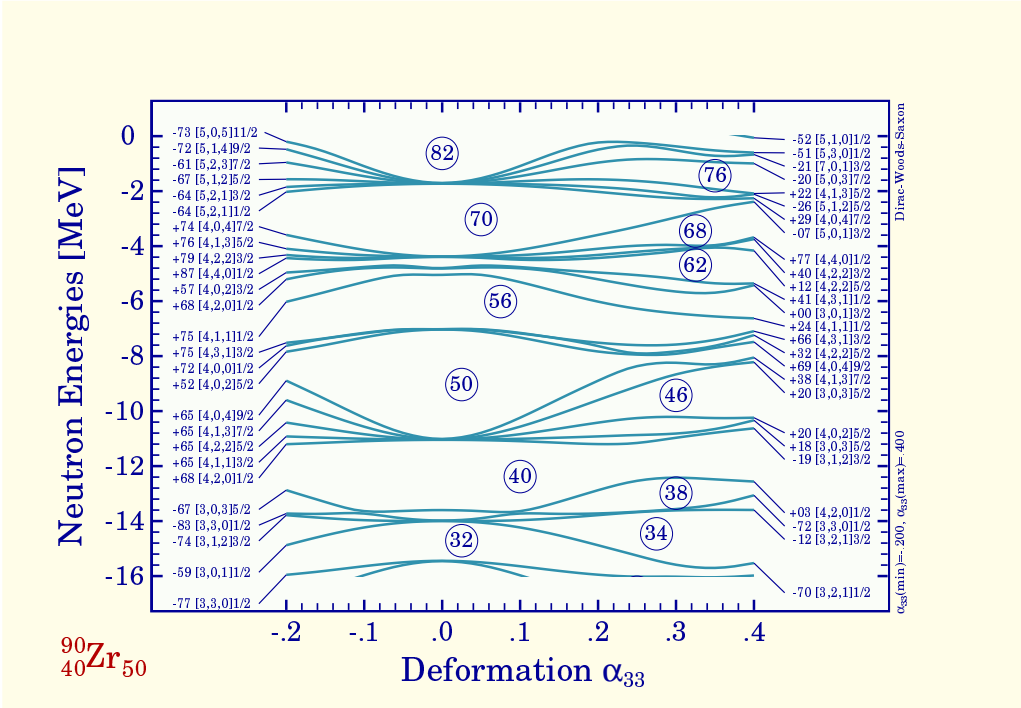


FIG. 5.11 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{33} pour les neutrons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0. Les nombres indiqués à gauche des labels de Nilsson correspondent à la parité moyenne de l'état individuel.*

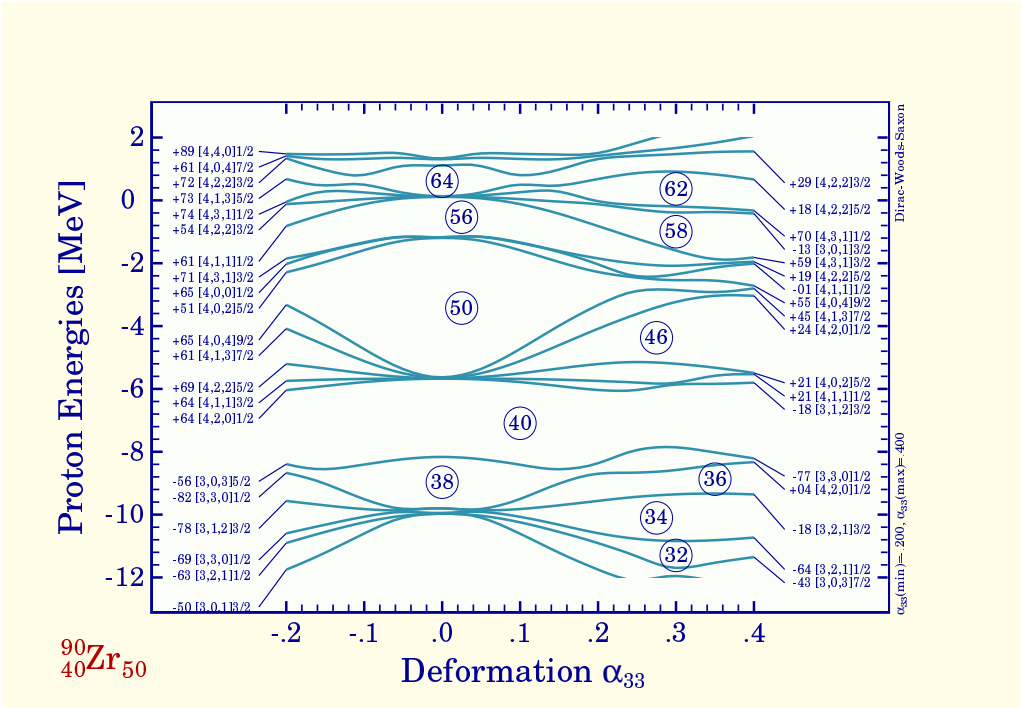


FIG. 5.12 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels dans ^{90}Zr en fonction de la déformation octupolaire α_{33} pour les protons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0.*

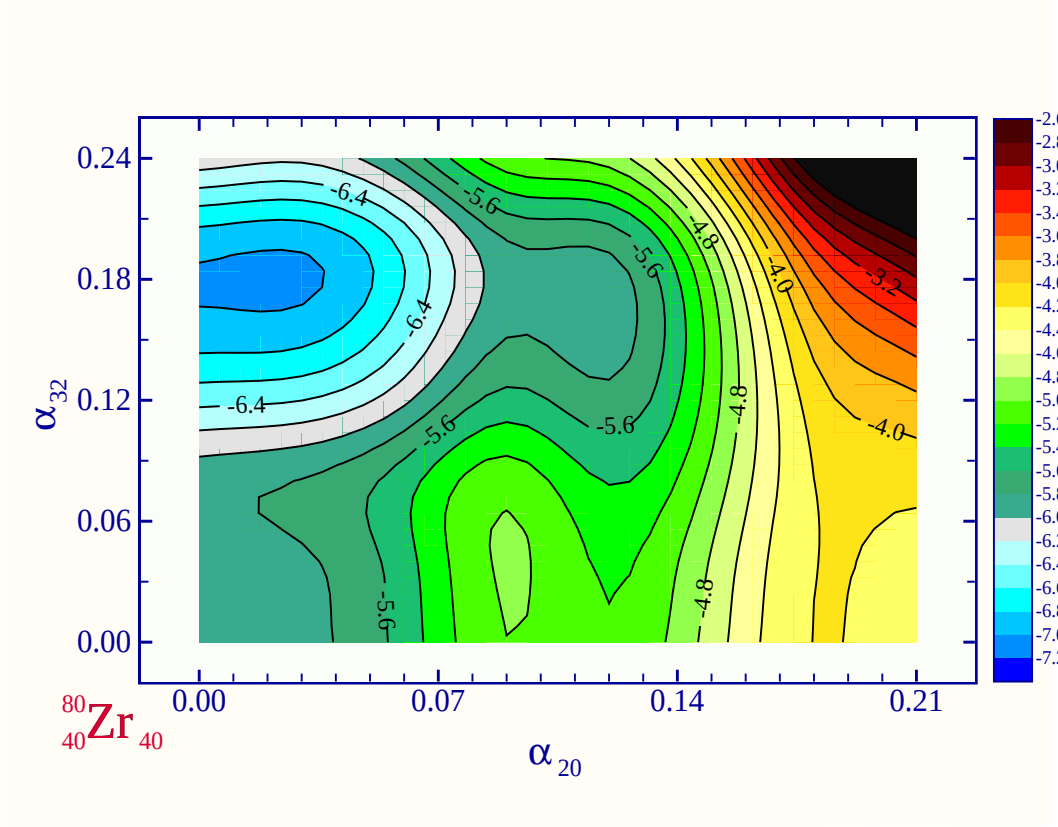


FIG. 5.13 – *Surface d'énergie totale pour* ^{80}Zr *avec l'hamiltonien de Dirac. Les déformations prises en compte sont* α_{20}, α_{30} *et* α_{32}. *Chaque point de la figure correspond à une déformation* $(\alpha_{20}, \alpha_{32})$ *avec* α_{30} *telle que l'énergie totale soit minimum.*

No.	α_{20}	α_{30}	α_{32}	α_{40}	α_{42}	α_{44}	Energie (MeV)
1	-0.00518	-0.00340	0.17719	0.00091	-0.00269	-0.00291	-7.21829
2	-0.00218	-0.00565	0.18145	0.00568	-0.00374	-0.00388	-7.22573
3	-0.00411	0.16412	0.03252	-0.00845	-0.00262	0.00140	-5.93670
4	-0.00694	0.17899	-0.01486	0.00900	0.00010	-0.00038	-6.01185
5	-0.00064	0.18052	-0.00088	0.00673	-0.00099	-0.00106	-6.02218
6	-0.01295	-0.02894	0.15004	0.01807	-0.00286	0.00560	-6.84227
7	-0.00214	-0.00051	0.18104	0.00323	-0.00098	-0.00332	-7.23015
8	-0.00239	0.00182	-0.18284	0.00371	-0.00256	-0.00378	-7.22793
9	-0.00162	-0.00031	0.17482	-0.00388	-0.00061	-0.00351	-7.21462

TAB. 5.1 – *Résultats de la minimisation de l'énergie totale sur les déformations* α_{20}, α_{30} *et* α_{32}, α_{40}, α_{42} *et* α_{44}.

Le tableau 5.1 présente les résultats obtenus par le programme de minimisation. Rappelons que le programme de minimisation génère un point de départ (i.e. un ensemble de déformations initiales) aléatoirement, et converge ensuite vers un minimum local. Les valeurs du tableau 5.1 sont précisément ces minima locaux. Il est à noter que la déformation quadrupolaire était choisie entre 0 et 0.2, les deux déformations octupolaires entre 0 et

0.30, et les trois déformations hexadécapolaires entre -0.15 et +0.15. On constate que le programme converge vers deux minima différents, tous deux caractérisés par :

$$\alpha_{20} = \alpha_{40} = \alpha_{42} = \alpha_{44} = 0.0 \tag{5.54}$$

Le minima le plus profond est tel que $\alpha_{32} \sim 0.18$ et $\alpha_{30} \sim 0$, l'autre ayant $\alpha_{30} \sim 0.18$ et $\alpha_{32} \sim 0$. Les calculs ont été refaits plusieurs fois, en variant certains paramètres tels que le pas du gradient ou les plages de variation des paramètres de déformation, mais tous les résultats sont résumés sur le tableau 5.1.

La deuxième phase du calcul consistait à tenir compte des déformations octupolaires uniquement, en imposant toutes les autres égales à 0. La nécessité de cette étape est due au tableau 5.1 : il y a clairement deux minima différents, correspondant à deux déformations différentes. Peut-être alors les autres déformations octupolaires rentraient-elles également en ligne de compte ? Les figures 5.14-5.19 montrent les cartes du type $(\alpha_{3x}, \alpha_{3y})$ obtenues avec différentes déformations. Dans chaque figure, l'énergie est minimisée par rapport aux

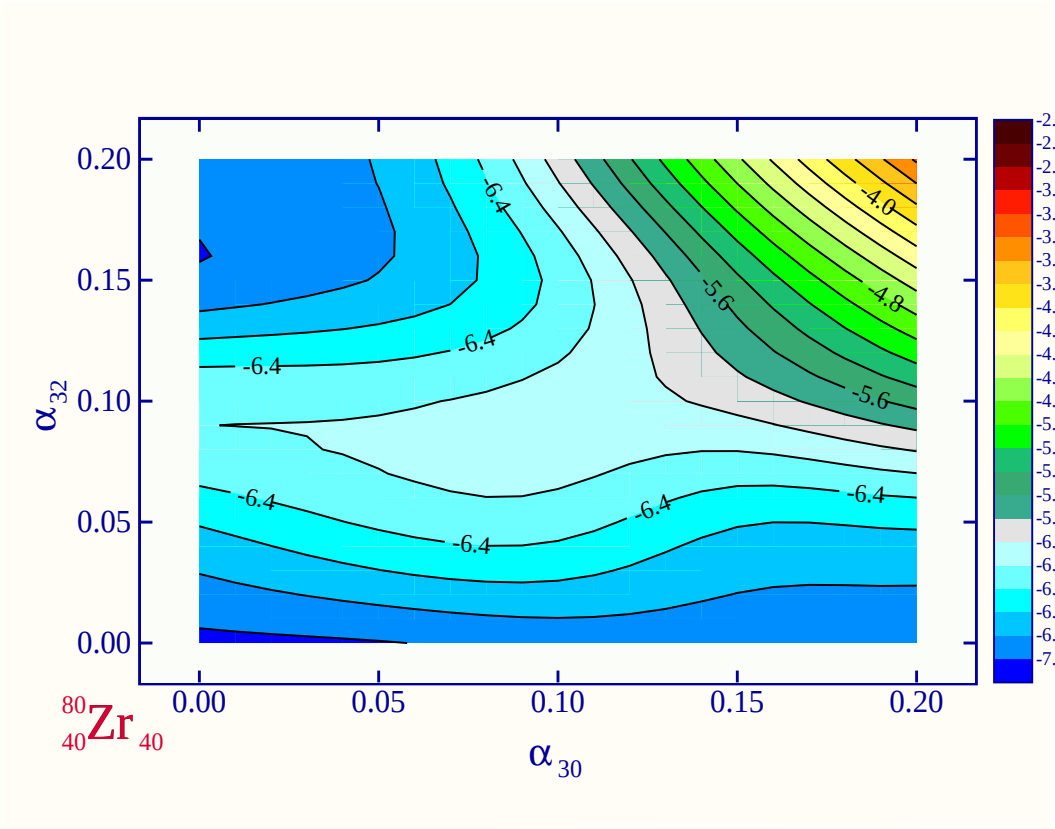


FIG. 5.14 – *Surface d'énergie totale* $(\alpha_{30}, \alpha_{32})$ *pour* ^{80}Zr. *Seules les déformations* $\alpha_{3\mu}$ *sont non-nulles. Chaque point correspond à l'énergie minimisée par rapport à* $(\alpha_{31}, \alpha_{33})$.

autres déformations. Par exemple, sur la carte $(\alpha_{30}, \alpha_{32})$, chaque point tracé correspond au minimum d'énergie par rapport à α_{31} et α_{33} pour α_{30} et α_{32} fixés.

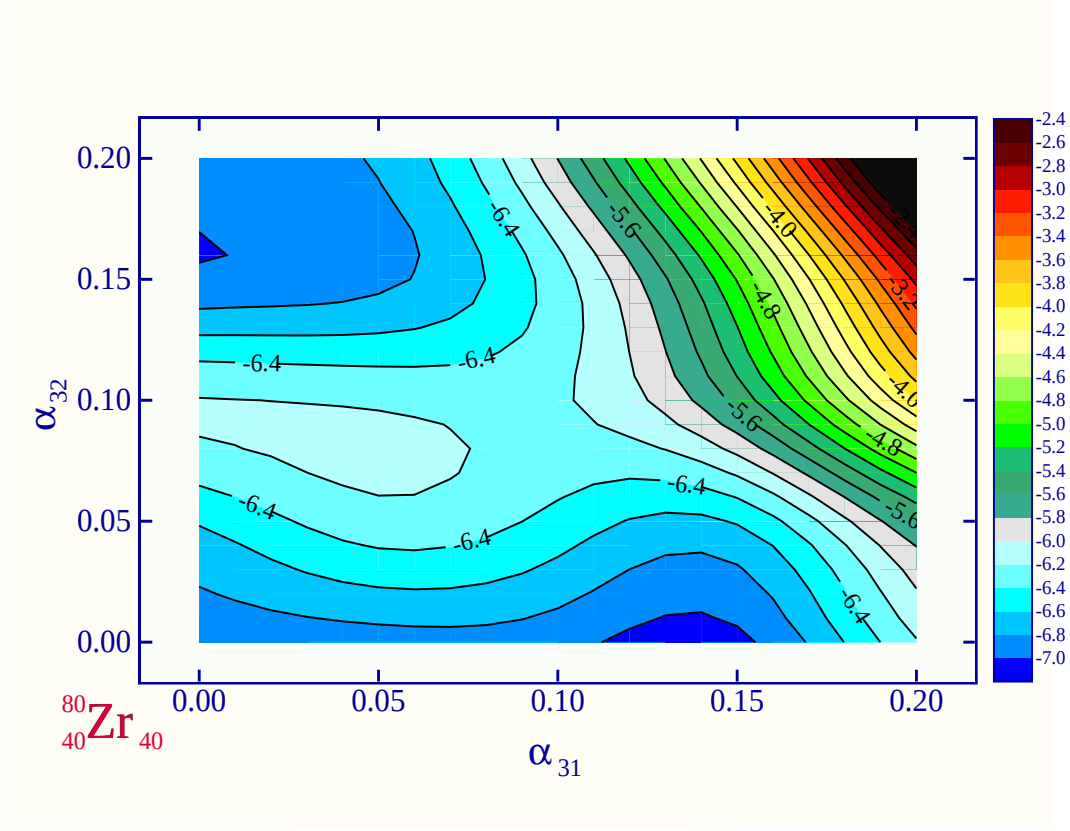


FIG. 5.15 – *Surface d'énergie totale* $(\alpha_{31}, \alpha_{32})$ *pour* ^{80}Zr.

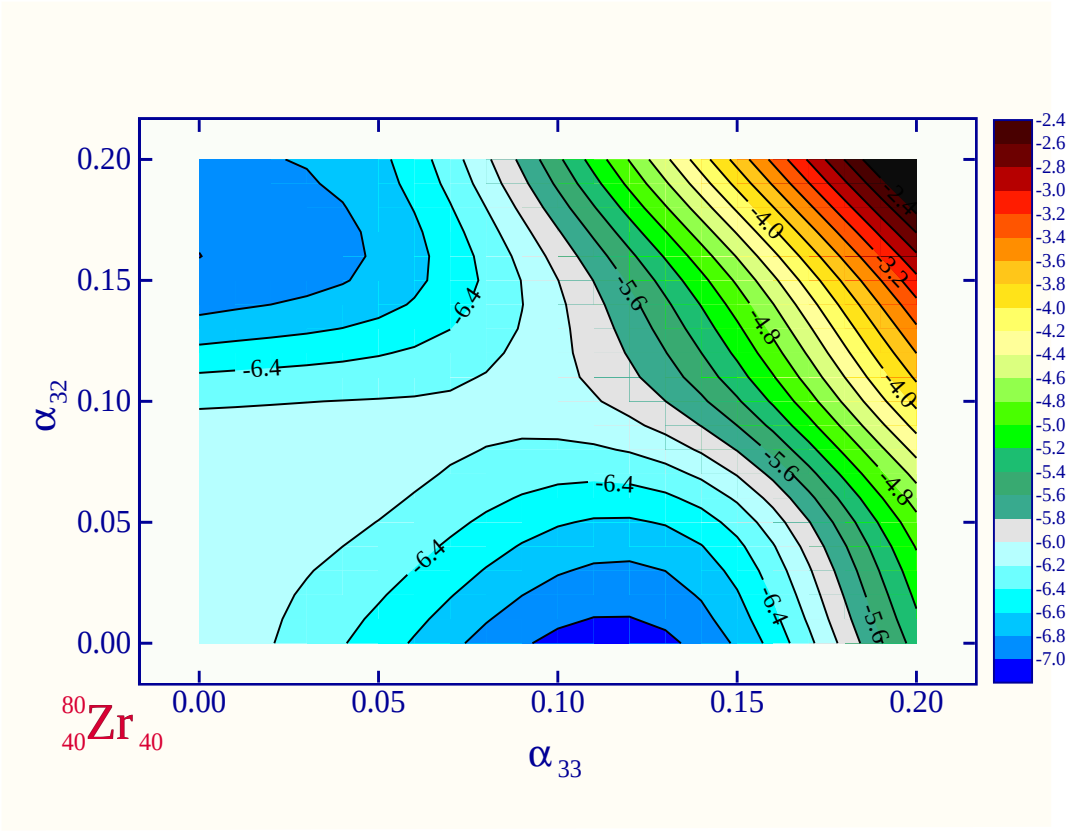


FIG. 5.16 – *Surface d'énergie totale* $(\alpha_{33}, \alpha_{32})$ *pour* ^{80}Zr.

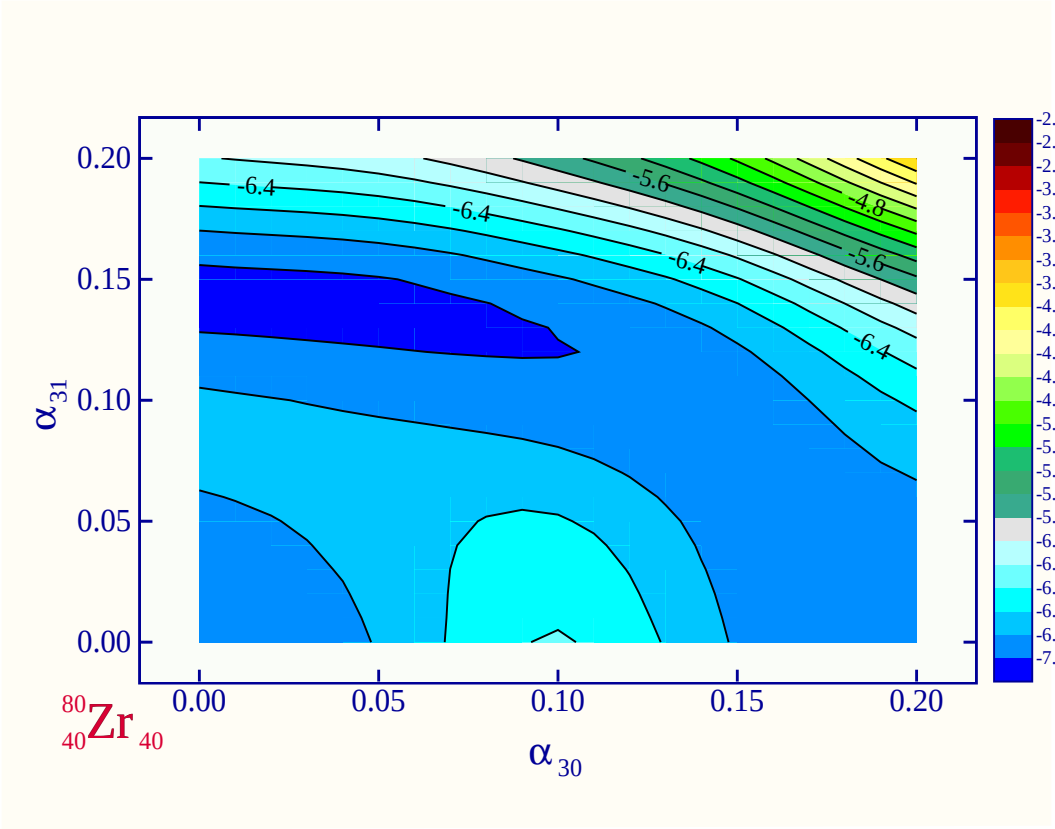


FIG. 5.17 – *Surface d'énergie totale* $(\alpha_{30}, \alpha_{31})$ *pour* ^{80}Zr.

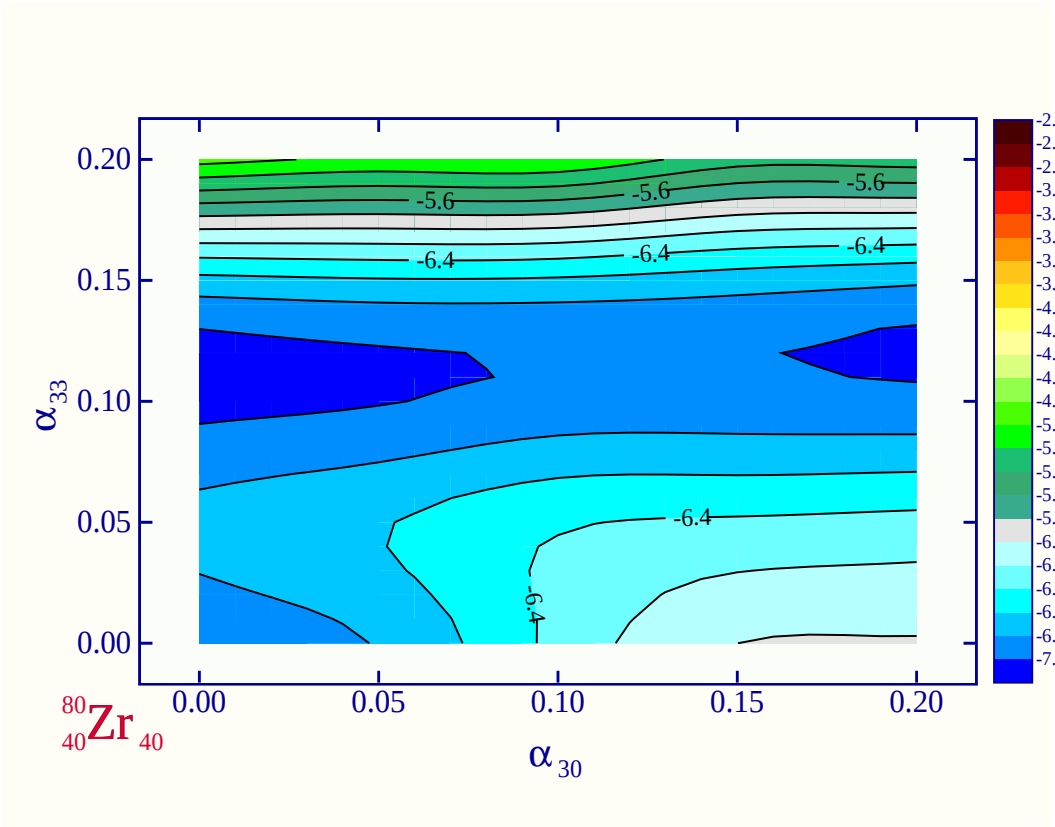


FIG. 5.18 – *Surface d'énergie totale* $(\alpha_{30}, \alpha_{33})$ *pour* ^{80}Zr.

