

Rôle de l'isospin dans la transition de phase liquide-gaz de la matière nucléaire

C. Ducoin

► To cite this version:

C. Ducoin. Rôle de l'isospin dans la transition de phase liquide-gaz de la matière nucléaire. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université de Caen, 2006. Français. NNT: . tel-00110371

HAL Id: tel-00110371 https://theses.hal.science/tel-00110371v1

Submitted on 27 Oct 2006

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.

UNIVERSITE DE CAEN/BASSE-NORMANDIE U.F.R. SCIENCES ECOLE DOCTORALE SIMEM

THESE

présentée par

Mme Camille Ducoin

et soutenue le 3 Octobre 2006 en vue de l'obtention du

DOCTORAT de L'UNIVERSITE de CAEN **Spécialité : Constituants Elémentaires** Arrêté du 25 avril 2002

TITRE :

ROLE DE L'ISOSPIN DANS LA TRANSITION DE PHASE LIQUIDE-GAZ DE LA MATIERE NUCLEAIRE

MEMBRES du JURY :

Mr	Marcello Baldo	(Rapporteur)
Mr	Philippe Chomaz	(Directeur de thèse)
Mme	Francesca Gulminelli	(Directrice de thèse)
Mr	Van Giai Nguyen	(Rapporteur)
Mme	Constança Providência	
Mr	Bernard Tamain	

UNIVERSITE DE CAEN/BASSE-NORMANDIE U.F.R. SCIENCES ECOLE DOCTORALE SIMEM

THESE

présentée par

Mme Camille Ducoin

et soutenue le 3 Octobre 2006 en vue de l'obtention du

DOCTORAT de L'UNIVERSITE de CAEN **Spécialité : Constituants Elémentaires** Arrêté du 25 avril 2002

TITRE :

ROLE DE L'ISOSPIN DANS LA TRANSITION DE PHASE LIQUIDE-GAZ DE LA MATIERE NUCLEAIRE

MEMBRES du JURY :

Mr	Marcello Baldo	(Rapporteur)
Mr	Philippe Chomaz	(Directeur de thèse)
Mme	Francesca Gulminelli	(Directrice de thèse)
Mr	Van Giai Nguyen	(Rapporteur)
Mme	Constança Providência	
Mr	Bernard Tamain	

Remerciements

Cette thèse a pu être réalisée grâce à un financement du CEA, qui m'a été accordé dans le cadre d'un contrat de formation par la recherche. Je remercie les directions et personnels des laboratoires GANIL et LPC qui m'ont accueillie dans les meilleures conditions, et permis de mener à bien ce travail.

Une première fois merci à mes directeurs de thèse, Philippe Chomaz et Francesca Gulminelli, qui m'ont offert un sujet passionnant : toute ma gratitude leur revient pour m'avoir efficacement encadrée et patiemment soutenue.

Je remercie les membres de mon jury de thèse, à commencer par mes rapporteurs Marcello Baldo et Van Giai Nguyen, dont les commentaires m'ont été utiles pour l'amélioration du manuscrit. Merci à Constança Providência d'être venue participer à ma soutenance : à mon grand plaisir, les trois jours de sa visite ont été l'occasion d'abondantes discussions remplies de perspectives. Merci également à Bernard Tamain pour avoir accepté de porter sur cette thèse un regard d'expérimentateur.

Pendant ces trois ans, j'ai pu bénéficier au laboratoire d'une atmosphère conviviale et stimulante. J'y ai rencontré des collègues, des amis, et nombre de personnes dont l'aide m'a été d'une très grande utilité dans différents domaines tels que la bibliographie, l'informatique, l'administration, et m'ont apporté à l'occasion une bonne dose de soutien moral. Je pense entre autres à Michel, Laurent, Armelle, Sabrina, Christine et Christine... et aussi à Sophie, qui m'a été d'un grand secours dans l'organisation logistique de la soutenance.

J'ai découvert pendant ma thèse que la recherche implique beaucoup de mouvement, et j'ai particulièrement apprécié les nombreuses opportunités de rencontres et d'échanges lors de conférences. Cela m'a aussi permis de présenter mon travail dans différents contextes. Par ailleurs, j'ai eu l'occasion de séjourner à Orsay dans le cadre d'une collaboration sur la modélisation des étoiles à neutrons : je remercie le laboratoire IPNO pour son accueil. Merci à Jérôme pour m'avoir proposé de travailler avec lui, et avoir consacré de nombreuses heures à m'initier à la RPA. Cette expérience en parallèle a été très enrichissante, et n'a pas encore fini de porter ses fruits.

La période de rédaction de thèse a été d'une grande intensité. La proximité de la mer a beaucoup facilité le processus, à coups de grands bols d'air iodé... Parlant de nature, j'en profite pour remercier les quatre éléments fondamentaux sans lesquels toute survie serait impossible : l'eau, le feu, l'air, les pâtes !