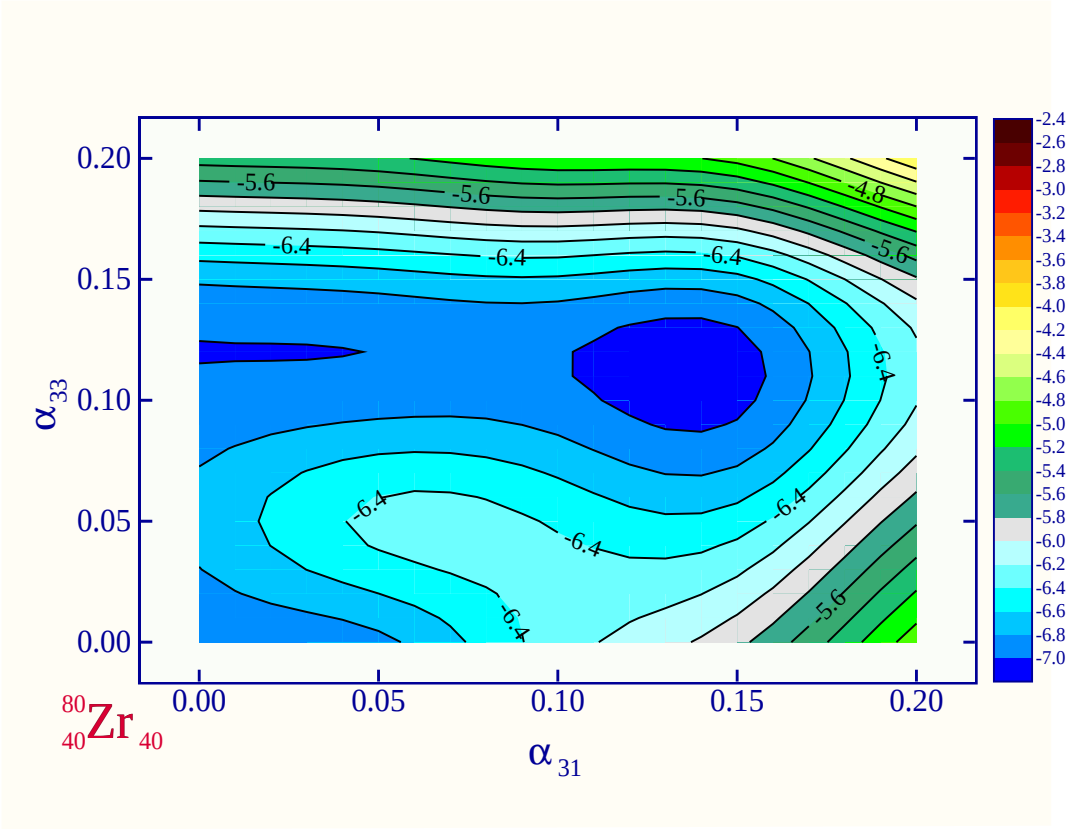


FIG. 5.19 – *Surface d'énergie totale* $(\alpha_{31}, \alpha_{33})$ *pour* ^{80}Zr.

L'examen de ces figures montre que, contrairement à ce qu'on aurait pu penser de prime abord, *tous* les paramètres de déformation octupolaires jouent un rôle. Plus exactement, il existe plusieurs *combinaisons* de déformations qui créent des minima, et ces minima sont séparés par des barrières relativement faibles. Autrement dit, le noyau peut facilement passer d'une combinaison de déformations à une autre, et cela d'autant plus que la *courbure* de la surface est également très faible. Les minima apparaissent donc hautement instables. L'inconvénient des cartes géographiques du type de celles qui viennent d'être présentées est que, dès que le nombre de déformations devient supérieur à 2 voire 3, il est très difficile de se représenter graphiquement les (hyper-)surfaces correspondantes. Aussi est-il plus adapté d'utiliser de nouveau la procédure de minimisation.

Nous donnons dans le tableau 5.2 les résultats de ce programme appliqué au noyau ^{80}Zr. Les déformations octupolaires $\alpha_{3\mu}$ étaient toutes prises entre 0.0 et 0.30, et la déformation α_{20} entre -0.15 et +0.15. On retrouve en fait de façon beaucoup plus précise (et beaucoup moins esthétique) les résultats de toutes les figures 5.14-5.19, à savoir qu'il y a manifestement plusieurs minima[5], de profondeur peu différente, mais qui correspondent à des combinaisons de déformation très différentes. Le minimum le plus profond reste cependant $\alpha_{32} \sim 0.17$.

[5]**En réalité, il ne s'agit pas des minima au sens strict mathématique, mais des points d'arrêt de la procédure de minimisation. Celle-ci stoppe lorsque la norme du gradient est inférieure à une certaine valeur critique, ou lorsque la différence entre les valeurs des déformations à l'itération N sont presque égales à celles à l'itération N-1.**

No.	α_{20}	α_{30}	α_{31}	α_{32}	α_{33}	Energie (MeV)
1	-0.00368	0.03806	0.06999	0.14719	-0.06435	-7.17895
2	-0.00238	0.00673	0.13811	0.00118	0.10719	-7.12827
3	-0.00299	0.13583	-0.08055	0.06307	0.10793	-7.13159
4	-0.00321	0.07842	0.08593	0.11619	-0.08485	-7.15022
5	-0.00226	0.04804	0.06996	0.13783	-0.06491	-7.15355
6	-0.00419	0.16079	0.06383	-0.00852	0.11323	-7.06689
7	-0.00503	-0.00354	-0.01235	0.14293	-0.01010	-6.88869
8	-0.00282	0.00253	-0.01457	0.17958	0.01077	-7.22727
9	-0.00369	0.18202	0.02040	-0.00357	0.11177	-7.06634
10	0.00150	0.15913	0.06642	-0.02081	0.11389	-7.09005
11	-0.00080	0.18071	0.03604	-0.01323	0.11743	-7.08835
12	0.00557	0.08743	0.06201	-0.02349	0.11739	-6.68226
13	-0.00463	0.00159	0.04361	0.16185	-0.03077	-7.18576
14	0.00011	0.11648	0.10319	-0.01778	0.11358	-7.11955
15	0.00006	0.18442	-0.00515	-0.00018	0.11596	-7.08422
16	-0.00302	0.02811	-0.06469	0.16459	0.04824	-7.20660
17	-0.00083	-0.00829	0.13835	0.00363	0.10741	-7.12997
18	-0.00060	0.06047	0.12738	-0.01656	0.11009	-7.11822
19	-0.01224	0.08995	0.10057	-0.03055	0.09112	-7.09850
20	0.00288	0.15067	0.07275	-0.01747	0.11878	-7.08791
21	-0.00580	0.09725	-0.09248	0.10967	0.09224	-7.13994
22	-0.00238	0.00124	-0.02265	0.17781	0.01427	-7.22554
23	-0.00133	0.04854	0.12852	-0.01225	0.10635	-7.11934
24	-0.00886	0.15897	0.05060	0.04663	-0.09938	-6.99965
25	0.00058	0.16826	-0.05883	-0.01671	-0.11801	-7.08172
26	-0.00200	0.05058	0.13409	-0.01140	0.10740	-7.12367
27	-0.00400	0.00292	-0.02222	0.17534	0.01581	-7.22334

TAB. 5.2 – *Résultats de la minimisation de l'énergie totale sur les déformations α_{30}, α_{31}, α_{32} et α_{33}. Le tableau donne les points d'arrêt de la procédure de minimisation.*

Un autre aspect intéressant de ce type de calcul est d'observer l'évolution des minima en fonction de Z ou N. Le noyau ^{80}Zr est relativement proche du noyau doublement magique ^{90}Zr, et nous avons donc produit le même type de figures que la figure 5.13 pour les isotopes de Zr allant de $N = 40$ à $N = 50$. Les résultats sont présentés sur les figures 5.21-5.24 des pages suivantes.

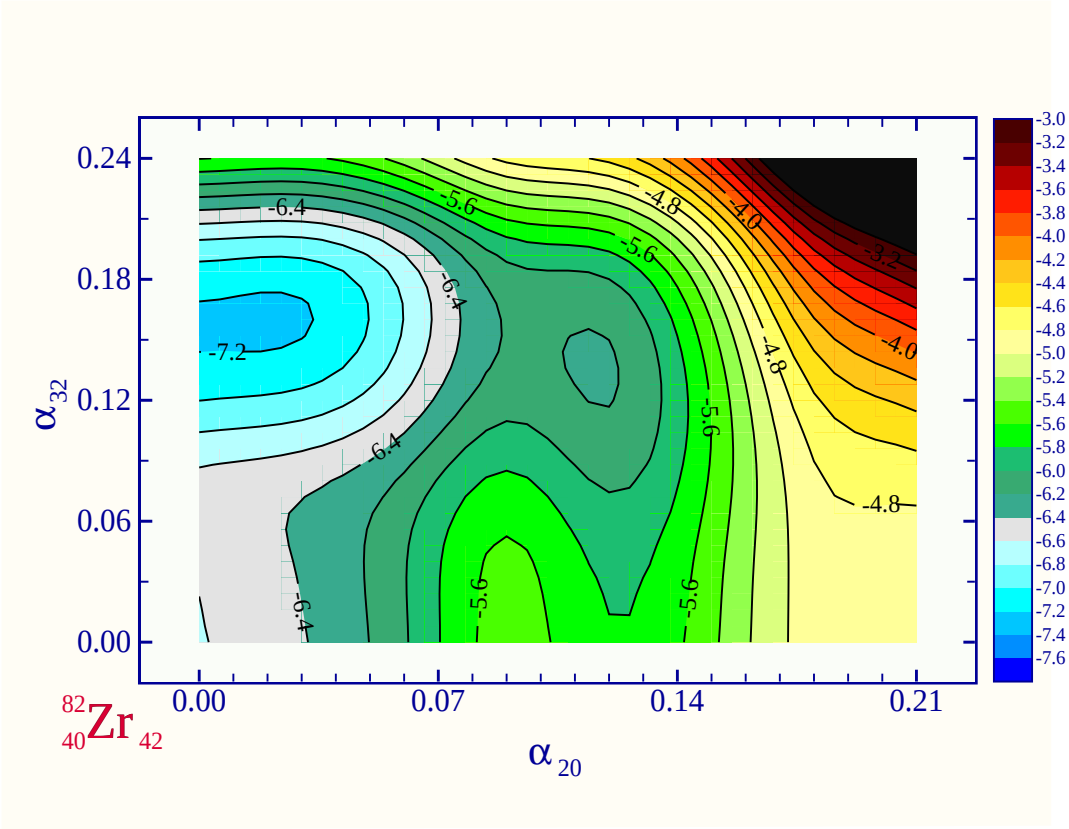


FIG. 5.20 – *Surface d'énergie totale pour* ^{82}Zr *(surface à comparer avec 5.13).*

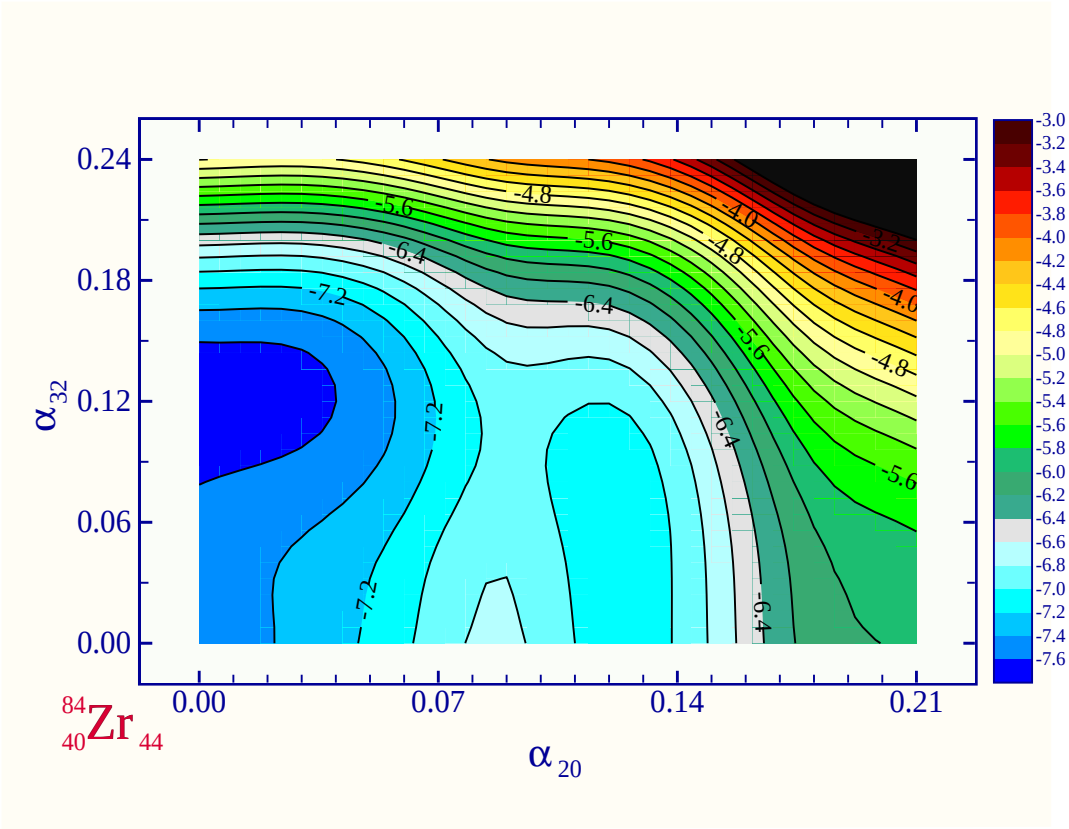


FIG. 5.21 – *Surface d'énergie totale pour* ^{84}Zr.

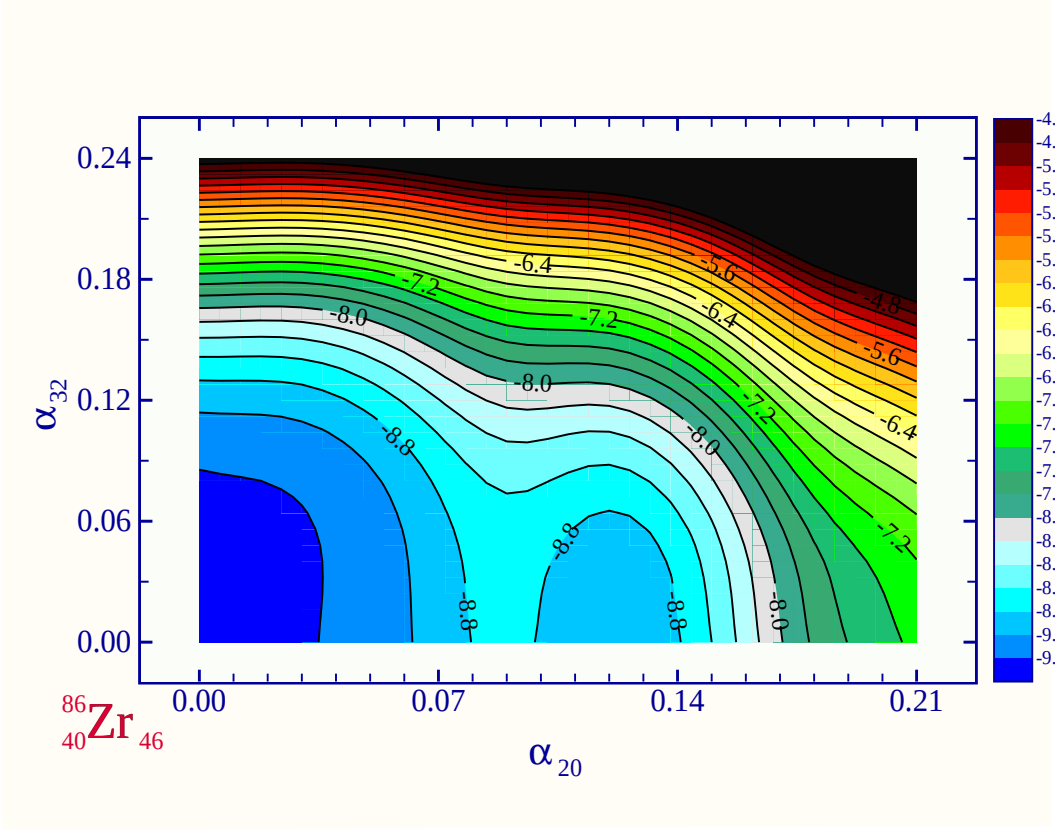


FIG. 5.22 – *Surface d'énergie totale pour* ^{86}Zr.

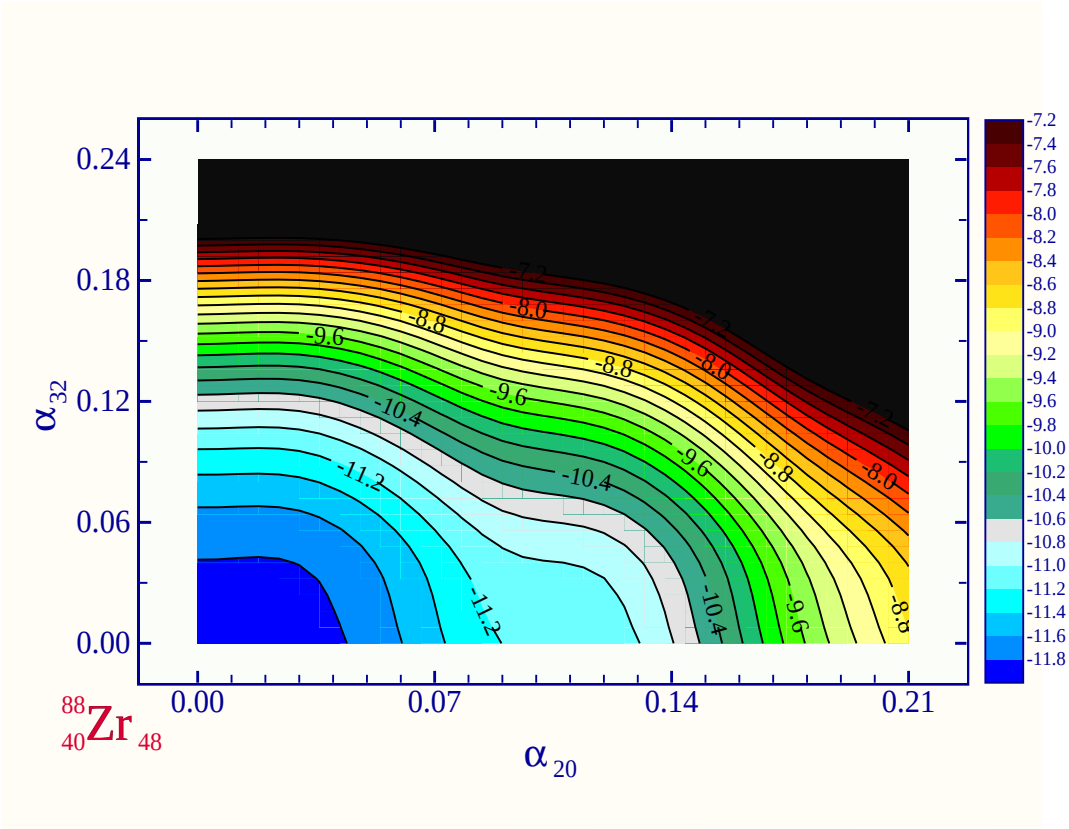


FIG. 5.23 – *Surface d'énergie totale pour* ^{88}Zr.

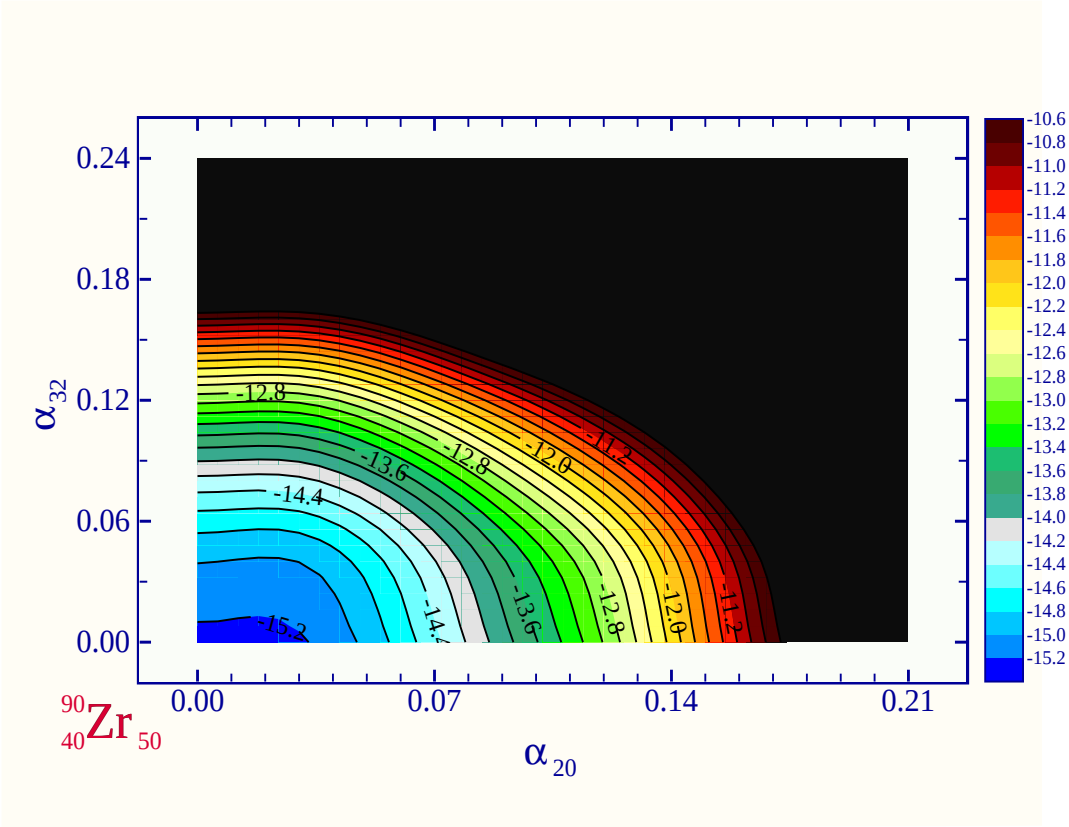


FIG. 5.24 – *Surface d'énergie totale pour* ^{90}Zr.

On peut observer sur les figures précédentes la progression des isotopes de Zr vers la forme sphérique. Les premiers isotopes ^{80}Zr et ^{82}Zr présentent un minimum octupolaire prononcé autour de $\alpha_{32} \sim 0.16$. Ce minimum se déplace vers $\alpha_{32} \sim 0.12$ (figure 5.21) pour ^{84}Zr cependant qu'une très légère instabilité quadrupolaire commence à se manifester vers $\alpha_{20} \sim 0.12$. Dans ^{86}Zr, le minimum sphérique commence à se manifester, mais il existe toujours une faible instabilité quadrupolaire. Notons également que la courbure de la surface devient progressivement plus prononcée. Le noyau ^{88}Zr est presque sphérique, même s'il reste une trace de la petite instabilité quadrupolaire. La première conclusion à tirer de ces résultats est que les déformations axiales $\alpha_{\lambda 0}$ ne suffisent généralement pas pour étudier les diverses instabilités présentes dans les noyaux. Il est nécessaire d'inclure d'autres déformations avec $\mu \neq 0$. La deuxième conclusion est que les noyaux atomiques peuvent également présenter la symétrie du tétraèdre, qui apparaît souvent dans d'autres domaines de la physique (chimie, physique moléculaire, etc.).

Terminons par une petite difficulté d'ordre à la fois théorique et pratique : si l'on étudie la coexistence de plusieurs déformations d'ordre multipolaire *différents* (par exemple $\lambda = 2$ avec $\lambda = 4$, etc.), alors il n'y a pas correspondance bi-univoque $\alpha_{\lambda\mu} \rightarrow R(\theta, \varphi)$. En d'autres termes, à une même géométrie de la surface peuvent correspondre plusieurs valeurs différentes des paramètres de déformation. Diverses paramétrisations ont été construites de façon à éviter cette ambivalence [Roh96]. L'inconvénient majeur de ces approches vient de ce qu'il n'existe pas de paramétrisation « universelle » et univoque en même temps de la surface. Autrement dit, à une surface ayant les degrés de liberté $(\alpha_{2\mu}, \alpha_{4\mu})$ correspond une certaine paramétrisation univoque, pour une surface ayant les degrés de liberté $(\alpha_{2\mu}, \alpha_{3\mu})$, la

paramétrisation univoque sera différente (voir [But96] et les références citées). Pour éviter ces difficultés, le code WS-ODD repose sur la paramétrisation standard (5.1), et donc certains minima peuvent apparaître plusieurs fois dans les cas spéciaux discutés ci-dessus. Cela ne présente guère de difficultés tant que nous ne couplons pas des déformations différentes.

d) Brisure de parité

Nous avons vu que les déformations octupolaires avaient de curieuses conséquences sur les niveaux individuels, avec notamment l'apparition de dégénérescences quadruples dans le cas de α_{32}. Mais il y a un autre point qui mérite d'être mentionné. Toutes les déformations de type octupolaire brisent la symétrie de parité dans le référentiel du noyau. Par conséquent, le nombre quantique associé n'est plus conservé et les fonctions d'onde individuelles sont des *mélanges* de composantes à parité positive et d'autres à parité négative. On s'attend donc à ce que la parité moyenne totale d'un état individuel soit proche de 0. Dans toutes les figures précédentes, les nombres placés à gauche des labels de Nilsson représentent précisément la valeur moyenne en pourcentage de l'opérateur de parité sur les états individuels correspondants, qui démontrent la remarque précédente. Les noyaux ayant une déformation octupolaire présentent donc un mécanisme fascinant de *brisure spontanée de symétrie*, en l'occurence celle de la parité.

Ce type de phénomène est, d'une certaine façon, une caractéristique des théories de champ moyen. Dans le cadre de cette approximation, il est nécessaire de briser des symétries que l'on sait devoir être présentes (invariance par rotation, par translation, conservation du nombre de particules, parité), pour l'unique raison qu'il s'agit du seul moyen de reproduire les données expérimentales. Par exemple, pour reproduire un grand BE2, il faut supposer que le noyau se déforme, spontanément, et donc détruit l'invariance rotationnelle initiale. Sur un plan strictement mathématique et conceptuel, c'est incontestablement une faiblesse de ce type d'approche, mais on peut également plaider que ces brisures de symétrie aident à mieux comprendre empiriquement ce qui se passe dans un noyau. De la même façon qu'on imagine souvent le spin comme associé à une toupie, ce qui est totalement faux, on peut se représenter le noyau comme un objet déformé - ce qui permet d'expliquer les probabilités de transition de type E2 - alors qu'en toute rigueur, le noyau est strictement sphérique.

5.3.3 De nouvelles perspectives pour les noyaux super-lourds

Les recherches sur les éléments super-lourds contituent à l'heure actuelle l'un des défis les plus excitants posés à la communauté des physiciens nucléaires, tant sur le plan théorique qu'expérimental. Les dernières découvertes d'éléments super-lourds laissent espérer que la prochaine île de stabilité pourrait bientôt être atteinte. Sur le plan théorique, le domaine des super-lourds (tout du moins des noyaux dont la masse est supérieure de quelques unités aux derniers noyaux connus) est un peu une *terra incognita* : on ne peut guère dire à l'heure actuelle si les prédictions théoriques fondées sur des approches de champ moyen seront correctes ou non. Cette incertitude vient de ce que ces théories reposent toutes sur un certain nombre de paramètres libres, qui sont ajustés sur les données expérimentales (que ce soit

les paramètres des interactions effectives dans les théories Hartree-Fock, les constantes de couplage méson-nucléon dans la théorie RMF ou les paramètres des potentiels dans les théories phénoménologiques). Ainsi, tous les modèles utilisés en physique nucléaire sont capables de prédire les gaps magiques connus, mais les résultats des calculs effectués dans les noyaux super-lourds (qui nécessitent donc une *extrapolation*) diffèrent suivant les approches. Les théories auto-cohérentes Skyrme-Hartree-Fock prédisent essentiellement deux combinaisons de nombres magiques possibles : $Z = 114, N = 184$ et $Z = 126, N = 184$. La théorie RMF prédit elle : $Z = 120, N = 172$. Quant aux approches phénoménologiques fondées sur un calcul « microscopique + macroscopique », ils s'accordent en général sur les valeurs $Z = 114, N = 184$ (voir [Rei00] pour une revue des résutats Hartree-Fock et RMF, ainsi que [Sob01] pour les calculs micro+macro).

A titre d'exemple, nous présentons trois candidats possibles pour les prochains nombres magiques, à savoir $Z = 114, N = 184$, $Z = 120, N = 184$, $Z = 126, N = 184$. Il semble bien assuré que le nombre de neutrons $N = 184$ corresponde à un nombre magique, puisque seuls les calculs RMF prédisent une valeur différente. Néanmoins, un certain flou demeure quant aux valeurs correctes du nombre de protons. Les calculs micro+macro classiques avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon et la paramétrisation universelle conduisent aux résultats présentés sur les figures 5.25-5.27. Il semble que le meilleur candidat soit l'élément $Z = 114$, ce qui confirme les calculs de [Sob01].

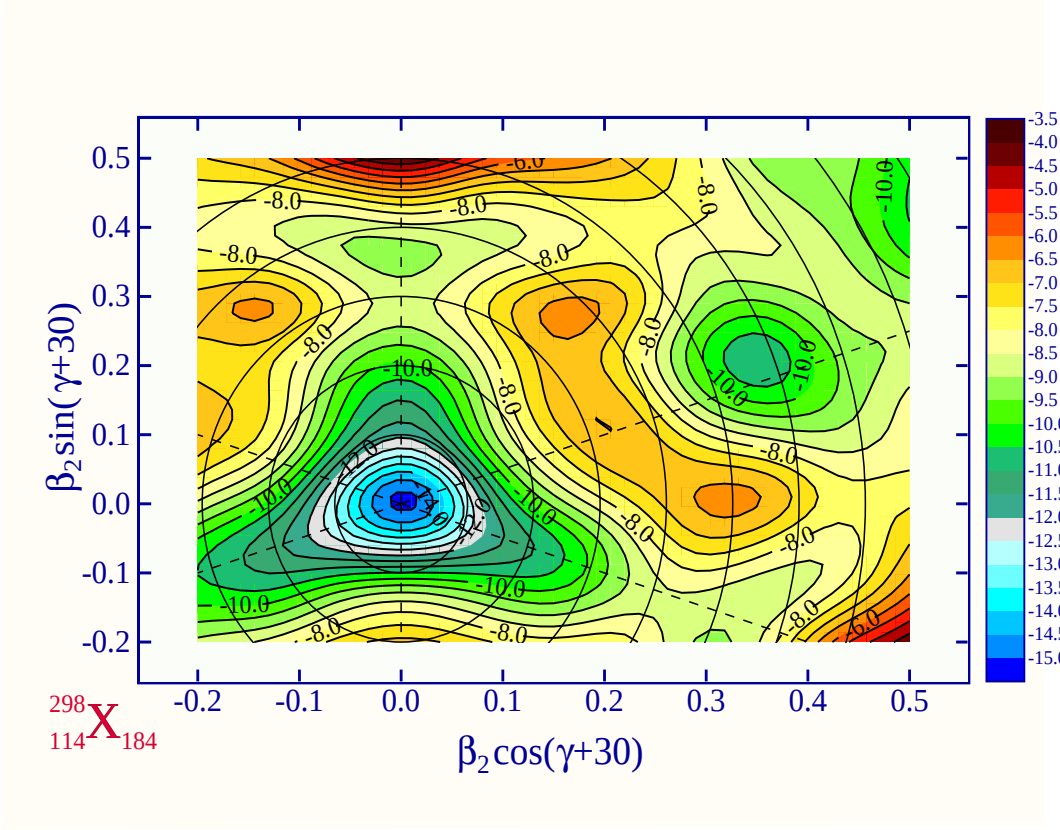


FIG. 5.25 – *Carte* (β, γ) *du noyau* $Z = 114, N = 184$ *avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon. Les cercles correspondent à* $\beta =$*cste et les lignes à* $\gamma = n \cdot 60°$. *L'énergie est minimisée par rapport à* α_{40}.

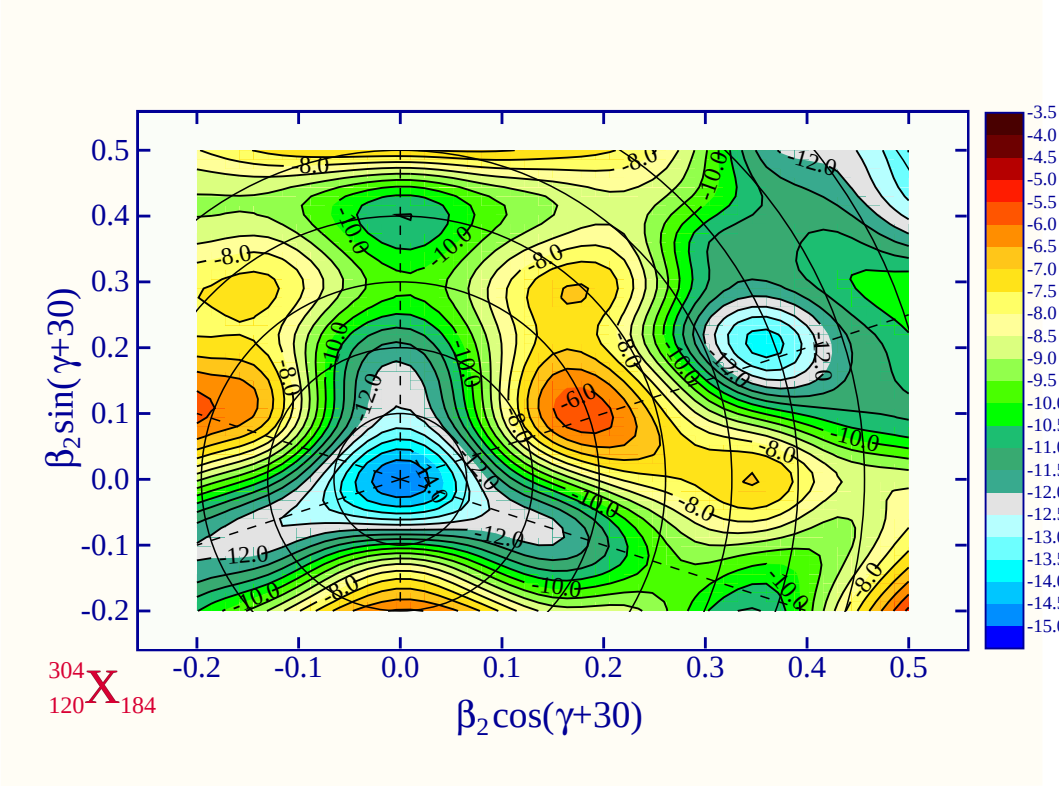


FIG. 5.26 – *Carte* (β, γ) *du noyau* $Z = 120, N = 184$ *avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon.*

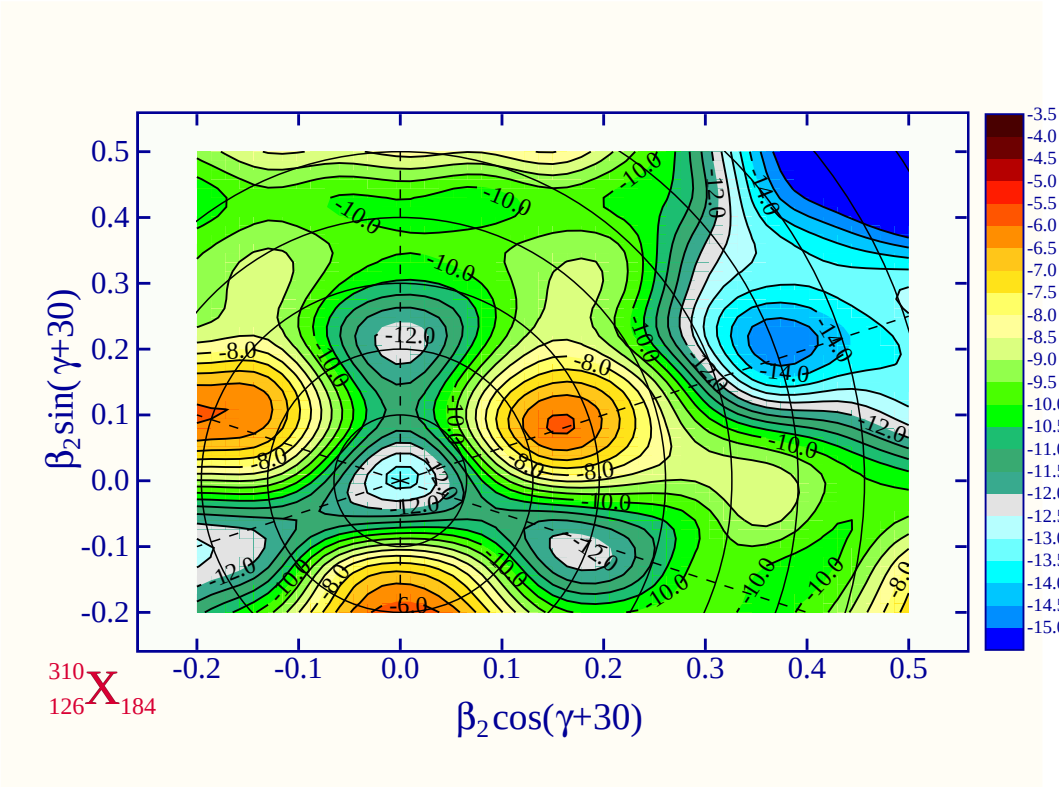


FIG. 5.27 – *Carte* (β, γ) *du noyau* $Z = 126, N = 184$ *avec l'hamiltonien non-relativiste de Woods-Saxon. Les cercles correspondent à* β *=cste et les lignes à* $\gamma = n \cdot 60°$.

Répétons-le, il est souvent attendu dans tous les calculs d'énergie totale que les noyaux super-lourds soient sphériques. [Sob01] a certes fait des calculs de déformation (dans le cadre d'un modèle micro+macro avec un hamiltonien non relativiste de Woods-Saxon), mais il n'a été considéré que des déformations axiales, du type $\alpha_{\lambda 0}$. Or nous avons vu précédémment, au sujet des déformations octupolaires, que certains minima pouvaient survenir dans des configurations où plusieurs paramètres de déformation étaient simultanément non-nuls. Il nous semble donc important de prendre également en compte les déformations non axiales. Par ailleurs, nous avons également montré que la déformation α_{32} se prêtait bien à l'apparition de nouveaux gaps magiques en raison de la structure particulière de ses représentations irréductibles. Par conséquent, il pourrait être envisageable que des gaps magiques apparaissent dans la région des super-lourds pour de fortes déformations octupolaires.

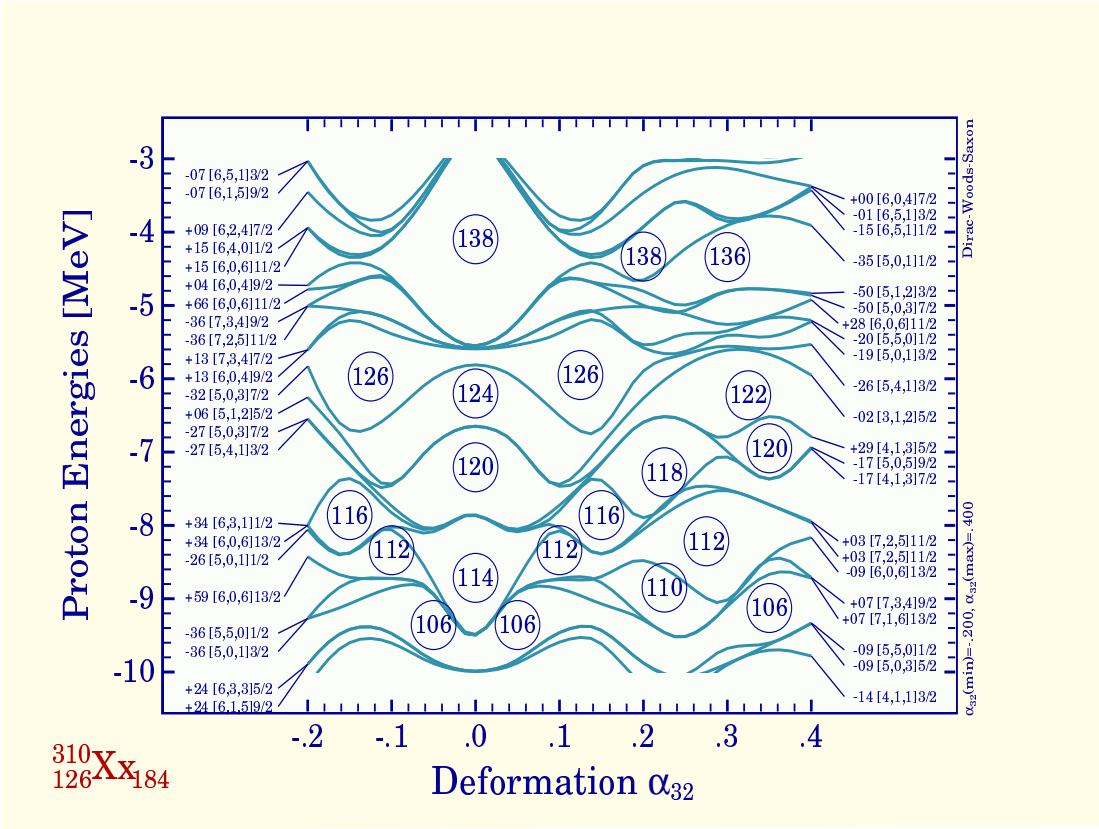


FIG. 5.28 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels autour de* $Z = 126, N = 184$ *en fonction de la déformation octupolaire* α_{32} *pour les protons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0. Les nombres indiqués à gauche des labels de Nilsson correspondent à la parité moyenne de l'état individuel.*

La figure 5.28 présente les résultats obtenus dans la région des super-lourds (le calcul des niveaux individuels étant fait pour le noyau $Z = 126, N = 184$), avec l'hamiltonien de Dirac. Comme il avait été souligné précédemment, la déformation α_{32}, par la structure particulière des niveaux individuels qu'elle induit (dégénérescences 4) est très favorable à l'apparition de gaps magiques. On voit sur la figure 5.28 que certains gaps magiques, notamment, $Z = 112$ pour $\alpha_{32} \sim 0.25$ ou $Z = 126$ pour $\alpha_{32} \sim 0.15$ sont *plus grands* que les gaps sphériques, et ces gaps apparaissent pour des déformations importantes. Ces

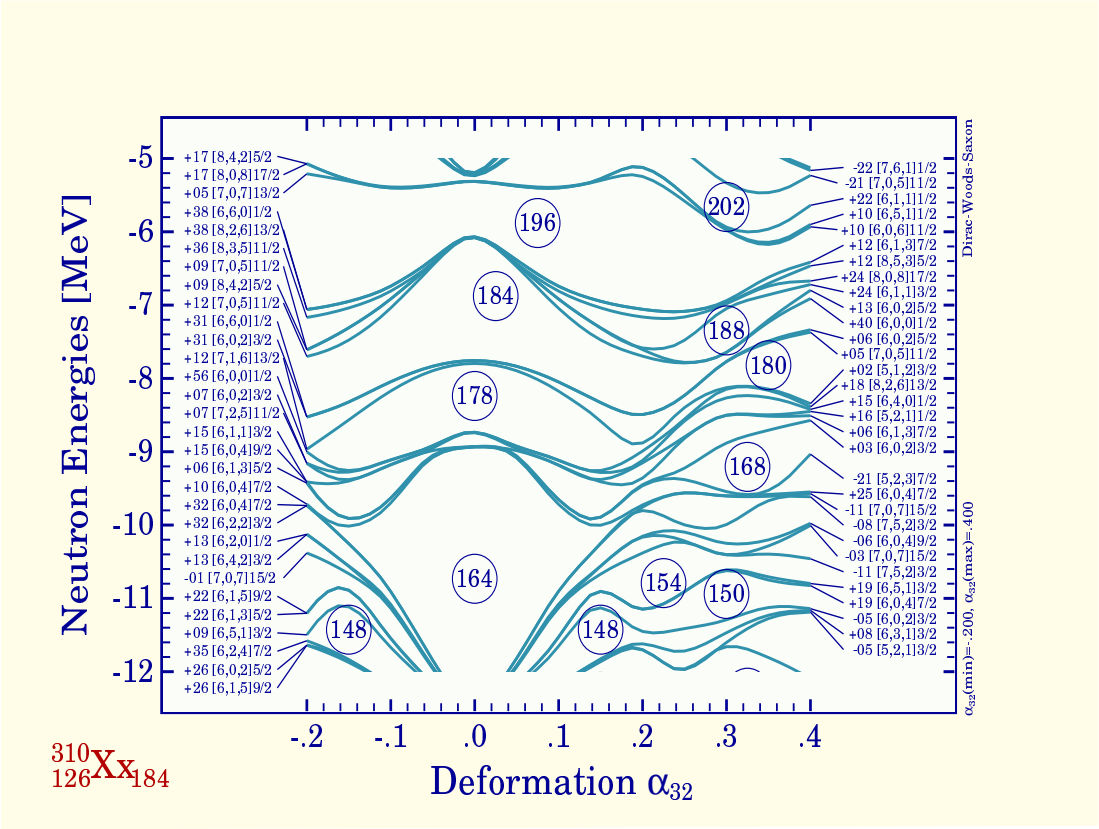


FIG. 5.29 – *Evolution des niveaux d'énergie individuels autour de* $Z = 126, N = 184$ *en fonction de la déformation octupolaire* α_{32} *pour les neutrons. Tous les autres paramètres de déformation sont fixés à 0. Les nombres indiqués à gauche des labels de Nilsson correspondent à la parité moyenne de l'état individuel.*

remarques se retrouvent dans la figure 5.29, où le gap $N = 196$ est, pour $\alpha_{32} \sim 0.20$, largement plus grand que le gap sphérique $N = 184$. Ces figures suggèrent que le noyau ${}^{322}_{126}X_{196}$ pourrait être un excellent candidat à la présence de déformations octupolaires de type α_{32} dans l'état fondamental. Naturellement, l'évolution des niveaux individuels en focntion de la déformation ne reflète que la modification de la structure en couches du noyau, et ne tient pas compte de l'énergie macroscopique, qui tend plutôt à s'opposer à des surfaces de multipolarité élevée (puisque dans ce cas l'énergie de surface augmente).

Aussi avons-nous commencé l'étude des surfaces d'énergie totale en fonction de la déformation α_{32} dans la région des super-lourds. Les figures 5.30 et 5.31 ne constituent que des résultats préliminaires, et il sera sans aucun doute nécessaire de tester et vérifier minutieusement leur validité, mais il est néanmoins très intéressant de remarquer à quel point le minimum octupolaire dans ${}^{322}_{126}X_{196}$ est prononcé. Sur la figure 5.31, la barrière de potentiel peut être estimée à plusieurs MeV ! L'étape suivante consistera à inclure dans le calcul l'influence d'autres déformations, par exemple en minimisant chaque point de la figure 5.31 en fonction d'autres déformations (les $\alpha_{4\mu}$, les $\alpha_{5\mu}$, etc.). Cette étape sera nécessaire pour s'assurer de l'existence réelle d'un minimum « tétraédral ».

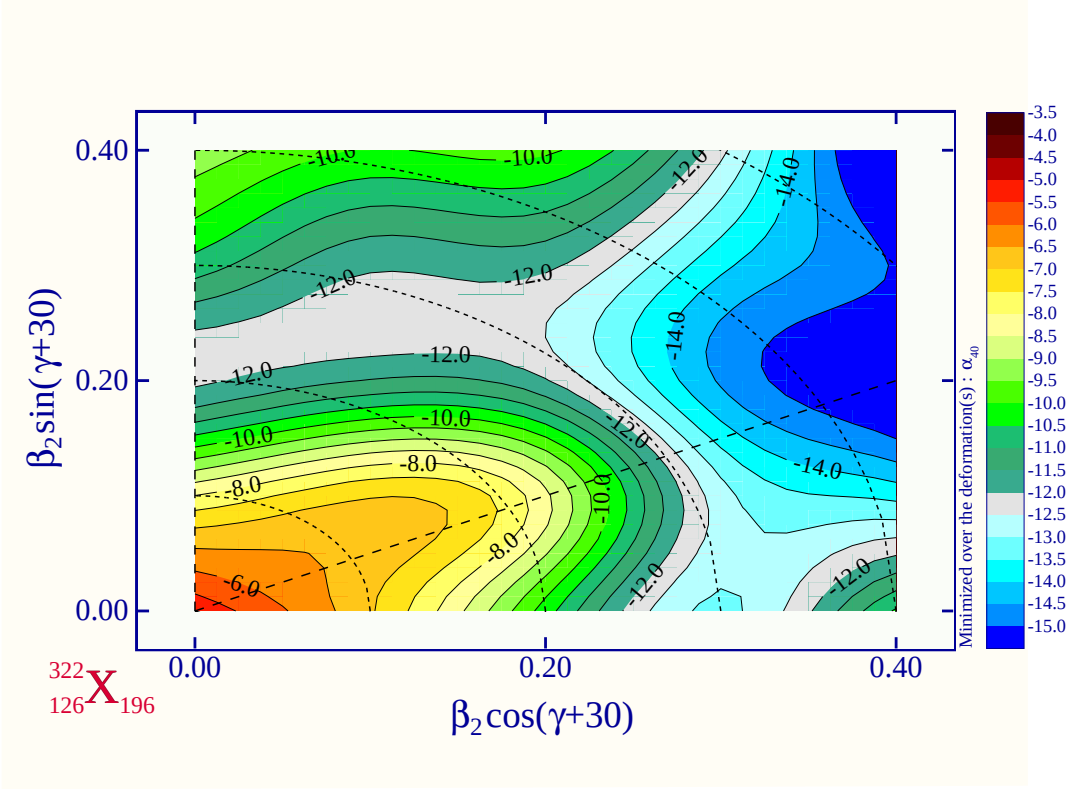


FIG. 5.30 – *Carte* (β, γ) *de l'énergie totale du noyau* ${}^{322}_{126}X_{196}$

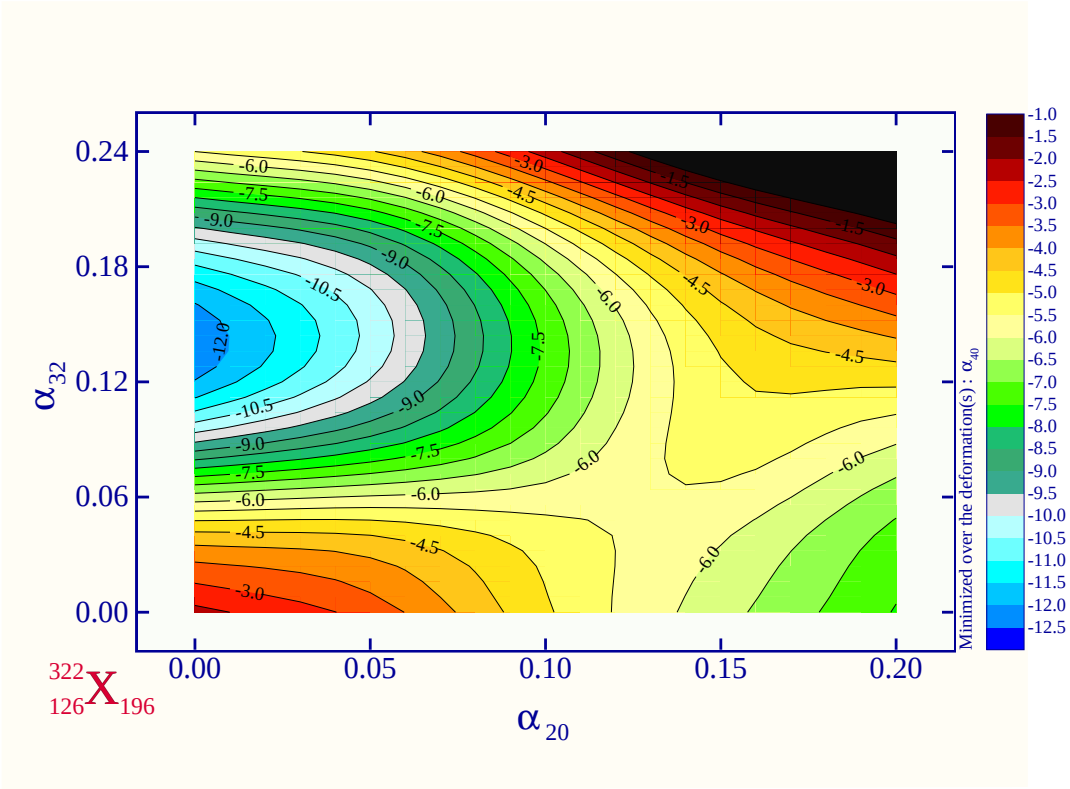


FIG. 5.31 – *Carte de l'énergie totale du noyau* ${}^{322}_{126}X_{196}$ *en fonction de l'élongation quadrupolaire* α_{20} *et de la déformation octupolaire* α_{32}

Conclusion

Nous avons présenté dans cette thèse un nouvel hamiltonien réaliste apte à décrire les propriétés de particules individuelles dans les noyaux atomiques. Cet hamiltonien se construit à partir de la théorie du champ moyen relativiste, c'est-à-dire qu'il se situe naturellement dans le cadre du formalisme de Dirac (covariance relativiste *ab initio*, description naturelle du spin des nucléons, et donc du potentiel spin-orbite, etc., mais les calculs sont ici effectués dans un référentiel particulier pour des raisons pratiques). La diagonalisation de cet hamiltonien se fait directement et non d'après une approche auto-cohérente, ce qui signifie que ce sont les paramètres des potentiels qui doivent être ajustés sur les données expérimentales, et non les constantes de couplage méson-nucléon. Comme nous souhaitions obtenir l'hamiltonien à une particule le plus performant possible, nous avons utilisé comme observables les niveaux d'énergie individuels dans les noyaux sphériques doublement magiques, ainsi que les rayons carrés moyens. L'application du modèle aux noyaux déformés se fait *via* une dépendance en isospin et en masse des paramètres des potentiels qui est également proposée dans ce travail.