Cependant la survie ne suffit pas. C'est pourquoi je dis un grand merci à tous ceux qui ont fait de ces années de thèse une aventure humaine inoubliable. Je ne pourrai nommer tous les collègues, toutes les personnalités familières dont j'ai apprécié la compagnie. Merci en particulier à ceux de mes camarades et amis qui ont eu à me supporter quotidiennement, et dont les marques de soutien répétées m'ont été indispensables ! Je pense à Paolo, Karim, Marie, Josiane, Julian, Lynda, Beyhan, Benoît, Inma, Hicham, *et al....*

Ici je souhaite dire un merci tout spécial à Philippe et Francesca, qui ont été pour moi bien plus que des encadrants. Je ne pourrai pas exprimer tout ce que je leur dois, à peine dire combien j'ai apprécié leurs qualités et leur complémentarité, tant humaines que pédagogiques. Non seulement ils m'ont beaucoup appris, avec une grande rigueur scientifique, mais je me suis senti en leur présence accueillie par une chaleur, un humour et un enthousiasme communicatifs. Travailler avec Philippe et Francesca a été un honneur, mais surtout un bonheur : que demander de plus sinon... encore ?

La recherche est une vocation qui pour se réaliser nécessite de longues années d'études. Merci à mes parents pour m'avoir toujours laissée libre de trouver ma voie, pour avoir toujours respecté mes décisions et pour m'avoir toujours infailliblement soutenue, tant moralement que matériellement, au cours de ces années. Merci à tous les membres de ma famille qui m'ont encouragée. Je finirai avec une pensée pour un petit rayon de soleil nommé Anna. Mes années de thèse ont été accompagnées par sa naissance, ses premiers mots, ses premiers pas... et maintenant son entrée à l'école : nous en avons fait du chemin en trois ans !

Merci à tous ceux qui font que la vie vaut d'être vécue, ce qui fait que l'univers vaut d'être exploré...

Table des matières

1	Intr	roduction 1
	1.1	Contexte général : transitions de phase et physique nucléaire
	1.2	Motivations : étude de la matière asymétrique
	1.3	Travail présenté
2	Phy	vsique statistique et transitions de phase 5
	2.1	Le principe de maximisation de l'entropie
		2.1.1 Théorie de l'information
		2.1.2 Maximisation de l'entropie sous contrainte
		2.1.3 Distribution de probabilités
		2.1.4 Propriétés de la fonction de partition
	2.2	La limite thermodynamique
		2.2.1 Définition
		2.2.2 Équivalence entre ensembles
		2.2.3 Description d'un système en termes de densités
		2.2.4 Coexistence de phase : la construction de Gibbs
	2.3	Ordre d'une transition de phase
		2.3.1 Singularités de la fonction de partition
		2.3.2 Ehrenfest et le premier ordre 17
		2.3.3 Transition continue
	2.4	Illustration : fluide de Van der Waals
		2.4.1 Fonctions de partition et équations d'état 18
		2.4.2 Transition de phase et transformation thermodynamique
		2.4.3 Cas d'un système à deux fluides 24
3	The	ermodynamique de la matière nucléaire 27
	3.1	Approche de champ moyen
		3.1.1 Description en particules indépendantes
		3.1.2 Interaction effective de Skyrme
	3.2	Thermodynamique en champ moyen 34
		3.2.1 Fonction de partition exacte
		3.2.2 Fonction de partition de champ moyen
	3.3	Formulation des fonctions thermodynamiques
		3.3.1 Fonctionnelle d'énergie de Skyrme
		3.3.2 Potentiels de champ moyen
		3.3.3 Fonctions thermodynamiques
4	Dia	gramme des phases liquide-gaz de la matière nucléaire 41
	4.1	Construction de Gibbs
		4.1.1 Maximisation de l'entropie contrainte
		4.1.2 Construction sur un ensemble mono-extensif
		4.1.3 Matière nucléaire « proton-canonique »