La détermination des paramètres des potentiels s'est faite selon une procédure semi-automatisée faisant appel à des techniques de minimisation multidimensionnelle. Les résultats concernant les niveaux d'énergie individuels sont en général meilleurs que ceux obtenus par la théorie RMF ou ceux des théories Hartree-Fock non-relativistes. L'accord sur les rayons carrés moyens est lui aussi inférieur à 1-2%, ce qui est comparable à la précision d'autres méthodes. Plus intéressant encore, la répartition globale des niveaux dans le puits de potentiel nucléaire est en bien meilleur accord avec l'expérience qu'elle ne l'est dans le cas des hamiltoniens semi-phénoménologiques de type Woods-Saxon. Le passage vers la déformation confirme la stabilité de cette approche puisque les statistiques portant sur les spins et parités des têtes de bandes rotationnelles sont très satisfaisantes. L'utilisation de cet hamiltonien dans les noyaux superdéformés de la masse $A \sim 150$ a permis de reproduire avec une précision meilleure que dans les modèles traditionnels des observables telles que le moment $\mathfrak{J}^{(2)}$ ou l'alignement effectif. Mais le point le plus satisfaisant est sans conteste que notre approche a permis de comprendre et d'expliquer les erreurs systématiques faites auparavant, dans les théories non-relativistes, où l'appariement doit systématiquement être négligé pour que les résultats reproduisent l'expérience, comme dans la théorie RMF où une mauvaise description de la position des niveaux individuels se répercute sur les propriétés à hauts-spins et doit être compensée par le mécanisme de magnétisme nucléaire et/ou par de fortes corrélations d'appariement.

Dans cette perspective, l'un des apports les plus originaux de notre approche est cer-

tainement l'explication du « fonctionnement » de l'hamiltonien à une particule dans le cadre du formalisme de Dirac, notamment du rôle respectif joué par les différents potentiels que sont le potentiel spin-orbite, le potentiel linéaire en $\vec{p}$ ou la masse effective. Il avait souvent été prétendu que la présence de cette masse effective dans les théories relativistes devait expliquer la mauvaise densité de niveaux au voisinage du niveau de Fermi (alors même que les théories Hartree-Fock avec l'interaction de Skyrme contiennent également ce mécanisme sans que cela perturbe trop cette densité de niveaux). Nous avons montré, en construisant un modèle relativiste et donc avec masse effective, qu'il était tout à fait possible d'obtenir une densité de niveaux presque parfaite, ce qui implique que ce n'est *pas* la masse effective qui est responsable de ce problème. De la même façon, de nombreuses publications ont souligné l'importance du terme de magnétisme nucléaire dans la théorie RMF pour toutes les applications de physique des hauts-spins. Or sans ce terme, nos calculs de moments $\mathfrak{J}^{(1)}$ et $\mathfrak{J}^{(2)}$ ainsi que d'alignement effectif sont tout à fait conformes à l'expérience. Qui plus est, nous avons montré que la structure de l'hamiltonien, et en particulier la forme mathématique du potentiel spin-orbite avec masse effective produisait deux familles indépendantes de paramètres capable chacune de reproduire les gaps magiques dans les noyaux sphériques. En appliquant ces résultats aux noyaux en rotation, nous avons pu *reproduire* les résultats de la théorie RMF. Ainsi, nous avons mis en évidence de cette manière qu'il pouvait exister des paramétrisations de l'hamiltonien très différentes les unes des autres, mais qui toutes reproduisent *plus ou moins précisément* les spectres individuels. Cependant, seule la paramétrisation la plus précise permet de reproduire l'ensemble des propriétés des noyaux sans hypothèse supplémentaire. Cette ambivalence cachée de l'hamiltonien de Dirac était inconnue jusqu'à ce jour.

Plusieurs extensions à nos travaux sont immédiatement envisageables. Pour tester une fois de plus la stabilité de notre paramétrisation, il pourrait être instructif d'inclure un couplage aux vibrations de type RPA. Les corrections attendues sont de l'ordre, au maximum, de quelques centaines de keV, ce qui ne devrait pas perturber trop la qualité de notre hamiltonien. Les études de la superdéformation n'ont pas été exhaustives : de nombreuses données expérimentales existent dans ce domaine, et nous pouvons envisager rapidement de faire quelques systématiques dans plusieurs régions de masse différentes, tant pour les bandes Yrast que pour les bandes excitées. De la même façon, nous n'avons pas présenté par manque de temps et de place de calculs d'énergie totale pour les éléments super-lourds avec l'hamiltonien de Dirac, mais ce type d'analyses est immédiatement envisageable et déjà engagé. Dans le même ordre d'idée, il nous sera bientôt possible de calculer les « surfaces de routhien totales ». Les programmes correspondant sont déjà opérationnels et nous n'avons présenté dans cette thèse que quelques-uns des résultats obtenus en choisissant de mettre l'accent sur les points les plus importants.

A un peu plus long terme, il nous semble qu'avec un hamiltonien réaliste comme l'est celui que nous avons présenté, il serait possible d'étudier avec beaucoup de finesse l'appariement dans les noyaux en rotation. Il est prévu à moyen terme de calculer les corrélations d'appariement, non pas selon la théorie BCS comme actuellement, mais selon une méthode Dirac-Bogoliubov avec projection du nombre de particules (avant variation). La combinaison de cette méthode performante et d'une description précise des propriétés à une particule permettrait peut-être de mieux comprendre l'inertie des noyaux et le rôle exact des corrélations d'appariement dans les noyaux en rotation, phénomènes pour lesquels les

interprétations théoriques divergent souvent.

Mais surtout, nous n'avons, dans le chapitre 5, fait qu'esquisser l'influence des déformations exotiques sur les états fondamentaux. Il y a des liens très forts entre la théorie des groupes de symétrie et les dégénérescences individuelles, ainsi qu'entre les déformations des noyaux et leur signature expérimentale sous forme de décroissance γ. L'étude de ces nouvelles déformations reste encore largement à faire, et des propriétés pour l'instant seulement théoriques comme la dégénérescence quadruple des niveaux d'énergies ou les mélanges de parité doivent faire l'objet de recherches en liaison avec l'expérience. Ces études auront probalement des conséquences concrètes immédiates, puisqu'il apparaît déjà que l'état fondamental des noyaux super-lourds pourraient fort bien être, non pas sphérique comme il est généralement supposé, mais déformé. De plus, les calculs préliminaires indiquent que les déformations impliquées sont précisément des déformations octupolaires telles que α_{32} correspondant à la symétrie T_d (le groupe de symétrie du tétraèdre), ou bien des combinaisons de diverses déformations $\alpha_{3\mu}$, et non pas nécessairement la déformation quadrupolaire. Par ailleurs, le mécanisme présidant à l'apparition de telles déformations est très général, et repose exclusivement sur les résultats de la théorie des groupes : de telles déformations peuvent donc apparaître ailleurs que dans la région des éléments super-lourds, et les calculs sont actuellement en cours pour déterminer les meilleurs candidats à de telles symétries.

A. Le couplage « Particle+Rotor »

A.1 INTRODUCTION

Nous avons présenté dans le chapitre 5 des résultats tendant à prouver que de fortes déformations octupolaires statiques peuvent exister dans l'état fondamental des noyaux. Ces déformations présentent la particularité de briser la symétrie par parité, ce qui entraîne comme conséquence que les états individuels sont des mélanges presque parfaits d'états à parité positive et d'états à parité négative. Cependant, expérimentalement, la parité *est* conservée, et elle est même déterminée tous les jours dans les bandes rotationnelles. La question est donc : ces résultats sont-ils contradictoires, et sinon, comment se traduit la brisure de parité des états individuels dans la « réalité » ?

L'une des réponses possibles trouve sa source dans le modèle dit particle + rotor, dans lequel, comme le nom l'indique, le noyau est vu comme un rotateur quantique contenant des particules dont le mouvement se couple à celui du rotateur. Cette approche a été proposée par Bohr et Mottelson [Boh69], et elle permet de comprendre dans les grandes lignes certaines des caractéristiques les plus marquantes des bandes rotationnelles. Nous verrons ainsi que c'est dans le cadre de ce modèle que l'on peut faire coïncider le spin du dernier niveau occupé avec la tête de bande rotationnelle. Nous essaierons également d'expliquer brièvement comment la déformation du champ moyen se répercute sur les séquences de niveaux d'une bande rotationnelle.

A.2 HYPOTHÈSES GÉNÉRALES

Comme il a été dit en introduction, le modèle particle + rotor décrit le couplage entre un mouvement de rotation collective, caractérisé par un certain moment angulaire total I, et le mouvement individuel des nucléons dans un puits de potentiel, les nucléons étant eux caractérisés entièrement par leurs énergies propres et leurs fonctions d'onde. Il est de coutume de diviser le noyau en deux entités distinctes : un *cœur inerte* qui est en rotation collective, et un ensemble d'un ou plusieurs nucléons qui se déplacent dans un potentiel déformé, les particules de *valence*. Il est d'usage de prendre comme cœur l'ensemble de tous les nucléons occupant des couches pleines, et comme particules de valence les derniers nucléons. Dans le cas des noyaux impairs, on considère même souvent qu'il n'y a qu'un seul nucléon de valence : celui qui n'est pas apparié.

A.2.1 Hamiltonien du système

Suivant la distinction entre cœur et nucléons de valence, l'hamiltonien total du noyau se décompose en la somme de deux termes :

$$H = H_{coll} + H_{intr} \tag{A.1}$$

où :

- H_{coll} est le terme collectif décrivant la rotation (collective, du noyau dans son ensemble) autour d'un axe donné :

$$H_{coll} = \sum_{k=1}^{3} \frac{\vec{R}_k^2}{2\Im_k} \tag{A.2}$$

  les $\Im_k$ sont les moments d'inertie autour de chacun des axes du repère et les R_k sont les composantes du moment angulaire collectif total dans le référentiel du laboratoire.

- H_{intr} est le terme « intrinsèque », décrivant le mouvement d'un nucléon dans un potentiel déformé :

$$H_{intr} = \sum_i e_i \, c_i^\dagger c_i + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl} \, c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l \tag{A.3}$$

  La relation (A.3) représente la forme la plus générale possible pour un hamiltonien de champ moyen avec des corrélations à deux corps. Dans la pratique, naturellement, l'hamiltonien intrinsèque a une forme bien déterminée, et qui peut être différente de (A.3) : hamiltonien auto-cohérent de Hartree-Fock, ou de Hartree en théorie RMF, hamiltoniens phénoménologiques de Nilsson ou de Woods-Saxon, etc.

Le mouvement « total » du noyau est caractérisé par le couplage entre le mouvement de nature collective dû à la rotation et le mouvement individuel des nucléons dans le puits de potentiel nucléaire.

A.2.2 Notations

La fonction d'onde totale du noyau caractérisé par l'hamiltonien (A.1) est le produit d'une fonction d'onde « intrinsèque » Φ_α par une fonction d'onde collective $\Theta_{\alpha,I}$. Le symbole α désigne tous les nombres quantiques éventuellement nécessaires pour caractériser le système, qui a de plus un moment angulaire total I. On a donc :

$$\Psi_{\alpha,I} = \Phi_\alpha \Theta_{\alpha,I} \tag{A.4}$$

Traditionnellement, on introduit deux référentiels, l'un fixe, celui du laboratoire, l'autre tournant, un référentiel lié au noyau. Les coordonnées dans le référentiel du laboratoire seront notées x, y et z, tandis qu'elles seront notées x_1, x_2 et x_3 dans le référentiel tournant.

Le moment angulaire total $\vec{I}$ du noyau est la somme du moment angulaire de rotation collective $\vec{R}$, et de la somme de tous les moments angulaires des particules de valence $\vec{J}$:

$$\boxed{\vec{I} = \vec{R} + \vec{J}} \tag{A.5}$$

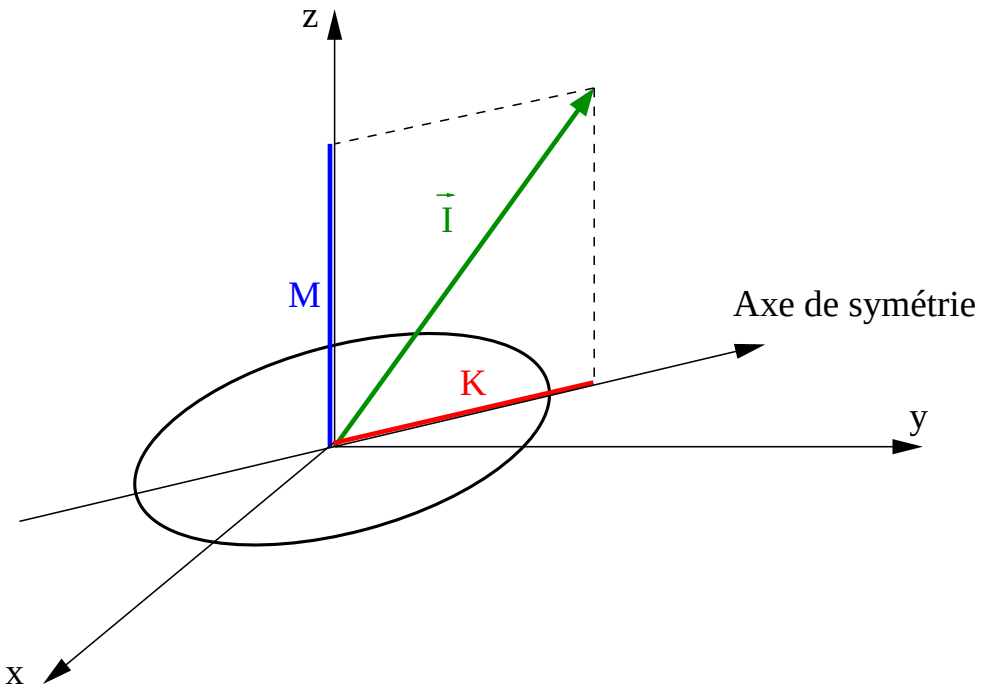


FIG. A.1 – *Signification des différents nombres quantiques associés au couplage entre mouvement individuel et rotation collective.*

avec :

$$\hat{\vec{J}} = \sum_{k}^{valence} \vec{j}_k \tag{A.6}$$

Naturellement, la quantité mesurée expérimentalement est le moment angulaire $\vec{I}$ (ou pour être plus précis, les valeurs propres I de $\vec{I}^2$). On note K la *projection* de $\vec{I}$ sur l'un des axes du référentiel tournant, et M celle sur l'un des axes du référentiel fixe (d'habitude $\mathcal{O}z$). Les trois opérateurs associés aux nombres quantiques I, K et M, à savoir $\vec{I}^2$, I_3 et I_z, forment un ensemble complet d'observables qui commutent, et l'on peut étiqueter les états nucléaires avec les nombres I, K et M. Le choix de ces nombres particuliers est en principe purement arbitraire, mais nous suivons ici la convention traditionnellement adoptée. La fonction d'onde *collective* s'écrira donc de façon générale Θ_{IKM}. Il s'ensuit que l'on a les propriétés suivantes :

$$\vec{I}^2|\Theta_{IKM}\rangle = I(I+1)|\Theta_{IKM}\rangle \tag{A.7}$$
$$\vec{I}_z|\Theta_{IKM}\rangle = M|\Theta_{IKM}\rangle \tag{A.8}$$
$$\vec{I}_3|\Theta_{IKM}\rangle = K|\Theta_{IKM}\rangle \tag{A.9}$$

Et l'on peut montrer que les fonctions d'onde collectives s'écrivent concrètement :

$$\Theta_{IKM}(\omega) = \sqrt{\frac{2I+1}{8\pi^2}}\,\mathcal{D}^I_{M,K}(\omega) \tag{A.10}$$

où les $\mathcal{D}^I_{M,K}$ sont les matrices de rotation de Wigner.

A.3 BANDES ROTATIONNELLES ET SYMETRIES

Nous avons présenté au chapitre 5 des résultats montrant la forte probabilité que des déformations octupolaires statiques importantes existent dans l'état fondamental des noyaux atomiques. L'une des principales caractéristiques de ces déformations est qu'elles brisent la symétrie par parité, de sorte que les fonctions d'onde individuelles deviennent des mélanges d'états à parité positive et d'états à parité négative. Or expérimentalement, une grandeur comme la déformation n'est pas *mesurable*, on peut seulement la *déduire*, notamment d'après les propriétés des bandes rotationnelles. Le but de cette section est de montrer rapidement la structure des bandes rotationnelles associées aux symétries les plus fréquentes que sont la parité/signature et le simplex (présentées au chapitre 4).

A.3.1 Parité et signature

Dans un premier temps, nous ferons l'hypothèse que le noyau possède un axe de symétrie que l'on notera $\mathcal{O}_3$, et qu'il reste invariant par rotation de 180° autour d'un axe perpendiculaire à son axe de symétrie, que l'on choisira de noter $\mathcal{O}_2$ (et qui sur la figure A.1 est confondu avec l'axe $\mathcal{O}z$). Un exemple de tel noyau est illustré sur la figure A.1.

a) Nombres K et labels de Nilsson

On sait que la rotation collective d'un noyau ne peut se faire autour d'un axe de symétrie. Par conséquent, la composante 3 de $\vec{R}$ s'annule :

$$\vec{R}_3 = 0$$

et pour la composante 3, l'équation (A.5) se réécrit donc :

$$\vec{I}_3 = \vec{J}_3 \tag{A.11}$$

Or, $\vec{J}_3$ n'est autre que la somme des moments angulaires individuels des nucléons de valence. Dans le cas des noyaux impairs (voir page 87), nous supposerons qu'il n'y a qu'un seul nucléon de valence, et donc $\vec{J}_3$ correspond à la composante z du moment angulaire individuel de ce nucléon célibataire dans le référentiel tournant du noyau, noté Ω dans le système des étiquettes de Nilsson. Donc la relation (A.11) devient en fait :

$$\boxed{K = \Omega} \tag{A.12}$$

La relation (A.12) a d'importantes conséquences pratiques. En effet, les labels de Nilsson des particules individuelles peuvent être calculés très aisément dans presque tous les modèles théoriques (donc on a accès au nombre Ω). De plus, le K d'une bande rotationnelle est une grandeur (relativement) facile à mesurer : c'est le moment angulaire de la bande rotationnelle la plus basse en énergie (qui correspond à la fin de la rotation collective : $R = 0$). En d'autres termes, les têtes de bandes rotationnelles permettent de tester la prédiction du spin et de la parité du nucléon célibataire dans les noyaux impairs, propriété qui a été utilisée dans le chapitre 3.

b) *Bandes* $\boldsymbol{K = 1/2}$

Une petite difficulté existe néanmoins pour les bandes construites sur des états individuels $K = 1/2$. En effet, on peut montrer (voir par exemple [Boh69]), que l'énergie d'une telle bande vaut :

$$E_{K=1/2}(I) = e_{K=1/2} + \frac{1}{2\mathfrak{J}}\left\{I(I+1) - \frac{1}{4} + a(-1)^{I+1/2}\left(I + \frac{1}{2}\right)\right\} \tag{A.13}$$

où $e_{K=1/2}$ est l'énergie de l'état individuel, I est le moment angulaire total et a est appelé le paramètre de découplage. Son expression est :

$$a = \langle \Phi_{K=1/2} |\ \hat{j}_+\ | \Phi_{K=1/2} \rangle \tag{A.14}$$

Pour les valeurs usuelles de ce nombre a, l'énergie la plus basse de la bande rotationnelle n'est pas $e_{K=1/2}$ mais l'expression (A.13) avec $I = 1/2$. L'origine de cette correction vient du couplage entre la rotation collective et le mouvement individuel des nucléons. Ce couplage se manifeste en introduisant la décomposition (A.5) dans l'expression (A.2) : des termes du type $\vec{I} \cdot \vec{j}$ apparaissent qui traduisent concrètement le couplage mouvement collectif-mouvement individuel (terme de Coriolis). Ces termes sont souvent nuls ou négligeables, sauf dans le cas $K = 1/2$, où ils sont maximums.

c) *Structure des bandes rotationnelles*

Nous nous plaçons dans le cas particulier où le noyau est invariant par rapport à une rotation de 180° autour d'un axe perpendiculaire à son axe de symétrie. Cette rotation est notée $\mathcal{R}$. Dans le cas où le noyau est en rotation, il faut distinguer l'opérateur $\mathcal{R}$ agissant sur la partie collective de la fonction d'onde, notons-le $\mathcal{R}_c$, de celui agissant sur la partie intrinsèque, disons $\mathcal{R}_i$. Le premier correspond à une rotation « dynamique », active, du noyau dans son ensemble. Le deuxième correspond par contre à une symétrie géométrique de la structure du puits de potentiel. L'invariance du noyau dans la transformation $\mathcal{R}$ se traduit donc, entre autres, par :

$$\mathcal{R}_i = \mathcal{R}_c \tag{A.15}$$

Par ailleurs, on sait que $\mathcal{R}^2 = +1$ pour un système contenant un nombre pair de fermions, et $\mathcal{R}^2 = -1$ pour un système en contenant un nombre impair. Or l'action de l'opérateur $\mathcal{R} = \mathcal{R}_c$ sur la partie collective de la fonction d'onde est bien connue, elle s'écrit :

$$\mathcal{R}\mathcal{D}^I_{M,K} = (-1)^{I+K}\mathcal{D}^I_{M,-K} \tag{A.16}$$

d'où l'on déduit :

$$\mathcal{R}^2 = r^2 = (-1)^{2I} \quad \Rightarrow \quad \boxed{r = (-1)^I} \tag{A.17}$$

où le nombre quantique r est la signature (conservée). Deux cas sont donc ici à distinguer :

Cas $K = 0$ - Ce cas correspond en fait aux noyaux pair-pair : la symétrie par renversement du temps (que l'on suppose conservée ici) implique que tous les niveaux sont dégénérés deux fois, les deux partenaires ayant des spins anti-parallèles. Par conséquent, la projection du moment angulaire total est nul, donc $\Omega = K = 0$. Dans ce cas, on doit avoir :

$$(-1)^{2I} = 1 \tag{A.18}$$

ce qui implique les séquences suivantes :

$$\boxed{\begin{array}{l} I = 0, 2, 4, \ldots \quad r = +1 \\ I = 1, 3, 5, \ldots \quad r = -1 \end{array}} \tag{A.19}$$

Le spin le plus bas possible est soit $I = 0$, soit $I = 1$, suivant la valeur de la signature.

Cas $K \neq 0$ - Ce cas correspond en fait à un noyau contenant un nombre impair de nucléons. Dans ce cas, le moment angulaire total du noyau (sans rotation) est donné par le spin du nucléon célibataire, $K = \Omega$, et l'on a :

$$(-1)^{2I} = -1 \tag{A.20}$$

ce qui implique :

$$\boxed{\begin{array}{l} I = \frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{9}{2}, \ldots \quad r = +i \\ I = \frac{3}{2}, \frac{7}{2}, \frac{11}{2} \ldots \quad r = -i \end{array}} \tag{A.21}$$

Le spin le plus bas possible est $I = K$.

A.3.2 Simplex

Nous supposons maintenant que le noyau possède une déformation telle que la parité et la signature ne sont pas conservées. La seule symétrie possible est la symétrie de simplex, c'est-à-dire que le noyau possède un plan de réflexion comme seul élément de symétrie. L'opérateur associé à cette réflexion est noté $\mathcal{S}$, et le nombre quantique conservé s. De façon générale, l'opération de simplex est le produit de la parité $\mathcal{P}$ par la signature $\mathcal{S}$:

$$\mathcal{S} = \mathcal{R}\mathcal{P} \tag{A.22}$$

Nous ne développerons ici que le cas des noyaux pair-pair (cas $K = 0$). Dans ce cas, l'état $K = 0$ est dégénéré une seule fois, et peut être caractérisé par le nombre quantique de simplex. La relation (A.22) se traduit alors par :

$$\pi = s \cdot (-1)^I \tag{A.23}$$

Par conséquent, deux cas sont possibles :

$$\boxed{\begin{array}{ll} I^\pi = 0^+, 1^-, 2^+, \ldots & s = +1 \\ I^\pi = 0^-, 1^+, 2^-, \ldots & s = -1 \end{array}} \tag{A.24}$$

Les déformations qui brisent la symétrie par parité, par exemple toutes les déformations octupolaires, se traduisent donc par des bandes rotationnelles très caractéristiques qui présentent une alternance d'états de parité positive et d'états de parité négative.

Le cas des noyaux impairs n'est pas aussi simple, car la symétrie de simplex implique que les états intrinsèques $+K$ et $-K$ sont dégénérés. Par conséquent, un état de spin I ayant *une parité fixée* contient un mélange d'états de simplex positif et de simplex négatif, et donc correspond à deux états intrinsèques différents.

B. Fonctions d'onde des nucléons

B.1 INTRODUCTION

Cette annexe présente la méthode utilisée pour calculer les amplitudes de probabilité de Woods-Saxon et d'Hartree-Fock présentées au chapitre 3. Il a déjà été mentionné à plusieurs reprises que le code WS-ODD utilisait la base cartésienne de l'oscillateur harmonique pour décomposer les fonctions d'onde de l'hamiltonien (qu'il soit relativiste ou non). Mais il n'est pas très facile d'exprimer des fonctions radiales dans une telle base. Aussi a-t-il été nécessaire de calculer directement les états propres de l'hamiltonien dans la base sphérique. Cette annexe donne les formules implémentées dans le code WS-ODD.

B.2 POLYNÔMES DE LAGUERRE GÉNÉRALISÉS

Relation de récurrence - Les polynômes de Laguerre généralisés vérifient les relations de récurrence suivante :

$$L_n^{(\alpha+1)}(x) = \frac{1}{x}\left[(x-n)L_n^{(\alpha)}(x) + (\alpha+n)L_{n-1}^{(\alpha)}(x)\right] \tag{B.1}$$

$$L_{n-1}^{(\alpha)}(x) = L_n^{(\alpha)}(x) - L_n^{(\alpha-1)}(x) \tag{B.2}$$

où n est un entier, $n \in \mathbb{N}$, et α est un réel. Dans la suite, nous n'aurons besoin que de α demi-entier. Les deux relations (B.1)-(B.2) sont équivalentes à :

$$\boxed{L_n^{(\alpha+1)}(x) = \frac{1}{x}\left[(x+\alpha)L_n^{(\alpha)}(x) - (\alpha+n)L_n^{(\alpha-1)}(x)\right]} \tag{B.3}$$

Les deux premiers polynômes s'obtiennent grâce à :

$$L_n^{(-1/2)}(x) = \frac{(-1)^n}{n!2^n}H_{2n}(\sqrt{x}) \tag{B.4}$$

$$L_n^{(+1/2)}(x) = \frac{(-1)^n}{n!2^{n+1}}H_{2n+1}(\sqrt{x}) \tag{B.5}$$

où $H_n(x)$ est le polynôme d'Hermite d'ordre n.

Orthonormalité - Les polynômes de Laguerre généralisés vérifient la relation d'orthonormalité suivante :

$$\boxed{\int_0^{+\infty} e^{-u} u^{\alpha} L_n^{(\alpha)}(u) L_{n'}^{(\alpha)}(u) du = \delta_{nn'} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}} \tag{B.6}$$

pour $\alpha > -1$ et $n \in \mathbb{N}$. La fonction Gamma d'Euler est, pour un entier quelconque k :

$$\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right) = \frac{1 \times 3 \times \cdots \times (2k-1)}{2^k} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \tag{B.7}$$

ce qui peut se réécrire sous la forme :

$$\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right) = \frac{(2k)!}{2^{2k} p!} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \tag{B.8}$$

avec : $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$

B.3 AMPLITUDE DE PROBABILITÉ AU POINT r

B.3.1 Fonctions d'onde en coordonnées sphériques

Les solutions de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur harmonique sphérique sont entièrement caractérisées par les nombres quantiques n, ℓ, j et m, et les fonctions d'onde se décomposent de façon très générale selon :

$$\boxed{\psi_{n\ell jm}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r) \mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta,\varphi)} \tag{B.9}$$

où $R_{n\ell}(r)$ est la fonction d'onde radiale et $\mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta,\varphi)$ sont les « harmoniques solides ». Les harmoniques solides ℓ, j, m correspondent en fait au couplage des harmoniques *sphériques* $Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)$ avec les fonctions d'onde de spin χ_{sm_s} :

$$\mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta,\varphi) = \left[Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi) \otimes \chi_{sm_s}\right]_{jm} \tag{B.10}$$

ce que l'on peut réécrire (de façon peut-être plus explicite) :

$$\mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta,\varphi) = \sum_{m_s=\pm 1/2} (\ell m_\ell,\ s\ m_s | j\ m) Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi) \chi_{sm_s} \tag{B.11}$$

où les symboles $(\ell m_\ell,\ s\ m_s | j\ m)$ représentent les coefficients de Clebsch-Gordan.

La condition d'orthonormalité pour les fonctions d'onde (B.9) s'écrit :

$$\int d^3\vec{r}\ \psi^*_{n\ell jm}(r,\theta,\varphi) \psi_{n'\ell'j'm'}(r,\theta,\varphi) = \delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{B.12}$$

Par ailleurs, les harmoniques solides vérifient :

$$\int d\Omega\ \mathfrak{Y}^*_{\ell jm}(\theta,\varphi)\mathfrak{Y}_{\ell' j' m'}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{B.13}$$

où $d\Omega = \sin\theta\, d\theta d\varphi$ est l'angle solide, ce qui signifie que les relations d'orthonormalité se réduisent en fait à :

$$\boxed{\int_0^{+\infty} r^2 dr\ R^*_{n\ell}(r) R_{n'\ell}(r) = \delta_{nn'}} \tag{B.14}$$

B.3.2 La partie radiale de la fonction d'onde

La fonction d'onde s'exprime en fonction des polynômes de Laguerre généralisés :

$$\boxed{R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} e^{-\xi^2/2} \xi^\ell L_n^{\ell+1/2}(\xi^2)} \tag{B.15}$$

où : $\xi = br$ (variable sans dimension) et $b = \sqrt{m_0\omega/\hbar}$ (le système, i.e. l'oscillateur harmonique, ayant la symétrie sphérique, toutes ses fréquences sont égales : $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$). $N_{n\ell}$ est une constante de normalisation. Pour la déterminer, utilisons la condition d'orthonormalité (B.14), qui peut également s'écrire, pour $n' = n$:

$$\int_0^{+\infty} r^2 dr\ |R_{n\ell}(r)|^2 = 1 \tag{B.16}$$

D'où :

$$\int_0^{+\infty} r^2 dr\ N^2_{n\ell} e^{-\xi^2} \xi^{2\ell} \left[L_n^{\ell+1/2}(\xi^2)\right]^2 = 1 \tag{B.17}$$

En changeant la variables d'intégration r en ξ, on obtient :

$$\frac{N^2_{n\ell}}{b^3} \int_0^{+\infty} \xi^2 d\xi\ e^{-\xi^2} \xi^{2\ell} \left[L_n^{\ell+1/2}(\xi^2)\right]^2 = 1 \tag{B.18}$$

Faisons un nouveau changement de variable $u = \xi^2$ (de sorte que : $\xi^2 d\xi = \frac{1}{2} u^{1/2} du$), on obtient :

$$\frac{N^2_{n\ell}}{b^3} \int_0^{+\infty} \frac{1}{2} u^{1/2} du\ e^{-u} u^\ell \left[L_n^{\ell+1/2}(u)\right]^2 = 1 \tag{B.19}$$

c'est-à-dire :

$$\frac{N^2_{n\ell}}{2b^3} \int_0^{+\infty} du\ e^{-u} u^{\ell+1/2} \left[L_n^{\ell+1/2}(u)\right]^2 = 1 \tag{B.20}$$

et l'on reconnaît sous cette forme l'équation (B.6) pour $\alpha = \ell + 1/2$ et $n = n'$. Il s'ensuit que la constante de normalisation $N_{n\ell}$ vaut :

$$\boxed{N_{n\ell} = \sqrt{2b^3 \frac{n!}{\Gamma(n+\ell+3/2}}} \tag{B.21}$$

B.3.3 Décomposition d'un état quelconque dans la base sphérique

Considérons un état propre de l'hamiltonien de Woods-Saxon, ou, de façon plus générale, de n'importe quel hamiltonien à un corps (par exemple l'hamiltonien de champ moyen d'Hartree-Fock). La fonction d'onde $\Phi_{n\ell jm}(r,\theta,\varphi)$ d'un tel état se décompose sur la base de l'oscillateur harmonique sphérique selon :

$$\Phi_{n\ell jm}(r,\theta,\varphi) = \sum_{n'\ell'j'm'} C_{n'\ell'j'm'}\ \psi_{n'\ell'j'm'}(r,\theta,\varphi) \tag{B.22}$$

où les $C_{n'\ell'j'm'}$ sont des nombres complexes et les $\psi_{n'\ell'j'm'}(r,\theta,\varphi)$ les fonctions d'onde (B.9). On souhaiterait calculer la probabilité de présence au point r d'une particule avec la fonction d'onde (B.22). Celle-ci s'écrit :

$$P(r) = \int d\Omega\ |\Phi_{n\ell jm}(r,\theta,\varphi)|^2 \tag{B.23}$$

D'où, d'après (B.22) :

$$\begin{aligned} |\Phi_{n\ell jm}(r,\theta,\varphi)|^2 &= \sum_{n\ell jm}\sum_{n'\ell'j'm'} C^*_{n\ell jm}C_{n'\ell'j'm'}\psi^*_{n\ell jm}(r,\theta,\varphi)\psi_{n'\ell'j'm'}(r,\theta,\varphi) \\ &= \sum_{n\ell jm}\sum_{n'\ell'j'm'} C^*_{n\ell jm}C_{n'\ell'j'm'}R_{n\ell}(r)\mathcal{Y}^*_{\ell jm}(\theta,\varphi)R_{n'\ell'}(r)\mathcal{Y}_{\ell'j'm'}(\theta,\varphi) \end{aligned} \tag{B.24}$$

En intégrant sur θ et φ et en utilisant les relations d'orthonormalité (B.13), on obtient :

$$\int d\Omega\ |\Phi_{n\ell jm}(r,\theta,\varphi)|^2 = \sum_{nn'}\sum_{\ell jm} C^*_{n\ell jm}C_{n'\ell jm}R_{n\ell}(r)R_{n'\ell}(r) \tag{B.25}$$

et donc la distribution de probabilité de présence s'écrit :

$$\boxed{P(r) = \sum_{nn'}\sum_{\ell jm} C^*_{n\ell jm}C_{n'\ell jm}R_{n\ell}(r)R_{n'\ell}(r)} \tag{B.26}$$

En conclusion, si l'on connaît les coefficients de la décomposition d'un état dans la base sphérique, on peut grâce à (B.26) calculer la probabilité que le nucléon se trouve à une distance r du centre du noyau. Dans le code WS-ODD, les coefficients $C_{n\ell jm}$ sont déterminés dans la subroutine qui calcule les labels sphériques.

C. Bases cartésiennes

C.1 INTRODUCTION

Cette annexe a pour but d'exposer une partie des techniques qui ont été employées dans le code WS-ODD (ainsi d'ailleurs que dans le code HF-ODD qui résout les équations d'Hartree-Fock). La section 2.3 du chapitre 2 a donné un panorama général du code WS-ODD, des options qui y ont été implémentées ainsi que des algorithmes de calcul des éléments de matrice. Dans cette annexe, nous revenons sur la base cartésienne de l'oscillateur harmonique et sur les propriétés des éléments de matrices d'un opérateur quelconque dans cette base. Une présentation générale de la méthode est donnée dans [Dob97] dans le contexte du code HF-ODD, qui résout les équations d'Hartree-Fock.

Comme il a déjà été mentionné à la section 2.3, les algorithmes de calcul que nous utilisons permettent de réduire le temps CPU de façon importante pour toutes les opérations d'algèbre linéaire (multiplication de matrice, diagonalisation, tris, etc.). C'est cette optimisation poussée qui a permis la faisabilité des programmes de minimisation que nous avons utilisés (voir chapitres 2 et chapitre 5), et d'une manière générale de tous les programmes reposant sur l'architecture de WS-OOD.

C.2 OPÉRATEUR DE RENVERSEMENT DU TEMPS

Il existe traditionnellement deux conventions pour définir l'opérateur de renversement du temps, qui sont :

$$\hat{T} = \pm i\sigma_y \hat{K} \tag{C.1}$$

où σ_y est la deuxième matrice de Pauli et $\hat{K}$ est l'opérateur de conjugaison complexe. Lorsque le signe + est utilisé, c'est la convention de Condon-Shortley [Con35], lorsque c'est le signe −, celle de Biedenharn-Rose [Bie53]. Les deux conventions sont présentées dans [Hey90]. Nous *choisissons* la convention suivante :

CONVENTION 1 (OPÉRATEUR DE RENVERSEMENT DU TEMPS)

$$\hat{T} = +i\sigma_y \hat{K}$$

qui est en fait la convention de Condon-Shortley [Con35].

Une fois l'opérateur de renversement du temps défini, il est maintenant possible de calculer l'action de cet opérateur sur les états propres de spin. Notons $|+\rangle$ les états propres correspondant à la valeur propre $+1/2$, et $|-\rangle$ ceux correspondant à la valeur propre -1/2. On a :

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{C.2}$$

La deuxième matrice de Pauli est définie de façon classique par :

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} \tag{C.3}$$

On obtient donc :

$$i\sigma_y|+\rangle = +i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -|-\rangle$$

et, de façon analogue, il est immédiat de constater que :

$$\sigma_y|-\rangle = |+\rangle$$

On obtient par conséquent l'ensemble d'équations couplées suivant :

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{T}|+\rangle &= -|-\rangle \qquad \text{(C.4)} \\ \hat{T}|-\rangle &= +|+\rangle \qquad \text{(C.5)} \end{aligned}}$$

C.3 DÉFINITION DE LA BASE B

L'équation de Schrödinger (ou de Dirac) avec un potentiel réaliste n'admet pas toujours de solution analytique. Il est donc nécessaire de développer la fonction ψ solution de $\hat{H}\psi = E\psi$ sur une certaine base de fonctions d'onde :

$$\psi = \sum_n C_n \varphi_n$$

L'ensemble des fonctions φ_n constitue la base, on les suppose connues, et les C_n sont les coefficients de développement. Déterminer ψ revient alors à déterminer les coefficients C_n.

Il existe naturellement plusieurs bases de l'espace $\mathcal{L}_2$ des fonctions de carré sommable (qui est l'espace des fonctions d'onde), les fonctions propres de l'oscillateur harmonique en constituent une particulière. Rappelons que si l'on se fixe une base donnée de fonctions φ_n, l'ensemble des fonctions $e^{i\alpha}\varphi_n$, où α est un réel quelconque, est aussi une base. Dans le cas de l'oscillateur harmonique, il est avantageux de choisir un certain facteur de phase : les résultats physiques sont naturellement indépendants de ce choix, mais pas les calculs intermédiaires. La base dite base B que nous allons maintenant présenter illustre ce principe.

C.3.1 Notation

Les programmes WS-ODD ainsi que HF-ODD utilisent comme base de travail une base dérivée de celle de l'oscillateur harmonique en coordonnées cartésiennes, la seule différence résidant dans la présence d'un facteur de phase multiplicatif. Ce dernier est rajouté de façon à simplifier les calculs ultérieurs, mais son importance est cruciale, car il apparaît de façon plus ou moins directe dans chaque élément de matrice calculé. Notons $|n_x\ n_y\ n_z\rangle \equiv |n\rangle$ un état propre de l'oscillateur harmonique avec les nombres quantiques n_x, n_y et n_z. En termes de fonction d'onde, il est bien connu que :

$$|n_x\ n_y\ n_z\rangle = \varphi_{n_x}(x)\varphi_{n_y}(y)\varphi_{n_z}(z) \tag{C.6}$$

où les $\varphi_{n_\mu}(x_\mu)$ sont les polynômes d'Hermite d'ordre n_μ pondérés par une fonction gaussienne :

$$\boxed{\varphi_{n_\mu}(x_\mu) = \sqrt{\frac{b_\mu}{\sqrt{\pi}2^{n_\mu}n_\mu!}}H_{n_\mu}(\xi_\mu)} \tag{C.7}$$

avec :

$$\boxed{\xi_\mu = b_\mu x_\mu \quad \text{et} \quad b_\mu = \sqrt{\frac{m\omega_\mu}{\hbar}}} \tag{C.8}$$

Les variables ξ sont donc simplement des variables sans dimension introduites pour simplifier le calcul, et les b_μ sont les « longueurs » caractéristiques de l'oscillateur dans chaque direction. L'ensemble des vecteurs $|n\rangle$ forme une base de l'espace des états, et il s'ensuit que l'on peut, par des transformations de phase, construire une infinité de bases dérivées. En particulier :

CONVENTION 2 (BASE B) *Nous appelons base B la base formée à partir des états propres de l'oscillateur harmonique selon :*

$$|b\rangle = +i^{+n_y}|n\rangle|+\rangle \tag{C.9}$$
$$|\bar{b}\rangle = -i^{-n_y}|n\rangle|-\rangle \tag{C.10}$$

Dans la définition des vecteur $|b\rangle$ et $|\bar{b}\rangle$, les indices n_x, n_y et n_z ont été omis pour alléger la notation, mais en toute rigueur, il faudrait écrire : $|b_{n_x n_y n_z}\rangle$. Par ailleurs, remarquons que cette base B inclut les états propres de spin.

C.3.2 Principale propriété

Le choix de la phase, le facteur i^{n_y}, n'est évidemment pas innocent. En effet, considérons l'action de l'opérateur de renversement du temps sur un vecteur $|b\rangle$. D'après les relations (C.4)-(C.5), nous avons :

$$\hat{T}|b\rangle = i^{-n_y}|n\rangle(+i\sigma_y)|+\rangle = -i^{-n_y}|n\rangle|-\rangle = |\bar{b}\rangle \tag{C.11}$$

et l'on peut montrer facilement que $\hat{T}|\bar{b}\rangle = -|b\rangle$ (par exemple en exploitant l'anti-unitarité de l'opérateur $\hat{T}$). Autrement dit :

$$\boxed{\begin{array}{rcll} \hat{T}|b\rangle & = & +|\bar{b}\rangle & \text{(C.12)} \\ \hat{T}|\bar{b}\rangle & = & -|b\rangle & \text{(C.13)} \end{array}}$$

C.4 DÉFINITION DE LA BASE T

L'existence de symétries pour un système quantique a d'importantes conséquences. D'une part une symétrie S se traduit par un certain opérateur $\hat{S}$ qui commute avec l'hamiltonien du système, d'autre part (mais cela revient en fait au même), il existe un nombre quantique conservé associé à la symétrie S. Dans la pratique, introduire des symétries dans les calculs présente l'avantage de simplifier grandement les équations à résoudre, et d'accélérer leur résolution très significativement. *A contrario*, ces symétries n'étant pas forcément présentes dans la réalité constituent une limitation certaine de l'algorithme.

Dans les programmes WS-ODD et HF-ODD, il a été supposé que seul le plan $\mathcal{O}xz$ était un plan de symétrie pour les états individuels. Ce choix a d'importantes conséquences pour les algorithmes, comme nous allons le voir dans les paragraphes suivants, et il n'est pas trop restrictif pour permettre d'envisager nombre de cas de figures réalistes. L'existence de ce plan de symétrie pour l'hamiltonien se traduit mathématiquement par des propriétés liées à l'opérateur dit de *simplex*, que nous allons maintenant présenter.

C.4.1 L'opérateur de simplex

a) Définition

Dans le programme WS-ODD, le plan de symétrie est le plan $\mathcal{O}xz$ perpendiculaire à l'axe $\mathcal{O}y$. A cette symétrie est associé un opérateur, appelé opérateur de *simplex*, que l'on notera $\hat{S}_y$. L'opérateur de simplex se traduit sur les coordonnées spatiales par $x \to -x$, $y \to +y$ et $z \to -z$ (voir paragraphe 4.2.3 page 110). Son expression mathématique est :

$$\hat{S}_y = e^{-i\pi\hat{j}_y}\hat{\pi} \tag{C.14}$$

où $\hat{j}_y$ est la deuxième composante du moment angulaire total et $\hat{\pi}$ est l'opérateur de parité. Il est possible d'utiliser les propriétés des matrices de Pauli de façon à réécrire l'opérateur de simplex plus simplement comme :

$$\boxed{\hat{S}_y = e^{-i\pi\hat{l}_y}(-i\sigma_y)\hat{\pi}} \tag{C.15}$$

Rappelons ce qui a déjà été mentionné au paragraphe 4.2.3, à savoir que l'opérateur de simplex est le produit de la signature par la parité (opération de parité suivie de celle de signature). Si la signature et la parité sont conservées séparément, alors le simplex l'est aussi, mais le contraire n'est pas forcément vrai.

b) Propriétés principales

PROPRIÉTÉ 1 (ANTISYMÉTRIE) *L'opérateur de simplex est antisymétrique, i.e. :*

$$\hat{S}_y^2 = -\mathbb{I}$$

Preuve - En utilisant la formule C.15, on a :

$$\hat{S}_y^2 = e^{-i\pi\hat{l}_y}(-i\sigma_y)\hat{\pi}e^{-i\pi\hat{l}_y}(-i\sigma_y)\hat{\pi} \tag{C.16}$$

$$= \underbrace{e^{-i\pi\hat{l}_y}e^{-i\pi\hat{l}_y}}_{=\mathbb{I}}\ \underbrace{(-i\sigma_y)(-i\sigma_y)}_{=-\mathbb{I}}\ \underbrace{\hat{\pi}\hat{\pi}}_{=\mathbb{I}} \tag{C.17}$$

$$= -\mathbb{I} \tag{C.18}$$

PROPRIÉTÉ 2 (INVERSE) *L'inverse de l'opérateur de simplex est :*

$$\hat{S}_y^{-1} = -\hat{S}_y$$

Preuve - C'est une conséquence directe de la propriété précédente.

PROPRIÉTÉ 3 (ANTI-HERMITICITÉ) *L'opérateur de simplex n'est pas hermitique et son conjugué hermitique est donné par :*

$$\hat{S}_y^\dagger = -\hat{S}_y$$

Preuve - On sait que les matrices de Pauli ainsi que l'opérateur de parité sont des opérateurs hermitiques. Par conséquent : $\sigma_y^\dagger = \sigma_y$, ce qui implique que : $(-i\sigma_y)^\dagger = +i\sigma_y$. D'autre part : $\hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}$. Et enfin :

$$\left(e^{-i\pi\hat{l}_y}\right)^\dagger = e^{+i\pi\hat{l}_y^\dagger} = e^{+i\pi\hat{l}_y} = e^{-i\pi\hat{l}_y}$$

En combinant ces différents résultats, et en utilisant le fait que la conjugaison hermitique est une opération associative, on obtient le résultat annoncé.

C.4.2 Propriétés de la base T

a) Définition

En général, en mécanique quantique, la géométrie du système étudié doit se refléter dans la base choisie pour les fonctions d'onde. Nous allons voir comment construire une base qui pourra être associée au seul opérateur de symétrie dont nous disposerons *toujours*, l'opérateur de simplex. Considérons les vecteurs suivants, obtenus par transformation unitaire à partir des vecteurs de la base B :

$$\boxed{\begin{aligned} |t_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(i|b\rangle - |\bar{b}\rangle\right) \quad \text{(C.19)} \\ |t_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|b\rangle - i|\bar{b}\rangle\right) \quad \text{(C.20)} \end{aligned}}$$

Nous allons montrer que les vecteurs $|t_+\rangle$ et $|t_-\rangle$ sont des vecteurs propres de l'opérateur de simplex avec, respectivement, les valeurs propres $+i$ et $-i$. Les démonstrations seront faites pour les vecteurs $|t_+\rangle$, mais les résultats concernant $|t_-\rangle$ seront également donnés.

b) Base T et opérateur de simplex

On peut montrer, à partir des propriétés des polynômes d'Hermite et de la forme (C.7) des fonctions d'onde, que :

$$\hat{S}_y|b\rangle = -|\bar{b}\rangle \quad \text{(C.21)}$$
$$\hat{S}_y|\bar{b}\rangle = +|b\rangle \quad \text{(C.22)}$$

Des équations (C.19)-(C.20), nous obtenons donc :

$$\hat{S}_y|t_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[i\hat{S}_y|b\rangle - \hat{S}_y|\bar{b}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-i|\bar{b}\rangle - |b\rangle\right) = (+i)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(i|b\rangle - |\bar{b}\rangle\right)$$

d'où il suit :

$$\hat{S}_y|t_+\rangle = (+i)|t_+\rangle \quad \text{(C.23)}$$

En utilisant la même procédure, il est immédiat de montrer que $|t_-\rangle$ est vecteur propre de l'opérateur de simplex avec la valeur propre -i. Donc :

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{S}_y|t_+\rangle &= (+i)|t_+\rangle \quad \text{(C.24)} \\ \hat{S}_y|t_-\rangle &= (-i)|t_-\rangle \quad \text{(C.25)} \end{aligned}}$$

c) Base T et opérateur de renversement du temps

Rappelons les relations (C.12)-(C.13). Nous avions :

$$\hat{T}|b\rangle = +|\bar{b}\rangle \quad \text{(C.26)}$$
$$\hat{T}|\bar{b}\rangle = -|b\rangle \quad \text{(C.27)}$$

Appliquons maintenant l'opérateur de renversment du temps sur un vecteur $|t_+\rangle$. Nous obtenons :

$$\hat{T}|t_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hat{T}\left(i|b\rangle\right) - \hat{T}|\bar{b}\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-i|\bar{b}\rangle + |b\rangle\right) = |t_-\rangle$$

(pour bien comprendre les lignes précédentes, il faut garder à l'esprit que l'opérateur de renversement du temps contient l'opérateur de conjugaison complexe). A cause de l'anti-unitarité de $\hat{T}$, nous obtenons : $\hat{T}|t_-\rangle = -|t_+\rangle$. Pour résumer :

$$\hat{T}|t_+\rangle = +|t_-\rangle \qquad \text{(C.28)}$$
$$\hat{T}|t_-\rangle = -|t_+\rangle \qquad \text{(C.29)}$$

C.5 BASE T ET MATRICES DE PAULI

Les nucléons étant des fermions ont un spin intrinsèque 1/2. Par conséquent, les fonctions d'onde des nucléons sont le produit (tensoriel) d'une partie spatiale ne dépendant que des coordonnées x, y, et z, et d'une partie de spin (intrinsèque). Les opérateurs dont nous pouvons être amenés à calculer les éléments de matrice agissent en général sur ces deux parties, spatiale et de spin. Par exemple le moment angulaire total $\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{\ell}} + \hat{\vec{s}}$ agit sur la partie spatiale *via* le moment angulaire orbital $\hat{\vec{\ell}}$ et sur la partie de spin *via* l'opérateur de spin intrinsèque $\hat{\vec{s}}$.

Jusqu'ici, nous ne nous sommes préoccupés que des composantes purement spatiales des opérateurs. Dans les paragraphes suivants, nous allons présenter les conséquences de la structure des base B et T pour les opérateurs de spin. Le but final est d'exprimer simplement les éléments de matrice d'un opérateur quelconque (composé d'une partie spatiale et d'une partie de spin) dans la base T.

C.5.1 Action des matrices de Pauli sur les états propres de spin

Le formalisme développé dans le deuxième chapitre de cette thèse faisait abondamment usage des matrices de Pauli. De façon générale, un opérateur en mécanique quantique peut souvent se décomposer en une partie spatiale et une partie de spin, cette dernière faisant intervenir une ou plusieurs matrices de Pauli. Il est par conséquent indispensable d'évaluer l'action des matrices de Pauli sur les états constituant les deux bases que nous utilisons, les bases B et T.

En utilisant les notations de (C.2), on obtient immédiatement :

$$\sigma_x|+\rangle = +|-\rangle \qquad \text{(C.30)}$$
$$\sigma_x|-\rangle = +|+\rangle \qquad \text{(C.31)}$$
$$\sigma_y|+\rangle = +i|-\rangle \qquad \text{(C.32)}$$
$$\sigma_y|-\rangle = -i|+\rangle \qquad \text{(C.33)}$$
$$\sigma_z|+\rangle = +|+\rangle \qquad \text{(C.34)}$$
$$\sigma_z|-\rangle = -|-\rangle \qquad \text{(C.35)}$$

Remarquons que σ_z est le seul opérateur qui ne « mélange » pas les états propres de spin, ce qui est la conséquence directe du fait que $(\mathcal{O}z)$ a été choisi comme axe de quantification.

C.5.2 Action des matrices de Pauli sur la base B

Des relations (C.30)-(C.35), il est aisé de déterminer l'action des matrices de Pauli sur les vecteurs de la base B. Détaillons par exemple le cas de la première matrice de Pauli (les autres cas se traitant de façon similaire) :

$$\sigma_x|b\rangle = i^{n_y}\sigma_x|n\rangle|+\rangle = i^{n_y}|n\rangle\sigma_x|+\rangle = i^{n_y}|n\rangle|-\rangle = (-1)^{n_y}i^{-n_y}|n\rangle|-\rangle = -(-1)^{n_y}|\bar{b}\rangle$$

et pour les vecteurs $|\bar{b}\rangle$, nous avons[1] :

$$\begin{aligned}\sigma_x|\bar{b}\rangle &= -i^{-n_y}\sigma_x|n\rangle|-\rangle = -i^{-n_y}|n\rangle\sigma_x|-\rangle \\ &= -i^{n_y}|n\rangle|+\rangle = -(-1)^{n_y}i^{n_y}|n\rangle|+\rangle \\ &= (-1)^{n_y+1}|b\rangle\end{aligned}$$

En utilisant un raisonnement analogue pour les deux autres matrices de Pauli, nous obtenons le tableau suivant :

$$\boxed{\begin{array}{lcll}\sigma_x|b\rangle & = & (-1)^{n_y+1}|\bar{b}\rangle & \text{(C.36)} \\ \sigma_x|\bar{b}\rangle & = & (-1)^{n_y+1}|b\rangle & \text{(C.37)} \\ & & & \\ \sigma_y|b\rangle & = & i(-1)^{n_y+1}|\bar{b}\rangle & \text{(C.38)} \\ \sigma_y|\bar{b}\rangle & = & i(-1)^{n_y}|b\rangle & \text{(C.39)} \\ & & & \\ \sigma_z|b\rangle & = & +|b\rangle & \text{(C.40)} \\ \sigma_z|\bar{b}\rangle & = & -|\bar{b}\rangle & \text{(C.41)}\end{array}}$$

C.5.3 Action des matrices de Pauli sur la base T

La dernière étape de notre calcul consiste à déterminer l'action des matrices de Pauli sur les vecteurs de la base T, qui est la base utilisée dans nos programmes. Nous avons vu que cette base a été construite à partir de la base B selon les relations (C.19)-(C.20). Grâce aux résultats obtenus dans la section précédente, il n'est donc pas très difficile de conclure. Comme avant, nous ne détaillerons que le calcul de l'action de σ_x, la généralisation aux

[1] **On peut également, et de façon plus rapide, se servir de $\sigma_x|b\rangle = -(-1)^{n_y}|\bar{b}\rangle$ pour calculer l'action de σ_x sur l'état $|\bar{b}\rangle$ en exploitant le fait que :**

$$\boldsymbol{\sigma_x^2 = 1}$$

deux autres matrices étant immédiate. Nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\sigma_x|t_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[i\sigma_x|b\rangle - \sigma_x|\bar{b}\rangle\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(-1)^{n_y+1}i|\bar{b}\rangle - (-1)^{n_y+1}|b\rangle\right] \\
&= (-1)^{n_y+1}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\left[i|\bar{b}\rangle - |b\rangle\right]}_{=-|t_-\rangle} \\
&= (-1)^{n_y}|t_-\rangle
\end{aligned}$$

En procédant de façon analogue avec les deux autres matrices de Pauli, nous obtenons le tableau suivant :

$$\begin{array}{lcll}
\sigma_x|t_+\rangle &=& (-1)^{n_y}|t_-\rangle & \text{(C.42)} \\
\sigma_x|t_-\rangle &=& (-1)^{n_y}|t_+\rangle & \text{(C.43)} \\
 & & & \\
\sigma_y|t_+\rangle &=& (-1)^{n_y+1}|t_+\rangle & \text{(C.44)} \\
\sigma_y|t_-\rangle &=& (-1)^{n_y}|t_-\rangle & \text{(C.45)} \\
 & & & \\
\sigma_z|t_+\rangle &=& +i|t_-\rangle & \text{(C.46)} \\
\sigma_z|t_-\rangle &=& -i|t_+\rangle & \text{(C.47)}
\end{array}$$

C.6 ELÉMENTS DE MATRICE DU SPIN DANS LA BASE T

Les développements précédents nous permettent maintenant de calculer très facilement les éléments de matrice de la plupart des opérateurs usuellement rencontrés en physique nucléaire, à commencer par l'opérateur de spin. En effet, si l'on ordonne la base T de la façon suivante : $\{|t\rangle\} = \{|t_+\rangle, |t_-\rangle\}$, la matrice d'un opérateur peut s'écrire en structure de blocs :

$$\begin{array}{c} \\ \langle t_+| \\ \langle t_-| \end{array}
\begin{array}{c} \begin{array}{cc} |t_+\rangle & |t_-\rangle \end{array} \\
\left(\begin{array}{c|c} & \\ \hline & \end{array}\right) \end{array}
= A = \begin{pmatrix} A_{++} & A_{+-} \\ A_{-+} & A_{--} \end{pmatrix} \qquad \text{(C.48)}$$

Les résultats (C.42)-(C.47) nous permettent dès lors de calculer aisément chacun des blocs $\langle t_\pm|\sigma_\mu|t_\pm\rangle$ pour chacune des matrices de Pauli $\sigma_\mu, \mu = x, y, z$. Notons respectivement Σ_x, Σ_y et Σ_z les matrices de chaque composante de l'opérateur de spin dans la base T, il est immédiat de voir que :

$$\Sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & (-1)^{n_y} \\ (-1)^{n_y} & 0 \end{pmatrix} \tag{C.49}$$

$$\Sigma_y = \begin{pmatrix} (-1)^{n_y+1} & 0 \\ 0 & (-1)^{n_y} \end{pmatrix} \tag{C.50}$$

$$\Sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} \tag{C.51}$$

En d'autres termes, toutes les matrices sont diagonales par bloc, Σ_y étant même totalement diagonale. Si l'on note maintenant σ_x, σ_y et σ_z les restrictions de chacune des matrices précédentes à un bloc non nul, la structure de ces matrices apparaît comme étant :

$$\Sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x^* & 0 \end{pmatrix} \qquad \Sigma_y = \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix} \qquad \Sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z^* & 0 \end{pmatrix} \tag{C.52}$$

Nous verrons un peu plus loin que ce type de structure en bloc est assez général, et ne dépend que des relations de commutation entre les opérateurs étudiés et ceux de simplex et de renversement du temps. Il est également important de noter que les blocs en eux-mêmes ne représentent pas des opérateurs hermitiques, seule la matrice totale est hermitique.

C.7 ELÉMENTS DE MATRICE D'UN OPÉRATEUR $\hat{\mathcal{O}}$

Dans cette partie, nous considérons un opérateur quelconque $\hat{\mathcal{O}}$ qui est supposé n'agir que sur les coordonnées spatiales (i.e. pas sur les coordonnées de spin) :

$$\hat{\mathcal{O}} \equiv \hat{\mathcal{O}}(x, y, z) \tag{C.53}$$

Le but de cette section est de donner les règles de calcul des éléments de matrice des opérateurs $\hat{\mathcal{O}}$, $\hat{\mathcal{O}}\sigma_x$, $\hat{\mathcal{O}}\sigma_y$ et $\hat{\mathcal{O}}\sigma_z$ en fonction des éléments de matrice de l'opérateur $\hat{\mathcal{O}}$: $\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle$, qui sont en fait :

$$\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle = \iiint dxdydz\, \varphi^*_{n'_x}(x)\varphi^*_{n'_y}(y)\varphi^*_{n'_z}(z)\, \hat{\mathcal{O}}(x, y, z)\, \varphi_{n_x}(x)\varphi_{n_y}(y)\varphi_{n_z}(z) \tag{C.54}$$

L'idée est de limiter au strict minimum le nombre de telles intégrations dans le programme. Pour cela, on va utiliser les propriétés des bases B et T.

C.7.1 Action de $\hat{\mathcal{O}}$ dans la base B

Tout d'abord, ordonnons la base B comme suit : $\{|b\rangle\} = \{|b\rangle, |\bar{b}\rangle\}$ [2]. Cette base est orthonormale, ce qui signifie entre autres que :

$$\langle b'|\bar{b}\rangle = \langle \bar{b}'|b\rangle = 0 \tag{C.55}$$

[2] **Nous ommettons toujours les indices des vecteurs, mais naturellement, la base n'est pas seulement constituée de deux vecteurs. Nous soulignons simplement la distinction des vecteurs de cette base selon leurs propriétés vis-à-vis de l'opérateur de reversement du temps.**

Cette dernière équation vient de l'orthogonalité des fonctions propres de spin (souvenons-nous que $|b\rangle$ correspond à la projection de spin « up » tandis que $|\bar{b}\rangle$ correspond à la projection « down »). Comme notre opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ est purement spatial, il ne peut pas mélanger des états de spin « up » avec des états de spin « down ». Cela signifie donc que :

$$\langle b'|\hat{\mathcal{O}}|\bar{b}\rangle = \langle \bar{b}'|\hat{\mathcal{O}}|b\rangle = 0 \tag{C.56}$$

En effet, d'après la convention (C.9)-(C.10), nous avons :

$$\langle b'|\hat{\mathcal{O}}|\bar{b}\rangle = -i^{-n'_y}\, i^{-n_y}\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle \underbrace{\langle -|+\rangle}_{=0} = 0 \tag{C.57}$$

Une autre conséquence du fait que $\hat{\mathcal{O}}$ est purement spatial est :

$$\langle b'|\hat{\mathcal{O}}|b\rangle = i^{-n'_y+n_y}\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle \underbrace{\langle +|+\rangle}_{=1} = i^{-n'_y+n_y}\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle \tag{C.58}$$

Les résultats pour $|\bar{b}\rangle$ sont similaires :

$$\langle \bar{b}'|\hat{\mathcal{O}}|\bar{b}\rangle = i^{n'_y-n_y}\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle \underbrace{\langle -|-\rangle}_{=1} = i^{n'_y-n_y}\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle \tag{C.59}$$

Nous obtenons donc finalement :

$$\boxed{\begin{aligned} \langle b'|\hat{\mathcal{O}}|b\rangle &= i^{-n'_y+n_y}\,\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle \qquad \text{(C.60)} \\ \langle \bar{b}'|\hat{\mathcal{O}}|\bar{b}\rangle &= i^{+n'_y-n_y}\,\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle \qquad \text{(C.61)} \end{aligned}}$$

C.7.2 Action de $\hat{\mathcal{O}}$ sur les vecteurs de la base T

Rappelons-nous la structure en bloc de la base T définie par les relations (C.19)-(C.20). Nous commençons par calculer les éléments de matrice de l'opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ dans le bloc $\{t_+, t_+\}$. Il est facile de montrer que :

$$\begin{aligned} \langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}|t_+\rangle &= \frac{1}{2}\left(\langle b'|\hat{\mathcal{O}}|b\rangle + \langle \bar{b}'|\hat{\mathcal{O}}|\bar{b}\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2}\left[i^{-n'_y+n_y} + i^{n'_y-n_y}\right]\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle \\ &= \frac{1}{2}i^{n'_y-n_y}\left[1+(-1)^{-(n'_y-n_y)}\right]\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle \end{aligned}$$

Notons $F(n)$ la fonction d'un entier n :

$$\boxed{F(n) = \frac{1}{2}i^n\left[1+(-1)^n\right]} \tag{C.62}$$

Alors :

$$\boxed{\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}|t_+\rangle = F(n'_y - n_y)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle} \tag{C.63}$$

En utilisant ce raisonnement, il n'est pas trop difficile de calculer tous les éléments de matrice qui nous intéressent, c'est-à-dire : $\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}|t_-\rangle$, $\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}|t_+\rangle$, $\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}|t_-\rangle$. J'espère que le lecteur me fera confiance si je me permets de donner les résultats sans preuve :

$$\begin{aligned}
\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}|t_+\rangle &= F(n'_y - n_y)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.64)}\\
\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}|t_-\rangle &= F(n'_y - n_y + 1)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.65)}\\
\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}|t_+\rangle &= F(n'_y - n_y - 1)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.66)}\\
\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}|t_-\rangle &= F(n'_y - n_y)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.67)}
\end{aligned}$$

C.8 ELÉMENTS DE MATRICE DE $\hat{\mathcal{O}}\sigma_\mu$

Nous souhaiterions maintenant étendre les résultats précédents aux cas d'opérateurs de la forme $\hat{\mathcal{O}}\sigma_\mu$, avec $\mu = x, y, z$. Il est évident que dans ce cas l'opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ n'agira que sur la partie spatiale tandis que σ_μ n'agira que sur la partie dépendant du spin. Par conséquent, les éléments de matrice peuvent s'écrire comme un produit de deux termes, et connaissant les relations (C.42)-(C.47) ainsi que (C.64)-(C.67), il n'est pas très difficile de parvenir aux résultats suivants :

$$\begin{aligned}
\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}\sigma_x|t_+\rangle &= F(n'_y + n_y + 1)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.68)}\\
\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}\sigma_x|t_-\rangle &= F(n'_y + n_y)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.69)}\\
\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}\sigma_x|t_+\rangle &= F(n'_y + n_y)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.70)}\\
\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}\sigma_x|t_-\rangle &= F(n'_y + n_y - 1)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.71)}
\end{aligned}$$

De façon analogue :

$$\begin{aligned}
\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}\sigma_y|t_+\rangle &= F(n'_y + n_y + 2)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.72)}\\
\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}\sigma_y|t_-\rangle &= F(n'_y + n_y + 1)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.73)}\\
\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}\sigma_y|t_+\rangle &= F(n'_y + n_y + 1)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.74)}\\
\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}\sigma_y|t_-\rangle &= F(n'_y + n_y)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.75)}
\end{aligned}$$

Et :

$$\begin{aligned}
\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}\sigma_z|t_+\rangle &= iF(n'_y - n_y + 1)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.76)}\\
\langle t'_+|\hat{\mathcal{O}}\sigma_z|t_-\rangle &= iF(n'_y - n_y + 2)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.77)}\\
\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}\sigma_z|t_+\rangle &= iF(n'_y - n_y)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.78)}\\
\langle t'_-|\hat{\mathcal{O}}\sigma_z|t_-\rangle &= iF(n'_y - n_y + 1)\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle && \text{(C.79)}
\end{aligned}$$

C.9 STRUCTURE EN BLOCS DANS LA BASE T

Les pages précédentes nous ont permis de mettre en évidence des propriétés remarquables des éléments de matrice d'un opérateur de la forme $\mathcal{O}\sigma_\mu$: ils s'expriment tous de manière simple en fonction des éléments de matrice de $\mathcal{O}$ sur la base $|n\rangle \equiv |n_x, n_y, n_z\rangle$. Néanmoins, nous pouvons aller beaucoup plus loin. Dans les paragraphes suivants, nous allons montrer que, suivant les relations de commutation ou d'anti-commutation de l'opérateur $\mathcal{O}$ avec les opérateurs de simplex et de renversement du temps, la matrice de cet opérateur dans la base T prend une structure en bloc très particulière. Dans les applications pratiques, cette structure de blocs permet de diminuer d'un facteur 2 la taille des matrices utilisées, ce qui autorise un gain en temps de calcul très important.

C.9.1 Opérateur de simplex et base T

Il convient de mentionner pour commencer que ce que nous allons démontrer dans les paragraphes suivants ne dépend pas du choix de système de coordonnées, cartésien, sphérique ou cylindrique par exemple. Seul compte le fait que la base utilisée soit constituée des états propres de l'opérateur de simplex. Commençons par énoncer la propriété suivante :

PROPRIÉTÉ 4 (STRUCTURE DE BLOCS) *Soit $\mathcal{O} \equiv \mathcal{O}(x, y, z)$ un opérateur spatial (ne dépendant pas du spin). Dans la base T :*
- *si $[\mathcal{O}, \hat{S}_y] = 0$ alors $\mathcal{O}$ est diagonal par blocs ;*
- *si $\{\mathcal{O}, \hat{S}_y\} = 0$ alors $\mathcal{O}$ est anti-diagonal par blocs.*

Preuve - Nous savons que :

$$\hat{S}_y|t_+\rangle = (+i)|t_+\rangle \tag{C.80}$$
$$\hat{S}_y|t_-\rangle = (-i)|t_-\rangle \tag{C.81}$$

• Cas : $[\mathcal{O}, \hat{S}_y] = 0$. On a :

$$\underbrace{\hat{S}_y^{-1}}_{=\hat{S}_y^\dagger}\, \mathcal{O}\, \hat{S}_y = \mathcal{O} \tag{C.82}$$

Donc :

$$\langle t_+|\mathcal{O}|t_-\rangle = \langle t_+|\hat{S}_y^{-1}\, \mathcal{O}\, \hat{S}_y|t_-\rangle = \underbrace{\langle t_+|\hat{S}_y^\dagger}_{-i\langle t_+|}\, \mathcal{O}\, \underbrace{\hat{S}_y|t_-\rangle}_{-i|t_-\rangle} = -\langle t_+|\mathcal{O}|t_-\rangle$$

D'où : $\langle t_+|\mathcal{O}|t_-\rangle = 0$. Pour compléter la démonstration, nous devrions également prouver que : $\langle t_-|\mathcal{O}|t_+\rangle = 0$, mais la preuve s'établit de façon similaire. Pour résumer :

$$\boxed{[\mathcal{O}, \hat{S}_y] = 0 \Longrightarrow \begin{cases} \langle t_+|\mathcal{O}|t_-\rangle = 0 \\ \langle t_-|\mathcal{O}|t_+\rangle = 0 \end{cases}} \tag{C.83}$$

et la matrice de l'opérateur $\mathcal{O}$ est alors diagonale par blocs dans la base T.

• Cas : $\{\mathcal{O}, \hat{S}_y\} = 0$, alors :

$$\hat{S}_y^{-1}\,\mathcal{O}\,\hat{S}_y = -\mathcal{O} \tag{C.84}$$

Donc :

$$\langle t_+|\mathcal{O}|t_+\rangle = -\langle t_+|\hat{S}_y^{-1}\,\mathcal{O}\,\hat{S}_y|t_+\rangle = -\underbrace{\langle t_+|\hat{S}_y^\dagger}_{-i\langle t_+|}\,\mathcal{O}\,\underbrace{\hat{S}_y|t_+\rangle}_{-i|t_+\rangle} = -\langle t_+|\mathcal{O}|t_+\rangle$$

D'où : $\langle t_+|\mathcal{O}|t_+\rangle = 0$. Là encore, nous devrions également prouver que : $\langle t_-|\mathcal{O}|t_-\rangle = 0$, ce que nous laissons le soin au lecteur de faire s'il en sent la nécessité. Pour résumer :

$$\boxed{\{\mathcal{O}, \hat{S}_y\} = 0 \Longrightarrow \begin{cases} \langle t_+|\mathcal{O}|t_+\rangle = 0 \\ \langle t_-|\mathcal{O}|t_-\rangle = 0 \end{cases}} \tag{C.85}$$

et la matrice de l'opérateur $\mathcal{O}$ est donc anti-diagonale par blocs dans la base T.

C.9.2 Opérateur de renversement du temps et base T

Nous venons de voir dans la section précédente que, pourvu que la base de travail soit une base propre de l'opérateur de simplex, ce dernier nous permettait de simplifier la structure matricielle d'un opérateur quelconque en fonction des relations de commutation (ou d'anti-commutation) de cet opérateur avec l'opérateur de simplex. Dans les paragraphes suivants, nous allons voir que les propriétés de (anti-)commutation d'un opérateur avec le renversement du temps permettent d'obtenir des relations entre les blocs non-nuls.

a) Une propriété de l'opérateur de renversement du temps

De la façon la plus générale possible, l'opérateur de renversement du temps s'écrit :

$$\boxed{\hat{T} = \hat{U}\,\hat{K}} \tag{C.86}$$

où $\hat{U}$ est un opérateur unitaire et $\hat{K}$ est la conjugaison complexe. Dans ces conditions, on peut montrer que, pour deux états quelconques $|\phi\rangle$ et $|\varphi\rangle$:

$$\boxed{\langle\hat{T}\phi|\mathcal{O}|\hat{T}\varphi\rangle = \langle\phi|\hat{T}^{-1}\mathcal{O}\hat{T}|\varphi\rangle^*} \tag{C.87}$$

b) Application

Rappelons les relations (C.28)-(C.29) :

$$\hat{T}|t_+\rangle = +|t_-\rangle \tag{C.88}$$
$$\hat{T}|t_-\rangle = -|t_+\rangle \tag{C.89}$$

Nous allons détailler le calcul dans le cas où $[\mathcal{O}, \hat{S}_y] = 0$, les autres cas de figure se démontrant de façon similaire. Si notre opérateur $\mathcal{O}$ commute avec l'opérateur de simplex, il reste deux possibilités :

• **Cas $[\mathcal{O}, \hat{T}] = 0$** - Dans ce cas, nous avons :

$$\hat{T}^{-1}\,\mathcal{O}\,\hat{T} = +\mathcal{O} \tag{C.90}$$

Donc :

$$\langle t_+|\mathcal{O}|t_+\rangle = \langle t_+|\hat{T}^{-1}\,\mathcal{O}\,\hat{T}|t_+\rangle = \langle \hat{T}t_+|\mathcal{O}|\hat{T}t_+\rangle^* = \langle t_-|\mathcal{O}|t_-\rangle^*$$

D'où :

$$\boxed{[\mathcal{O}, \hat{T}] = 0 \Longrightarrow \langle t_+|\mathcal{O}|t_+\rangle = \langle t_-|\mathcal{O}|t_-\rangle^*} \tag{C.91}$$

• **Cas $\{\mathcal{O}, \hat{T}\} = 0$** - Dans ce cas :

$$\hat{T}^{-1}\,\mathcal{O}\,\hat{T} = -\mathcal{O} \tag{C.92}$$

d'où :

$$\langle t_+|\mathcal{O}|t_+\rangle = -\langle t_+|\hat{T}^{-1}\,\mathcal{O}\,\hat{T}|t_+\rangle = -\langle \hat{T}t_+|\mathcal{O}|\hat{T}t_+\rangle^* = -\langle t_-|\mathcal{O}|t_-\rangle^*$$

Et donc :

$$\boxed{\{\mathcal{O}, \hat{T}\} = 0 \Longrightarrow \langle t_+|\mathcal{O}|t_+\rangle = -\langle t_-|\mathcal{O}|t_-\rangle^*} \tag{C.93}$$

Nous voyons donc qu'il existe des relations particulières entre les différents blocs de la matrice de $\mathcal{O}$ dans la base T, et que ces relations dépendent des relations de commutation ou d'anti-commutation de l'opérateur $\mathcal{O}$ avec celui de renversement du temps. Par ailleurs, rappelons que les résultats précédents ont été démontrés dans le cas particulier où $[\mathcal{O}, \hat{S}_y] = 0$, mais ils se généralisent facilement au cas où $\{\mathcal{O}, \hat{S}_y\} = 0$ (et dans ce cas, les blocs non-nuls sont les blocs anti-diagonaux).

C.9.3 Résumé

Le tableau C.1 de la page 198 résume la structure en blocs d'un opérateur spatial $\mathcal{O}$ quelconque dans la base T en fonction de ses relations de commutation ou d'anti-commutation avec les opérateurs de simplex et de renversement du temps.

C.9.4 Structure matricielle de certains opérateurs

Pour diagonaliser l'hamiltonien de Dirac dans la base T, nous avons besoin de connaître les éléments de matrice des potentiels (2.32)-(2.34) ainsi que ceux de l'énergie cinétique (2.27) (voir page 44). Ces quantités font intervenir certains opérateurs particuliers, et nous allons ici donner la structure matricielle de chacun de ces opérateurs. Le calcul des intégrales correspondantes est expliqué à la section 2.3 page 60.

	$\left[\mathcal{O}, \hat{S}_y\right] = 0$	$\left\{\mathcal{O}, \hat{S}_y\right\} = 0$
$\left[\mathcal{O}, \hat{T}\right] = 0$	$\begin{pmatrix} \langle t_+\|\mathcal{O}\|t_+\rangle & 0 \\ 0 & \langle t_-\|\mathcal{O}\|t_-\rangle^* \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \langle t_+\|\mathcal{O}\|t_-\rangle \\ -\langle t_-\|\mathcal{O}\|t_+\rangle^* & 0 \end{pmatrix}$
$\left\{\mathcal{O}, \hat{T}\right\} = 0$	$\begin{pmatrix} \langle t_+\|\mathcal{O}\|t_+\rangle & 0 \\ 0 & -\langle t_-\|\mathcal{O}\|t_-\rangle^* \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \langle t_+\|\mathcal{O}\|t_-\rangle \\ \langle t_-\|\mathcal{O}\|t_+\rangle^* & 0 \end{pmatrix}$

TAB. C.1 – *Structure d'un opérateur $\mathcal{O}$ dans la base T en fonction de ses relations de commutation et d'anti-commutation avec $\hat{T}$ et $\hat{S}_y$*

Opérateur quantité de mouvement - Toutes les composantes de l'opérateur quantité de mouvement anti-commutent avec l'opérateur de renversement du temps. La composante y de $\vec{p}$ anti-commute avec le simplex, les deux autres commutent. Cet opérateur intervient dans tous les potentiels et dans l'énergie cinétique, soit directement, soit associé à l'opérateur de spin (donc aux matrices de Pauli). Nous avons donc :

$$\boxed{\left\{p_\mu, \hat{T}\right\} = 0 \quad \forall \mu} \tag{C.94}$$

$$\boxed{\begin{aligned} &\left[p_x, \hat{S}_y\right] = \left[p_z, \hat{S}_y\right] = 0 \\ &\left\{p_y, \hat{S}_y\right\} = 0 \end{aligned}} \tag{C.95}$$

Matrices de Pauli - Dans les expressions (2.32)-(2.34), les matrices de Pauli interviennent seulement dans le calcul du potentiel spin-orbite. Les matrices de Pauli anti-commutent avec l'opérateur de renversement du temps. La matrice σ_y commute avec le simplex, les autres anti-commutent. Donc :

$$\boxed{\left\{\sigma_\mu, \hat{T}\right\} = 0 \quad \forall \mu} \tag{C.96}$$

$$\boxed{\begin{aligned} &\left\{\sigma_x, \hat{S}_y\right\} = \left\{\sigma_z, \hat{S}_y\right\} = 0 \\ &\left[\sigma_y, \hat{S}_y\right] = 0 \end{aligned}} \tag{C.97}$$

Matrice de $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ - Le code WS-ODD a une option permettant de calculer l'hamiltonien de Dirac selon la formule (2.19) page 43. Dans cette formule intervient le terme $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$. Cette opérateur commute avec le renversement du temps et anti-commute avec le simplex. Donc :

$$\boxed{\left[\vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \hat{T}\right] = 0} \tag{C.98}$$

$$\boxed{\left\{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \hat{S}_y\right\} = 0} \tag{C.99}$$

Tous ces opérateurs interviennent dans le calcul des éléments de matrice du champ moyen de Dirac dans la base T, et leurs différentes structures permettent à la fois de simplifier et d'accélérer de façon substantielle le calcul de ces éléments de matrice, et la diagonalisation de cette dernière.

D. Traitement de l'appariement

Le travail qui est présenté dans cette thèse s'inscrit dans le cadre général des théories de champ moyen. Dans ces approches, rappelons-le, on tire parti du fait que le libre parcours moyen des nucléons étant très grand à l'intérieur du noyau, on peut considérer en première approximation que les nucléons se déplacent de façon indépendante dans le noyau (modèle à *particules indépendantes*). Par ailleurs, il existe une « force » qui maintient les nucléons confinés à l'intérieur du noyau : en toute rigueur, si l'on considère un nucléon donné quelconque, cette force qui agit sur lui est la résultante de toutes les interactions à 2, 3,..., N corps entre ce nucléon et tous les autres. Une telle approche est dans la pratique insoluble. Dans les théories de champ moyen, on fait l'hypothèse que tous les nucléons du noyau contribuent à créer un champ nucléaire total dans lequel chacun se meut indépendamment des autres. Ce champ nucléaire total est appelé le champ moyen. Dans les théories microscopiques du noyau, par exemple la théorie Hartree-Fock, le champ moyen est construit à partir d'une interaction à deux corps soit phénoménologique, soit dérivée de la matrice G de Brückner (voir [Rin80] pour une présentation générale des approches microscopiques, [Day67] pour une présentation claire de la théorie de Brückner-Goldstone dans les noyaux).

Malgré les nombreux succès des approches de champ moyen, il est des applications dans lesquelles cette approximation, seule, se révèle insuffisante. Un exemple simple en est les « gaps » des noyaux pair-pair : on ne peut expliquer seulement avec une hypothèse de champ moyen pourquoi la plus basse énergie d'excitation non-collective des noyaux pair-pair est beaucoup plus grande que celle des noyaux impairs. Il est connu depuis longtemps que cet effet est dû à la formation de paires de nucléons. Dans ce cas, il est donc nécessaire de tenir compte des *corrélations d'appariement* pour parvenir à une compréhension satisfaisante du phénomène. L'interaction d'appariement est une interaction à deux corps : on pourrait également envisager de raffiner la méthode en incluant des interactions à trois corps. Dans ce cas, on aurait le schéma suivant :

$$H = \underbrace{H_0}_{\text{Champ moyen}} + \underbrace{V_{ij}^{(2)}}_{\text{2 corps}} + \underbrace{V_{ijk}^{(3)}}_{\text{3 corps}}$$

Dans cette écriture, il est entendu que les interactions à deux et trois corps seraient traitées comme une *interaction résiduelle*. Naturellement, chaque terme supplémentaire de l'hamiltonien, à la fois améliore la précision de la description, et complique le traitement du problème. Dans la pratique, il est souvent suffisant de se contenter des interactions à deux corps, c'est-à-dire des corrélations d'appariement.

Le but de cete annexe est de rappeler les principales caractéristiques de la plus simple des théories de l'appariement, le modèle Bardeen-Cooper-Schrieffer (dit BCS). Cette étape est nécessaire dans l'optique du chapitre 5 qui traite des calculs d'énergie totale des noyaux selon la méthode dite « macroscopique-microscopique ». La partie D.1.4 portera sur les quasi-particules et leur interprétation, et dans la partie D.2, nous aborderons la projection du nombre de particules. Ces deux derniers aspects n'ont pas été directement utilisés dans notre travail, mais l'une des extensions possibles aux calculs du chapitre 5 est le calcul des surfaces pour différentes excitations de quasi-particule.

D.1 THÉORIE BCS

On peut distinguer plusieurs grandes classes de théories de l'appariement : les modèles fondés sur l'approche BCS, ceux fondés sur l'approche Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) et ceux qui reposent sur une diagonalisation presque exacte dans l'espace de Fock. Dans la théorie BCS, seuls des nucléons liés par l'opération de renversement du temps peuvent former une paire, tandis que dans l'approche HFB, plus générale, toutes les paires sont possibles. En fait, la théorie BCS est un cas particulier de la théorie HFB. Les calculs d'énergie totale que nous avons effectués comprenaient une correction d'appariement calculée selon la théorie BCS : il est prévu d'étendre prochainement ces calculs au cas HFB. Néanmoins, l'approximation BCS permet déjà d'obtenir les principaux effets liés à l'appariement.

Nous donnons dans cette section les principaux résultats de cette théorie. Le lecteur pourra se référer à [Die87] et [Rin80] pour la théorie BCS proprement dite et à [Ber91] pour la partie portant sur les quasi-particules. Le but de ce chapitre n'est pas de faire un état des lieux des travaux portant sur l'appariement, mais de rappeler les concepts les plus importants qui serviront dans le chapitre sur les calculs d'énergie totale des noyaux.

D.1.1 Cadre général

La théorie de Bardeen-Cooper-Schrieffer fut la première tentative d'une description miscroscopique de l'appariement. Avant de détailler plus avant les points essentiels de cette théorie, il convient de situer le cadre général. Si l'on suppose que seules les corrélations à deux corps doivent être prises en compte, l'hamiltonien du système s'écrit, en seconde quantification :

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\beta} h_{\alpha\beta}\ c^\dagger_\alpha c_\beta + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\delta\gamma}\ c^\dagger_\alpha c^\dagger_\beta c_\gamma c_\delta \tag{D.1}$$

où $c^\dagger_\alpha$ est l'opérateur de création d'une particule dans l'état α, et c_α est l'opérateur de destruction d'une particule dans l'état α, et où :

$$V_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle\alpha\beta|\hat{v}(1,2)|\gamma\delta\rangle_{\text{anti-sym.}} \tag{D.2}$$

est l'élément de matrice (anti-symétrisé) de l'interaction à deux corps. Le premier terme dans (D.1) est l'hamiltonien de champ moyen : ce peut être un champ moyen Hartree-Fock,

ou bien un champ moyen phénoménologique de type Nilsson ou Woods-Saxon. Dans le cas d'un champ Hartree-Fock, ce terme contient déjà une partie des contributions à deux corps. La partie restante, le deuxième terme de (D.1) représente une interaction résiduelle, qui en l'occurence se ramène aux corrélations d'appariement.

D.1.2 La fonction d'onde BCS

La fonction d'onde d'un système de N fermions sans interaction[1] est un déterminant de Slater $N \times N$. Puisque nous cherchons au contraire à inclure dans la fonction d'onde totale des corrélations d'appariement, il faut trouver une autre forme pour la fonction d'onde totale du noyau. Notons $|0\rangle$ le vide de particules. Pour former à partir de ce vide un état à une paire $\alpha\beta$ (= un état à deux nucléons corrélés), il faut créer simultanément un nucléon dans l'état α, et un nucléon dans l'état β. Cette création simultanée de deux nucléons se fera avec la probabilité $p_{\alpha\beta}$. Un opérateur possible pour créer une paire s'écrira donc :

$$\hat{P} = p_{\alpha\beta}\ c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger \tag{D.3}$$

où $p_{\alpha\beta}$ représente la probabilité de créer la paire de nucléons dans l'état (α, β). Pour une assemblée de N paires de fermions, la somme de toutes les probabilité doit bien évidemment être égale à l'unité :

$$\sum_{\alpha\beta} |p_{\alpha\beta}|^2 = 1 \tag{D.4}$$

L'opérateur $c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger$ seul ne crée pas une « vraie » paire, c'est-à-dire une paire de nucléons en *interaction* : il crée seulement deux nucléons *indépendants*, l'un dans l'état α, l'autre dans l'état β. En fait, c'est l'introduction d'une probabilité de création d'une paire qui définit l'interaction entre les nucléons de la paire : $p_{\alpha\beta}$ représente la probabilité que ce soient dans les états α et β que les nucléons interagissent, et pas dans d'autres états. D'où la forme (D.3).

Cependant, la définition (D.3) est encore relativement compliquée, puisque tous les nucléons peuvent *a priori* interagir avec tous les autres : les états α et β sont complètement quelconques. Dans la théorie BCS, on apporte la limitation suivante : seuls les nucléons liés par l'opération de renversement du temps interagissent. En effet, l'interaction d'appariement est de courte portée. Par conséquent, cela favorise les nucléons pour lesquels le recouvrement des fonctions d'onde est maximale, c'est-à-dire précisément les nucléons liés par l'opération de renversement du temps. L'opérateur de création d'une paire, plutôt que de se mettre sous la forme (D.3), qui n'a été introduite que pour des raisons pédagogiques, s'écrira :

$$\hat{P} = u_\alpha + v_\alpha\ c_\alpha^\dagger c_{\overline{\alpha}}^\dagger \tag{D.5}$$

où α est un état quelconque et $|\overline{\alpha}\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle$ est son partenaire par l'opération de renversement du temps. L'amplitude v_α représente donc la probabilité (plus rigoureusement : c'est $|v_\alpha|^2$)

[1] **Sans interaction signifie ici : sans interaction à l'exception du principe d'exclusion de Pauli.**

de créer la paire $(\alpha, \overline{\alpha})$, tandis que u_α représente *a contrario* la probabilité que cette paire ne soit pas créée. Le noyau étant composée d'un certain nombre de paires indépendantes[2], disons N, la fonction d'onde totale est la superposition de toutes les fonctions d'onde de ces paires. Dans le formalisme de la seconde quantification, elle s'écrira donc :

$$\boxed{|\phi\rangle = \prod_{\alpha>0} \left(u_\alpha + v_\alpha c_\alpha^\dagger c_{\overline{\alpha}}^\dagger\right)|0\rangle} \tag{D.6}$$

où $\alpha > 0$ représente les états dont la projection du moment angulaire total est par définition positive $m > 0$ (pour une base sphérique ou axiale). *A contrario*, les états $\alpha < 0$ sont les partenaires par renversement du temps des états $\alpha > 0$. Dans une base sphérique et en représentation coordonnées, on a donc :

$$\psi_{\alpha>0} = \psi_{N\ell j,m>0} \tag{D.7}$$

et pour les états $\alpha < 0$:

$$\psi_{\alpha<0} = \hat{T}\psi_{\alpha>0} = (-1)^{\ell+j-m}\psi_{N\ell j,-m} \tag{D.8}$$

Les probabilités sont normalisées à l'unité :

$$|u_\alpha|^2 + |v_\alpha|^2 = 1 \tag{D.9}$$

La fonction (D.6) contient comme inconnues les coefficients u_α et v_α. L'essentiel du travail consiste donc maintenant à trouver la valeur de ces coefficients.

Une dernière remarque, très importante : en développant le produit dans (D.6), on se rend compte que la fonction d'onde BCS ne conserve pas le nombre de particules du système. En effet :

$$|\phi\rangle \sim |0\rangle + \sum c^\dagger c^\dagger|0\rangle + \sum c^\dagger c^\dagger c^\dagger c^\dagger|0\rangle \ldots \tag{D.10}$$

c'est-à-dire que la fonction (D.6) contient des termes contenant 0 opérateur de création (correspondant au vide de particules), d'autres en contenant 2, (correspondant donc à un système à 2 particules), d'autres 4 (4 particules), etc. Comme le produit dans (D.6) est en principe infini - sur tous les éléments de la base des états à une particule, il s'ensuit que la fonction d'onde BCS est une *superposition* d'états possédant chacun un nombre différent de particules. C'est assez ennuyeux, puisque le noyau atomique possède un nombre déterminé de particules. Si en physique du solide, dont provient la théorie BCS, le nombre de particules impliquées est de l'ordre de 10^{23}, ce qui rend les fluctuations BCS négligeables, en physique nucléaire, la violation de la conservation du nombre de particules entraîne des conséquences importantes. Il va donc être nécessaire de développer des techniques de projection, nous en reparlerons à la section D.2. Cependant, avant d'aller plus loin, remarquons que la fonction (D.6) génère des états comportant toujours un nombre pair de particules. Cette remarque aura son importance dans le paragraphe sur les quasi-particules (section D.1.4).

[2]**Une paire est indépendante d'une autre paire, mais les nucléons d'une paire donnée ne sont naturellement pas indépendants l'un de l'autre.**

D.1.3 Equations BCS

Dans l'équation (D.6), les coefficients u_α et v_α sont inconnus. Pour les déterminer, on va utiliser un principe variationnel. Si le noyau est dans son état fondamental, alors son énergie doit être minimale. L'énergie est donnée par la fonctionnelle :

$$E[\phi] = \frac{\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \tag{D.11}$$

L'énergie est une fonctionnelle de la fonction d'onde ϕ (D.6). Comme l'énergie est minimale, il « suffit » donc de minimiser $E[\phi]$ par rapport à ϕ, c'est-à-dire par rapport à u_α et v_α. Cependant, il faut essayer de tenir compte de la non-conservation du nombre de particules. Pour cela, on ajoute la condition que la valeur *moyenne* de l'opérateur nombre de particule sur l'état BCS doit être égal au nombre de particules du système :

$$\langle\phi|\hat{N}|\phi\rangle = N \tag{D.12}$$

Il est possible de résoudre les équations (D.11) et (D.12) simultanément par l'intermédiaire de la technique des multiplicateurs de Lagrange. L'idée consiste donc à minimiser non pas (D.11), mais l'expression suivante :

$$\boxed{\delta\left(\langle\phi|\hat{H} - \lambda\hat{N}|\phi\rangle\right)_{|(u_\alpha, v_\beta)} = 0} \tag{D.13}$$

Le paramètre λ est le multiplicateur de Lagrange. Il correspond en fait à l'énergie de Fermi. L'indice (u_α, v_β) rappelle que la variation se fait concrètement par rapport à ces deux ensembles de variables.

a) Equations générales

Il n'est pas franchement intéressant de présenter ici la dérivation détaillée des équations BCS, d'autant plus qu'elle est donnée dans tous les ouvrages sérieux sur le sujet, citons entre autres sources possibles [Lan64, Rin80, Die87]. Commençons par définir l'hamiltonien d'appariement H_p :

$$H_p = 2 \sum_{\alpha>0\,\beta>0} G_{\alpha\bar{\alpha}\bar{\beta}\beta}\; c^\dagger_\alpha c^\dagger_{\bar{\alpha}} c_\beta c_{\bar{\beta}} \tag{D.14}$$

La notation $\alpha, \beta > 0$ a la même signification qu'au paragraphe précédent. Cette forme de l'hamiltonien est un cas particulier de l'hamiltonien à deux corps le plus général (le second terme dans (D.1)). Notons :

$$G_{\alpha\beta} \equiv G_{\alpha\bar{\alpha}\beta\bar{\beta}}$$

On peut montrer que :

$$\langle\phi|\hat{H}_p - \lambda\hat{N}|\phi\rangle = \sum_{\beta>0} 2v_\beta^2(e_\beta - \lambda) + \sum_{\beta>0} \Delta_\beta u_\beta v_\beta + \sum_{\beta>0} G_{\beta\beta} v_\beta^4 \tag{D.15}$$

avec :

$$\boxed{\Delta_\beta = \sum_{\alpha>0} G_{\alpha\beta} u_\alpha v_\alpha} \tag{D.16}$$

On introduit la notation :

$$\tilde{e}_\alpha = (e_\alpha - \lambda) + G_{\alpha\alpha} v_\alpha^2 \tag{D.17}$$

et en appliquant la condition de minimisation (D.13) sur (D.15), on arrive à l'ensemble d'équations suivant, appelées équations BCS :

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta_\beta &= \frac{1}{2}\sum_\alpha G_{\alpha\beta} \frac{\Delta_\alpha}{\sqrt{\tilde{e}_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}} && \text{(D.18)} \\ N &= 2\sum_\alpha v_\alpha^2 && \text{(D.19)} \end{aligned}}$$

où les nombres d'occupation vérifient les relations :

$$\boxed{u_\alpha^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\tilde{e}_\alpha}{\sqrt{\tilde{e}_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}}\right) \quad \text{et} \quad v_\alpha^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\tilde{e}_\alpha}{\sqrt{\tilde{e}_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}}\right)} \tag{D.20}$$

Pour résoudre complètement le problème, il faut donc résoudre le système d'équations couplées (D.16), (D.18)-(D.19) et (D.20). Le résultat nous donne les nombres d'occupation des niveaux α.

b) Appariement monopolaire

Un cas particulier de (D.16) est le cas $G_{\alpha\beta} = G$, i.e. l'interaction d'appariement est constante pour toutes les paires. C'est l'appariement *monopolaire*. On l'a dit, seuls les nucléons liés par l'opération de renversement du temps forment des paires dans la théorie BCS), et dans l'approximation monopolaire, l'interaction entre les nucléons d'une paire est la même pour toutes les paires. Le « paramètre de gap » Δ_α devient indépendant de l'état individuel :

$$\Delta = G\sum_\alpha u_\alpha v_\alpha \tag{D.21}$$

Le terme en v^4 dans (D.15) est souvent négligé, et l'on introduit la quantité E_α :

$$\boxed{E_\alpha = \sqrt{(e_\alpha - \lambda)^2 + \Delta_\alpha^2}} \tag{D.22}$$

Les nombres d'occupation deviennent alors :

$$u_\alpha^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{e_\alpha - \lambda}{E_\alpha}\right); \qquad v_\alpha^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{e_\alpha - \lambda}{E_\alpha}\right) \tag{D.23}$$

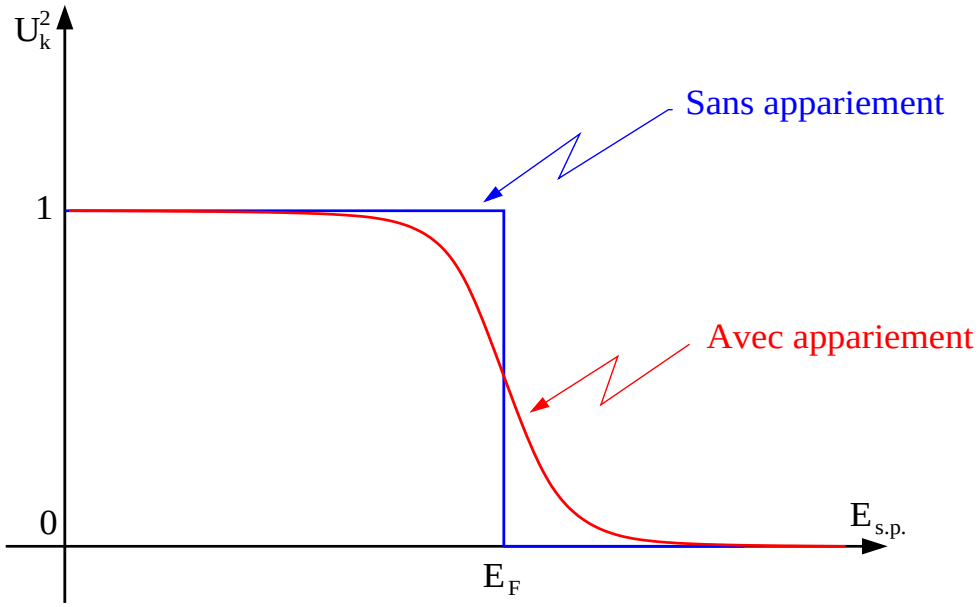


FIG. D.1 – *Cette figure illustre la façon dont l'appariement modifie l'occupation des niveaux individuels. Sans appariement, tous les niveaux jusqu'au niveau de Fermi sont occupés, tous les niveaux au-dessus du niveau de Fermi sont vides. En présence d'appariement, l'occupation des niveaux change légèrement, principalement autour du niveau de Fermi.*

La figure D.1 représente schématiquement la modification d'occupation des niveaux due à l'appariement.

Le cas simplifié de l'appariement monopolaire met également en évidence une des faiblesses de la théorie BCS. En effet, les équations BCS deviennent dans cette limite :

$$\sum_\alpha \frac{1}{\sqrt{\tilde{e}_\alpha^2 + \Delta^2}} = \frac{2}{G} \tag{D.24}$$

et cette équation n'admet une solution non-triviale que si :

$$\frac{G}{2} \sum_\alpha \frac{1}{|\tilde{e}_\alpha|} > 1 \tag{D.25}$$

Il apparaît donc une valeur G_{crit} en-deçà de laquelle les solutions superfluides (i.e. avec appariement) ne peuvent exister. Cette difficulté peut être éliminée avec l'utilisation des méthodes de projection.

D.1.4 Les quasi-particules

L'un des intérêts de la notion de quasi-particule est la possibilité d'explorer l'influence de l'appariement sur les états excités du noyau de façon très naturelle et élégante. Rappelons l'expression (D.5) de l'opérateur de création d'une paire dans le cadre de la théorie BCS :

$$\hat{P}_\alpha = u_\alpha + v_\alpha \; c_\alpha^\dagger c_{\bar{\alpha}}^\dagger \tag{D.26}$$

Introduisons les opérateurs $(q_\alpha, q_{\overline{\alpha}})$ selon les relations :

$$q_\alpha = u_\alpha c_\alpha - v_\alpha c^\dagger_{\overline{\alpha}} \tag{D.27}$$
$$q_{\overline{\alpha}} = u_\alpha c_{\overline{\alpha}} - v_\alpha c^\dagger_\alpha \tag{D.28}$$

En utilisant les relations d'anti-commutation des opérateurs $c_\alpha, c^\dagger_\alpha$, et le fait que $c_\alpha|0\rangle = 0$, on peut montrer que l'action de l'opérateur de création d'une paire BCS, relation (D.5), sur $|0\rangle$ s'écrit en fonction des $(q_\alpha, q_{\overline{\alpha}})$:

$$\hat{P}|0\rangle = \frac{1}{v_\alpha} q_\alpha \, q_{\overline{\alpha}}|0\rangle \tag{D.29}$$

De la même façon :

- on introduit l'opérateur $q^\dagger_\alpha$ en prenant le conjugué hermitique des équations (D.27)-(D.28) ;
- les opérateurs $(q_\alpha, q^\dagger_\alpha)$ vérifient les relations d'anti-commutation : ce sont donc des opérateurs, repectivement de destruction et de création de fermions ; ces fermions sont appelés *quasi-particules*
- la fonction d'onde BCS correspond au vide de quasi-particules :

$$|\phi\rangle \sim \prod_\alpha q_\alpha q_{\overline{\alpha}}|0\rangle$$

Pour interpréter plus facilement ce à quoi correspondent les quasi-particules, nous allons noter $\{\mu\}$ l'ensemble des états individuels qui sont occupés (états dits de « trous »), et $\{n\}$ l'ensemble des états qui sont vides (états dits de « particule ») : cette notation n'a de sens qu'à la limite $\Delta = 0$ c'est-à-dire en l'absence d'appariement (puisque sinon, les états ne sont ni complétement vides, ni complètement occupés). Cette restriction n'est pas génante ici, car l'on ne se soucie que de l'interprétation physique de ce qu'est une quasi-particule. On a les égalités suivantes :

$$c^\dagger_\mu|\phi\rangle = 0 \tag{D.30}$$
$$c_n|\phi\rangle = 0 \tag{D.31}$$

En effet, on ne peut pas créer une particule dans un état μ, puisque cet état est par définition déjà occupé, et que les nucléons sont des fermions. De même, on ne peut pas détruire un nucléon d'un état n puisque cet état ne contient pas de nucléons. Utilisons maintenant le fait que la fonction d'onde BCS est le vide de quasi-particules :

$$q_\alpha|\phi\rangle = 0 \tag{D.32}$$

D'après (D.30)-(D.31), cette dernière relation se traduit pour les ensembles $\{\mu\}$ et $\{n\}$ par :

$$q_\mu|\phi\rangle = 0 \;\Rightarrow u_\mu = 0 \;\Rightarrow\; q_\mu = c^\dagger_{\overline{\mu}} \tag{D.33}$$
$$q_n|\phi\rangle = 0 \;\Rightarrow v_n = 0 \;\Rightarrow\; q_n = c_n \tag{D.34}$$

Par conjugaison hermitique, on obtient :

$$q^\dagger_\mu = c_{\overline{\mu}} \tag{D.35}$$
$$q^\dagger_n = c^\dagger_n \tag{D.36}$$

Par conséquent, créer une quasi-particule revient soit à ôter une particule d'un état occupé μ, soit à mettre un nucléon dans un état vide n. A l'inverse, détruire une quasi-particule revient soit à remettre un nucléon dans un état de trou μ (préalablement vidé), soit à enlever un nucléon d'un état de particule (préalablement rempli). Les quasi-particules se présentent donc comme des *excitations* du système. D'autre part, il est intéressant de remarquer qu'en introduisant la représentation de quasi-particules, on remplace le problème d'un gaz de N particules en interaction par un gaz de $N/2$ particules sans interaction, ce qui d'un point de vue pratique peut se révéler extrèmement utile.

D.1.5 Interprétation des équations BCS

Il est plus facile de comprendre le rôle physique joué par chacun des termes intervenant dans les équations BCS si l'on se restreint à l'étude du cas de l'appariement monopolaire. Prenons donc : $G_{\alpha\beta} = G$. Dans ce cas, l'équation (D.16) devient :

$$\Delta = G \sum_{\alpha} u_\alpha v_\alpha \tag{D.37}$$

L'énergie de l'état fondamental pour un noyau ayant la fonction d'onde (D.6) est par définition l'expression (D.15). Pour un appariement monopolaire, cette dernière expression se transforme en :

$$\mathcal{E}_{g.s.} = \sum_{\alpha} 2v_\alpha^2 (e_\alpha - \lambda) - \frac{\Delta^2}{G} \tag{D.38}$$

Calculons maintenant l'énergie d'un état à une quasi-particule construit à partir de l'état BCS. Par définition, l'énergie d'excitation de cet état est :

$$\delta\mathcal{E}_\alpha = \langle\phi|q_\alpha \hat{H}\, q_\alpha^\dagger|\phi\rangle - \langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle \tag{D.39}$$

Le calcul conduit à [Die87] :

$$\boxed{\delta\mathcal{E}_\alpha \sim \sqrt{(e_\alpha - \lambda)^2 + \Delta^2} = E_\alpha} \tag{D.40}$$

où E_α est précisément l'expression (D.22). De la même façon, on montre sans trop de difficultés que [Die87] :

$$\delta\mathcal{E}_{\alpha\beta} \sim E_\alpha + E_\beta \tag{D.41}$$

où $\delta\mathcal{E}_{\alpha\beta}$ est l'énergie d'excitation d'un état à deux quasi-particules (α, β). En résumé :

1. les quasi-particules représentent des excitations du noyau ;
2. l'énergie d'excitation d'une quasi-particule faisant intervenir les états individuels $(\alpha, \overline{\alpha})$ est :

$$E_\alpha = \sqrt{(e_\alpha - \lambda)^2 + \Delta_\alpha^2} \tag{D.42}$$

3. l'énergie d'une excitation à deux quasi-particules est au premier ordre la somme des énergies de chacune des deux quasi-particules.

Par ailleurs, étant donné que (a) les opérateurs de quasi-particules mélangent à la fois les opérateurs de création et d'anihilation de particules et (b) l'état fondamental de BCS est une superposition d'états avec un nombre pair de particules, cela signifie qu'un état à une quasi-particule $q_\alpha|\phi\rangle$ est une superposition d'états ayant un nombre impair de particules. Par conséquent, on peut considérer que si l'état fondamental d'un noyau pair-pair correspond au vide de quasi-particules, celui d'un noyau pair-impair correspond à l'excitation d'une quasi-particule du noyau pair-pair voisin. On peut aller encore un peu plus loin et expliquer ainsi le « gap » des noyaux pair-pair : d'une part, l'excitation d'un noyau pair-pair ne peut contenir qu'un nombre pair de quasi-particules ; d'autre part, sur l'expression de Γ_α (dans le cas de l'appariement monopolaire), on voit que :

$$E_\alpha \geq \Delta \tag{D.43}$$

Cela signifie que pour les noyaux pair-pair, il existe une énergie d'excitation minimale, qui vaut 2Δ (il faut au moins deux quasi-particules, chacune ayant au moins une énergie Δ). Par contre, pour un noyau pair-impair, ou impair-pair, l'énergie d'excitation minimale est :

$$\delta\mathcal{E}_\mu = \langle\phi|q_\alpha\,\hat{H}\,q_\alpha^\dagger|\phi\rangle - \langle\phi|q_{\alpha_0}\,\hat{H}\,q_{\alpha_0}^\dagger|\phi\rangle \tag{D.44}$$

où q_{α_0} correspond à l'énergie de quasi-particule minimale pour le noyau pair-pair décrit par $|\phi\rangle$ (c'est cette énergie d'excitation minimale qui est précisément l'énergie de l'état fondamental du noyau impair-pair). Sur la dernière relation, on voit qu'il n'y a pas de limite inférieure à l'énergie d'excitation pour les noyaux impairs. Celle-ci peut être « arbitrairement » petite, par exemple si les énergies indivuelles e_α mises en jeu sont très proches l'une de l'autre.

D.2 PROJECTION DU NOMBRE DE PARTICULES

Nous avons vu dans la partie précédente que les fonctions d'onde BCS ne conservaient pas le nombre de particules. Si, dans la procédure de minimisation de l'Hamiltonien par rapport aux paramètres (u_α, v_α), on rajoute la contrainte (D.12) :

$$\langle\phi|\,\hat{N}\,|\phi\rangle = N \tag{D.45}$$

seule la valeur moyenne du nombre de particules est conservée. En d'autre termes, le nombre de particules dans le système fluctue selon l'état quantique de ce système, autour d'une valeur moyenne égale au nombre réel de particules. Si ces fluctuations sont faibles, on peut espérer qu'elles n'aient pas de conséquences trop importantes pour les applications. C'est par exemple le cas en physique du solide, ou le nombre de particules en jeu est considérable, et ses fluctuations sont donc négligeables. Par contre, pour un système avec quelques dizaines, ou au plus quelques centaines de particules, une variation de N de plusieurs unités n'est pas négligeable.

La solution à ce problème consiste naturellement à *projeter* les fonctions d'onde sur des états qui conservent le nombre de particules. Il y a deux façons d'effectuer la projection :

1. on projette la fonction d'onde (D.6) avant de déterminer les paramètres (u_α, v_α) : c'est la *projection avant variation*;
2. une fois les paramètres (u_α, v_α) déterminés selon la méthode exposée dans la partie précédente, on projette la fonction d'onde obtenue sur les états ayant un bon nombre de particules : c'est la méthode (fort logiquement) appelée *projection après variation.*

Il est en général admis que la première méthode, la projection avant variation, donne un résultat meilleur (au sens : plus proche de la réalité) que la seconde méthode. En effet, appliquer d'abord la théorie BCS sur une fonction d'onde qui ne conserve pas le nombre de particules va bien évidemment conduire à des résultats légèrement faux (voire à des résultats complètement faux). La projection des dits résultats sur l'espace des états à bon nombre de particules ne va donc probablement pas compenser l'erreur initiale.

Il y a naturellement des différences sensibles entre la théorie BCS sans conservation du nombre de particules, et celle avec. Il semble que ces différences soient d'autant plus grandes que l'appariement est faible et la densité de niveaux autour du niveau de Fermi est petite (donc par exemple pour les noyaux plutôt légers) [Die87]. Deux différences remarquables sont d'une part qu'il existe toujours une solution non-triviale dans la solution avec conservation du nombre de particules, d'autre part que le potentiel chimique μ dépend des états individuels. Le potentiel chimique caractérise la réaction du système à l'ajout ou au retrait d'une particule du système :

$$\mu = \frac{d}{dA}\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle \tag{D.46}$$

Dans une théorie où le nombre de particules est conservé, cette grandeur dépend de l'état individuel dans lequel on ajoute (ou duquel ont retranche) le nucléon.

Malheureusement, dans le cas des théories auto-cohérentes, il se trouve que la méthode de projection avant variation est plus difficile à mettre en oeuvre. La plupart du temps, c'est la deuxième méthode qui est choisie. En théorie RMF, où les calculs sont encore plus complexes, c'est une méthode approchée qui est choisie [Rin96] : on ne fait aucune projection, mais, en plus de la contrainte sur le nombre moyen de particules, on essaie de limiter la fluctuation de ce nombre $\langle\Delta\hat{N}\rangle$ (prescription de Lipkin-Nogami).

D.2.1 Fonction d'onde projetée

Notons $\hat{N}$ l'opérateur du nombre de particules. En seconde quantification, son expression en termes d'opérateurs de création et d'annihilation est :

$$\hat{N} = \sum_\alpha \left(c_\alpha^\dagger c_\alpha + c_{\bar{\alpha}}^\dagger c_{\bar{\alpha}}\right) \tag{D.47}$$

Si $\hat{N}$ commute avec l'hamiltonien du système, on a, entre autres :

$$[\hat{H}, e^{i\varphi\hat{N}}] = 0, \qquad \forall\varphi \in \mathbb{R} \tag{D.48}$$

Par conséquent, si $|\Phi\rangle$ est une fonction d'onde du système (une fonction à N particules), ayant la valeur propre E, on a :

$$\hat{H}\left(e^{i\varphi\hat{N}}|\Phi\rangle\right) = E\left(e^{i\varphi\hat{N}}|\Phi\rangle\right) \tag{D.49}$$

En d'autres termes, tous les états $e^{i\varphi\hat{N}}|\Phi\rangle$ sont dégénérés par rapport à la variable φ. Par ailleurs, dans l'espace des « nombres de particules », l'opérateur

$$U(\varphi) = e^{i\varphi\hat{N}}$$

peut être vu comme un opérateur de rotation[3]. φ est l'angle de rotation, appelé angle de jauge [Rin80]. Il est assez rapide de se convaincre que les fonctions propres de $U(\varphi)$ sont :

$$\xi_n(\varphi) = \frac{1}{2\pi}e^{-in\varphi}, \qquad n \in \mathbb{N} \tag{D.50}$$

A partir d'un ket $|\Phi\rangle$ quelconque, construisons le ket $|\psi\rangle$ tel que :

$$|\psi\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi f(\varphi) e^{i\varphi\hat{N}}|\Phi\rangle \tag{D.51}$$

On a les propriétés suivantes :

- si $|\Phi\rangle$ est une fonction propre du système avec la valeur propre E, alors, $|\psi\rangle$ est également une fonction propre de l'hamiltonien du système avec la même valeur propre E. En effet :

$$\hat{H}|\psi\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \hat{H}\left(f(\varphi)e^{i\varphi\hat{N}}\right)|\Phi\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi f(\varphi)\underbrace{\hat{H}\left(e^{i\varphi\hat{N}}|\Phi\rangle\right)}_{=Ee^{i\varphi\hat{N}}|\Phi\rangle} = E|\psi\rangle \tag{D.52}$$

- l'espace engendré par les fonctions $|\psi\rangle$, que nous noterons $\mathcal{E}$, est invariant sous l'action de l'opérateur $U(\varphi)$. En effet, pour φ_0 quelconque fixé :

$$\begin{aligned} U(\varphi_0)|\psi\rangle &= e^{i\varphi_0\hat{N}}\int_0^{2\pi} d\varphi f(\varphi)e^{i\varphi\hat{N}}|\Phi\rangle \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi f(\varphi)e^{i(\varphi+\varphi_0)\hat{N}}|\Phi\rangle \\ &= \int_0^{2\pi} d\theta \underbrace{f(\theta-\varphi_0)}_{=g(\theta)}e^{i\theta\hat{N}}|\Phi\rangle \\ &= \int_0^{2\pi} d\theta g(\theta)e^{i\theta\hat{N}}|\Phi\rangle \ \in \mathcal{E} \end{aligned}$$

[3] **De la même façon que dans l'espace normal, l'opérateur de rotation autour d'un axe x pour une particule sans spin est $\hat{R}_x = e^{i\varphi\hat{\ell}_x}$, où $\hat{\ell}_x$ est la composante x du moment angulaire orbital.**

En conclusion, à partir d'une fonction d'onde $|\Phi\rangle$ du système qui ne conserve pas le nombre de particules, il est possible de construire une fonction $|\Psi\rangle$, ayant même valeur propre que la fonction initiale $|\Phi\rangle$, mais qui soit invariante par rotation dans l'espace « nombre de particules ». Or, de la même façon qu'un système invariant par rotation (dans l'espace usuel) conserve le moment angulaire, un système invariant par rotation dans l'espace des nombres de particules conserve le nombre de particules. Par conséquent, la fonction $|\Psi\rangle$ conserve le nombre de particules.

On voit donc que, à partir d'une fonction BCS par exemple, qui ne conserve pas le nombre de particules, on peut, par projection, construire une nouvelle fonction d'onde du système, ayant les mêmes énergies propres, mais qui, elle, conserve le nombre de particules. Il nous reste maintenant à trouver comment projeter sur le bon espace, i.e. sur l'espace à N particules. Pour cela, appliquons la règle de construction (D.51) avec non pas une fonction $f(\varphi)$ quelconque, mais une des fonctions $\xi_n(\varphi)$. Notons $\hat{P}_n$ l'opérateur :

$$\hat{P}_n = \int_0^{2\pi} d\varphi \; \xi_n(\varphi) e^{i\varphi\hat{N}} \tag{D.53}$$

La relation (D.53) peut se réécrire à l'aide de (D.50) :

$$\boxed{\hat{P}_n = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \; e^{i\varphi(\hat{N}-n)}} \tag{D.54}$$

Montrons que l'opérateur (D.54) est un projecteur sur le sous-espace à n particules. Pour démontrer cette assertion, considérons $|k\ \alpha\rangle$, un état avec k particules, et caractérisé par les nombres quantiques α (ce peuvent être par exemple N, ℓ, j et m pour des noyaux sphériques, ou bien les labels de Nilsson, etc.). La relation de fermeture de la base $\{|k\ \alpha\rangle\}$ s'écrit :

$$\sum_{k,\alpha} |k\ \alpha\rangle\langle k\ \alpha| = 1 \tag{D.55}$$

Réécrivons le projecteur (D.54) en utisant deux fois la décomposition (D.55). Il vient :

$$\begin{aligned}
\hat{P}_n &= \sum_{k,\alpha}\sum_{l,\beta} |k\ \alpha\rangle\langle k\ \alpha| \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \underbrace{e^{i\varphi(\hat{N}-n)}|l\ \beta\rangle}_{=e^{i\varphi(l-n)}|l\ \beta\rangle} \langle l\ \beta| \\
&= \sum_{k,\alpha}\sum_{l,\beta} |k\ \alpha\rangle\langle k\ \alpha| \underbrace{\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{i\varphi(n-l)}}_{=\delta_{ln}} |l\ \beta\rangle\langle l\ \beta| \\
&= \sum_{k,\alpha}\sum_{l,\beta} |k\ \alpha\rangle\langle k\ \alpha|\delta_{nl}|l\ \beta\rangle\langle l\ \beta| \\
&= \sum_{k,\alpha}\sum_{\beta} |k\ \alpha\rangle\langle k\ \alpha|n\ \beta\rangle\langle n\ \beta| \\
&= \sum_{\beta} |n\ \beta\rangle\langle n\ \beta|
\end{aligned}$$

Donc :

$$\boxed{\hat{P}_n = \sum_{\beta} |n\ \beta\rangle\langle n\ \beta|} \tag{D.56}$$

et c'est bien la forme traditionnelle d'un projecteur sur le sous-espace à n particules.

D.2.2 Application à la théorie BCS

Dans la théorie BCS, il nous faut minimiser une expression du type :

$$E[\phi] = \frac{\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \tag{D.57}$$

Dans notre cas, la fonction d'essai sera la fonction BCS (D.6) mais comme nous voulons maintenant conserver le nombre de particules (ce qui n'était pas le cas dans la fonction (D.6)), nous allons d'abord projeter (D.6) sur le sous-espace à N particules. Si l'on note $|\Psi\rangle$ la fonction d'onde projetée :

$$|\Psi\rangle = \hat{P}_N|\phi\rangle \tag{D.58}$$

avec $\hat{P}_N$ défini par la relation (D.54) dans laquelle on fait $n = N$, alors il nous faut maintenant minimiser :

$$E[\Psi] = \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \tag{D.59}$$

Autrement dit, en fonction de la fonction d'essai BCS (D.6) :

$$E[\phi] = \frac{\langle\phi|\hat{P}_N\hat{H}\hat{P}_N|\phi\rangle}{\langle\phi|\hat{P}_N\hat{P}_N|\phi\rangle} \tag{D.60}$$

Mais comme $\hat{P}_N^2 = \hat{P}_N$ (c'est une propriété générale bien connue des projecteurs), et que $\hat{P}_N$ commute avec l'hamiltonien, conséquence de la relation (D.48), l'équation (D.60) se ramène en fait à :

$$E[\phi] = \frac{\langle\phi|\hat{H}\hat{P}_N|\phi\rangle}{\langle\phi|\hat{P}_N|\phi\rangle} \tag{D.61}$$

Le code WS-ODD contient l'option de projection du nombre de particules selon la procédure qui vient d'être présentée.

Bibliographie

[Abr64] A. Abramovitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dower Publications, Inc., New-York, 1964.

[Afa00] A. V. Afanasjev, G. Q. Lalazissis, and P. Ring, Phys. Rev. **62** (2000) 031302.

[Afa96] A. V. Afanasjev, J. König, and P. Ring, Nucl. Phys. **A608** (1996) 107.

[Afa98] A. V. Afanasjev, G. Q. Lalazissis, and P. Ring, Nucl. Phys. **A634** (1998) 395.

[Bak95] C. Baktash, B. Haas, and W. Nazarewicz, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. **45** (1995) 485.

[Bar00] A. Baran, Phys. Rev. **61** (2000) 024316.

[Bel90] M. Le Bellac, *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, Editions du CNRS, 1990.

[Ber91] J. F. Berger, Ecole joliot-curie de physique nucléaire, 1991.

[Bie53] L. C. Biedenharn and M. E. Rose, Rev. Mod. Phys. **25** (1953) 729.

[Boh69] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, W. A. Benjamin, 1969.

[Bol72] M. Bolsterli, E. O. Fiset, J. R. Nix, and J. L. Norton, Phys. Rev. **C5** (1972) 1050.

[Bou87] A. Bouyssy, J.-F. Mathiot, N. V. Giai, and S. Marcos, Phys. Rev. **36** (1987) 380.

[Bou96] A. Bouguettoucha, *Théorie auto-cohérente de Hartree-Fock et symétrie microscopiques du noyau*, PhD thesis, Université Louis-Pasteur, Strasbourg I, 1996.

[Bra72] M. Brack, J. Damgaard, A. S. Jensen, H. C. Pauli, V. M. Strutinsky, and C. Y. Wong, Rev. Mod. Phys. **44**(2) (1972) 320.

[Bro78] R. Brockmann, Phys. Rev. **C18** (1978) 1510.

[But96] P. Butler and W. Nazarewicz, Rev. Mod. Phys. **68** (1996) 349.

[Byr90] T. Byrski, F. A. Beck, D. Curien, C. Schuck, P. Fallon, A. Alderson, I. Ali, M. A. Bentley, A. M. Bruce, P. D. Forsyth, D. Howe, J. W. Roberts, J. F. Sharpey-Schafer, G. Smith, and P. J. Twin, Phys. Rev **C64** (1990) 1650.

[Cha95] E. Chabanat, *Interactions effectives pour des conditions extrêmes d'isospin*, PhD thesis, Université Claude Bernard - Lyon I, 1995.

[Con35] E. U. Condon and G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, 1935.

[Day67] B. D. Day, Rev. Mod. Phys. **39** (1967) 719.

[DeV87] H. d. Vries, C. W. d. Jager, and C. d. Wries, Atom. Data. and Nucl. Data. Tab. **36** (1987) 495.

[Die87] K. Dietrich, Ecole joliot-curie de physique nucléaire, 1987.

[Dob96] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and T. R. Werner, Z. Phys. **A354** (1996) 27.

[Dob97] J. Dobaczewski and J. Dudek, Comp. Phys. Com. **102** (1997) 166.

[Dud78] J. Dudek and T. R. Werner, J. Phys. **10**(4) (1978) 1543.

[Dud79] J. Dudek, A. Majhofer, J. Skalski, T. Werner, S. Cwiok, and W. Nazarewicz, J. Phys. **10**(5) (1979) 1359.

[ElA00] N. El Aouad, J. Dobaczewski, J. Dudek, X. Li, W. D. Luo, H. Molique, A. Bouguettoucha, T. Byrski, F. A. Beck, D. Curien, G. Duchène, C. Finck, and B. Kharraja, Nucl. Phys. **A676** (2000) 155.

[Gre72] L. D. Miller and A. E. S. Green, Phys. Rev. **C5** (1972) 1972.

[Hey90] K. L. G. Heyde, *The Nuclear Shell Model*, Springer-verlag, 1990.

[Jam69] A. N. James, P. T. Andrews, P. Kirkby, and B. G. Lowe, Nucl. Phys. **A138** (1969) 145.

[Koe89] W. Koepf and P. Ring, Nucl. Phys. **A493** (1989) 61.

[Koe91] W. Koepf and P. Ring, Z. Phys. **339** (1991) 81.

[Kon93] J. König and P. Ring, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 3079.

[Lal93] G. A. Lalazissis, J. König, and P. Ring, Phys. Rev. **C55** (1997) 540.

[Lal99] G. A. Lalazissis, S. Raman, and P. Ring, Atom. Dat. Nucl. Dat. Tab. **71** (1999) 1.

[Lan64] A. M. Lane, *Nuclear Theory*, W. A. Benjamin, Inc., 1964.

[Lan77] L. D. Landau and E. M. Lifchitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon Press, 1977.

[Men86] F. Menas, *Etude des changements de forme dans les noyaux en rotation*, PhD thesis, Université Louis-Pasteur, Strasbourg I, 1986.

[Mil72] L. D. Miller, Phys. Rev. **C9** (1974) 537.

[Mol81] P. Möller and J. R. Nix, Nucl. Phys. **A361** (1981) 117.

[Nak76] K. Nakamura, N. Hiramatsu, T. Kamae, H. Muramatsu, N. Izutsu, and Y. Watase, Nucl. Phys. **A271** (1976) 221.

[Ner94] B. Nerlo-Pomorska and K. Pomorski, Z. Phys. **A348** (1994) 169.

[Rag93] I. Ragnarsson, Nucl. Phys. **A557** (1993) 167.

[Rei00] P.-G. Reinhard, M. Bender, and J. A. Maruhn, nucl-th/0012095 (2000).

[Rei86] P.-G. Reinhard *et al.*, Z. Phys. **A323** (1986) 13.

[Rei89] P.-G. Reinhard, Rep. Prog. Phys. **52** (1989) 439.

[Rig99] C. Rigollet, P. Bonche, H. Flocard, and P.-H. Heenen, Phys. Rev. **C59** (1999) 3120.

[Rin80] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer Verlag, 1980.

[Rin90] Y. K. Gambhir, P. Ring, and A. Thimet, Ann. Phys. **198** (1990) 132.

[Rin96] P. Ring, Prog. Part. Nucl. Phys. **37** (1996) 193.

[Roh96] Rohozinski, Phys. Rev. **C56** (1997) 165.

[Ros68] E. Rost, Phys. Lett. **B26** (1968) 184.

[Sch62] S. S. Schweber, *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory*, Harper and Row, 1962.

[Ser86] B. D. Serot and J. D. Walecka, Adv. in Nucl. Phys. **16** (1986).

[Ser92] B. D. Serot, Rep. Prog. Phys. **55** (1992) 1855.

[Ser97] B. Serot and J. D. Walecka, Int. J. Mod. Phys. **E6** (1997) 515.

[Sha93] M. M. Sharma, M. A. Nagarajan, and P. Ring, Phys. Lett. **B312** (1993) 377.

[Sob01] A. a. Sobiczewki, Phys. Rev. **C63** (2001) 034306.

[Voi83] M. J. A. d. Voigt, J. Dudek, and Z. Szymanski, Rev. of Mod. Phys. **55** (1983) 949.

[Wer95] T. R. Werner and J. Dudek, Atom. Data. and Nucl. Data. Tab. **50** (1995) 179.

[Zha91] J.-K. Zhang and D. S. Onley, Phys. Rev. **C43** (1991) R942.

[Zha94] J.-K. Zhang and D. S. Onley, Phys. Rev. **C49** (1994) 762.

Index

– Symboles –

^{152}Dy **108**
  Déformations d'équilibre 109
  Moment $\mathfrak{J}^{(1)}$ 113
  Moment $\mathfrak{J}^{(2)}$ 112
  Routhiens individuels 109
RMF **21**
  Equations de la 30
  Equations stationnaires 31, **31**
    Hypothèses 31

– A –

Action .. voir Principe de moindre action
Alignement effectif
  définition 123
  dans la région de masse $A \sim 150$ 124
Amplitude de probabilité 175
  et état de Woods-Saxon 177
Appariement **195**
Approximation
  de cranking 100

– B –

Base B 60, **179**
  et matrices de Pauli 185
Base cartésienne
  et oscillateur harmonique 58
Base T 60, **181**
  et matrices de Pauli 185
BCS
  équations 199, 200
  appariement monopolaire 200
  et nombre de particules 198
  excitations 203
  fonction d'onde 197, 198
  Gap Δ 200, 204
  interprétation 203
  occupations u_k et v_k 200
  quasi-particules
    énergie des 203
    définition 201
  théorie 196
Bethe-Weiszäcker (formule de) 127
Biedenharn-Rose
  Convention de phase 178
Brisure
  de parité 158
  spontanée de symétrie 158

– C –

Condon-Shortley
  Convention de phase 178
Convention de phase
  de Biedenharn-Rose 178
  de Condon-shortley 178
Correction de couches
  noyaux statiques 129
Couplage
  non-linéaire 29
Couplage des mésons avec les nucléons 24
Couplages dérivatifs 24
Courant
  électromagnétique 31
  baryonique 31
  iso- 31
Covariance relativiste 22
Cranking (approximation de) **100**
  énergies individuelles 103
  Postulats 101
  routhiens 102

– D –

Déformation

énergie totale 127
Déformations (β, γ)
Définition 138
Symétries 138
Déformations octupolaires
coexistence 151
dans ^{80}Zr 145
dans les noyaux super-lourds 158
et isospin 155
Densité
de niveaux 129
lissée 130, 131
scalaire 30
Densités de charge **82**
Dirac
Bi-spineur de 39
Champ moyen 38
distribution 130
Equation de 30
et renversement du temps . 33, 118
et énergie cinétique 42
Expression des potentiels 42
Forme stationnaire de l'équation de 38
Limite non-relativiste de l'équation de 41, 42
Linéarisation de l'équation de 40
Matrices de 39
Potentiel $\hat{V}_p$ 42
Potentiel spin-orbite 42
Distribution de Dirac 130

– **E** –

Effet Landau-Zener **117**
Eléments de matrice
calcul des 61
Energie
à spin fixé 135
de Coulomb 128
de Fermi lissé 130
de surface 127
macroscopique 127
microscopique
avec appariement 133
noyaux en rotation 135
noyaux statiques 129
Equation
de Schrödinger
et cranking 101, 102
Equations d'Euler-Lagrange 22
Equations de Klein-Gordon 30
Etat de Woods-Saxon
en coordonnées sphériques 177
Etats profondément liés 78

– **F** –

Fonction
de lissage 131
Fonction d'onde
en coordonnées sphériques 175
radiale 176
Fonctions d'onde **174**
Fréquence de rotation 104

– **G** –

Gauss-Hermite (méthode d'intégration) 63
Goutte liquide (modèle de) 127
Grande composante ξ
en fonction de η 39
Equation du mouvement 39

– **H** –

Hamiltonien
en théorie des champs 22
et appariement 196
Hauts-spins 99
Hermite
polynômes 59
Hill-Wheeler ... voir Déformations (β, γ)

– **I** –

Intégration (méthode) 63
Interaction tensorielle 29
Invariants relativistes 23

– **L** –

lagrangien
d'interaction 24
de la RMF 26

des bi-spineurs de Dirac 23
effectif 27

– M –

Mésons
γ 25
ω 25
π 25
ρ 25
σ 25
Choix des 25
Classification des 23
Equations de propagation ..... voir Equations de Klein-Gordon
Magnétisme nucléaire 35, **118**
et moments d'inertie 118
Masse effective
Approximation de 41
Définition 40
Minimisation
Choix de la fonction à minimiser . 67
de l'énergie totale 149
et paramètres des potentiels 66
Limitations de l'algorithme
Conditions initiales 69
Pas du gradient 68
Pertinence de la 70
Type de fonction minimisée 67
Moment angulaire
et cranking 105
Moment d'inertie 103
cinématique 104
dynamique 105
et masse effective indépendante . 123
Relation entre $\mathfrak{J}^{(1)}$ et $\mathfrak{J}^{(2)}$ 105

– N –

Neumann (von)
règle de ..... voir Effet Landau-Zener
Niveaux individuels **71, 72**
avec 6 paramètres 72
avec 9 paramètres 91
Noyaux
super-lourds 158

– O –

Opérateur
éléments de matrice d'un **187**
dans la base B 187
dans la base T 188
de renversement du temps ..... voir Renversement du temps
de rotation 101
de simplex
Définition 181
et base T 182
Propriétés 182
Opérateur $\hat{\mathcal{O}}\sigma_\mu$
dans la base T 189
Oscillateur harmonique
base cartésienne 58
Energies propres 59

– P –

Paires
de Cooper 197
opérateur de création 197
Paramétrisation
avec masse effective indépendante 45
de la surface nucléaire 45
Paramètres des potentiels
6 paramètres 79
dépendance en isospin 81
Parité 106
Particle + Rotor **167**
Bandes $K = 1/2$ 171
Hamiltonien 167
Moments angulaires 168
Paramètres de découplage 171
Petite composante η
Equation du mouvement 39
Polynômes
d'Hermite
normalisés 59
somme de 62
de Laguerre
Orthonormalité 174
Relations de récurrence 174
Potentiel

scalaire 32
vecteur 32
Potentiel spin-orbite
en symétrie sphérique 43
forme alternative 43
Potentiels
de Coulomb
cas général 43, 80
de Woods-Saxon **45**
en fonction des champs mésoniques 30
Expression des 42
géométrie **46**
masse effective 55
potentiel central 47
spin-orbite (6 paramètres) 53
spin-orbite (9 paramètres) 52
spin-orbite (non-relativiste) 49
Paramétrisation des **45**
Paramétrisations 65
Paramètres des
6 paramètres 79
9 paramètres 91
Potentiels $\hat{S}$ et $\hat{V}$
Ordre de grandeur 40
Principe de moindre action 21
Projection
du nombre de particules 204

– Q –

Quasi-particules
BCS 201
interprétation 202

– R –

r.m.s ..... voir Rayons carrés moyens
Référentiel (tournant) 101
Région de masse $A \sim 150$ 108
régression linéaire
avec 6 paramètres 82
avec 9 paramètres 92
Rayons carrés moyens **74**
avec 6 paramètres 74
avec 9 paramètres 92
et petite composante 79
Relation canonique 135
Renversement du temps 108, **178**
et base T 183
Représentations irréductibles (et dégénérescences) 140
Rotation
collective 99
fréquence de 104
non collective 100
Rotation (opérateur de) 101

– S –

Schrödinger (equation)
et cranking 101
Signature 106
individuelle 106
totale
définition 106
et moment angulaire 107
Simplex 107
Opérateur de 181
Slater (déterminant de)
et cranking 102
Spin
dans la base T 186
Spin-orbite
et moments d'inertie 118
Structure en blocs **190**
Strutinsky (procédure de) **128**
et appariement 133
Noyaux en rotation **135**
méthode 135
routhien macroscopique 136
routhien microscopique 136
noyaux statiques 129
Surface nucléaire
Paramétrisation 45, 126
Paramètres de déformation 138
Symétrie
Parité 106
Renversement du temps 108
Signature 106
Simplex 107

– T –

Tête de bande **85**, 170

Tenseur
d'énergie-impulsion 22
des champs mésoniques 26
Théorie des champs classiques 21