		4.1.4 Résolution numérique	47
	4.2	Caractéristiques de la coexistence de phase	52
	1.4	4.2.1 Dépendance en isospin du diagramme de phase isotherme	52
		4.2.1 Dependance en sospin du diagramme de phase isomerine	55
		4.2.2 Dépendence en température	60
	19	4.2.5 Dependence en temperature	64
	4.0	4.2.1 Leis de misseners et encourte critique	04
		4.3.1 Lois de puissance et exposants critiques	00
		4.3.2 Comportement des données numeriques	68 70
	4.4		70
		4.4.1 Singularités de la fonction de partition	70
		4.4.2 Transformation à Z/A constant	74
5	Sán	pration de phase par décomposition spinodale	70
0	5 1	Définition de la région grinodale	80
	0.1	E 1.1 Principale et cognitario	80
		5.1.1 Spinodale et coexistence	00
		5.1.2 Matrice de courbure	82
	-	5.1.3 Direction d'instabilite	83
	5.2	Spinodale de la matière nucléaire	84
		5.2.1 Matrice de courbure de l'énergie libre	84
		5.2.2 Calcul de la courbure	86
	5.3	Coexistence de phase <i>versus</i> décomposition spinodale	89
		5.3.1 Représentation de la région d'instabilité	89
		5.3.2 Direction de séparation de phase	94
		5.3.3 Fluctuations d'isospin	100
c	Tract	tabilitás de taille finie dans la matiène nucléaire	115
0	Inst	adilites de talle finie dans la matiere nucleaire	110
	0.1	Regions d'instabilité par rapport aux fluctuations de taille finie	110
		6.1.1 Courbure dans l'espace des fluctuations	110
		6.1.2 Spinodales dépendantes de k	120
		6.1.3 Définition du mode le plus instable	126
	6.2	Conséquences en physique de la multifragmentation	130
		6.2.1 Contexte expérimental : multifragmentation et isoscaling	131
		6.2.2 Distillation d'isospin et mesure de l'énergie de symétrie	132
7	Cor	ntexte astrophysique : matière nucléaire avec électrons	139
•	71	Neutralisation de la matière homogène	140
	1.1	7 1 1 Contrainte d'électroneutralité stricte	1/0
		7.1.2 Constante d'électrons	1/1
		7.1.2 Gaz parlait d'electrons	149
	79	Fluctuations de taille finie en présence d'électrons	144
	1.2	7.2.1 Addition d'un domé de liberté	144
		7.2.1 Addition d'un degré de liberte	140
		7.2.2 Perturbation des modes instables	147
	7.3	Formation de clusters dans la matière d'étoile	149
		7.3.1 Situations de séparation de phase	154
		7.3.2 Matière d'étoile à l'équilibre β	155
8	Cor	nclusions	165
0 Damas attaca			
0	Por	spectives	160
9	$\mathbf{Per}_{0,1}$	spectives	169
9	Per 9.1	spectives Étude des instabilités RPA	169 169

\mathbf{A}	Vari	iation de l'énergie libre sous l'effet d'une fluctuation de densité	173
	A.1	Découplage des vecteurs d'onde \vec{k}	173
	A.2	Calcul du terme direct de l'interaction coulombienne \hdots	174

Chapitre 1

Introduction

1.1 Contexte général : transitions de phase et physique nucléaire

La physique des transitions de phase est universellement répandue. Dès lors qu'un système est formé de plusieurs constituants en interaction, ceux-ci sont susceptibles de s'organiser selon différents états que les conditions imposées rendent plus ou moins favorables. Les transitions solide-liquide-gaz de l'eau en sont les exemples les plus familiers. Ces deux transitions de phases jouent un rôle suffisamment marquant dans la vie quotidienne pour servir de référence à notre échelle de mesure des températures : elles ne sont cependant qu'un exemple parmi beaucoup d'autres.

Selon les paramètres imposés (température, pression, potentiel chimique...), un système physique occupe différents états. Ce comportement obéit aux lois de la physique statistique, selon lesquelles le système est en équilibre si son entropie est maximale [Bal82, Sha48, Jay57a, Jay57b]. On parle de transition de phase lorsque le passage d'un état à un autre ne se fait pas en toute continuité mais implique en un certain point (ou sur un certain chemin) une singularité. C'est le cas par exemple lorsqu'il se produit une coexistence de phase (transition du premier ordre) ou encore lorsque le système passe par un point critique, caractérisé par une longueur de corrélation infinie (transition du second ordre). Les transitions de phase correspondent donc à des configurations remarquables. Elles sont définies suivant des critères mathématiques, qui portent sur les propriétés de la fonction de partition contenant la description statistique du système [Ehr59] : toute singularité du comportement physique est en effet associée à une singularité mathématique de cette fonction.

D'une façon générale, tous les fluides dont les constituants interagissent par des forces de courte portée à coeur dur présentent une transition du type liquide-gaz [Hua63]. Un exemple bien connu est celui de l'interaction de Lennard-Jones [Len31], concernant les atomes neutres et les molécules. Une telle interaction est en effet attractive à moyenne portée à cause des interactions de Van der Waals, mais fortement répulsive à courte portée : cette répulsion est due à l'extension finie des constituants, qui ne peuvent s'interpénétrer à cause du recouvrement des orbitales électroniques interdit par le principe de Pauli. Le système réalise alors un compromis entre configuration diluée et configuration compacte, adoptant la densité la plus favorable selon les lois de la physique statistique.

Les systèmes consitués de nucléons sont en principe sujets à une transition de phase de type liquide-gaz : en effet, la forme de l'interaction nucléaire rejoint qualitativement celle d'une interaction de Lennard-Jones. Par ailleurs, pour des densités ou des températures très élevées, une transition est liée déconfinement des quarks, transformant les nucléons en un plasma quarks-gluons.

D'un point de vue expérimental, les accélérateurs permettant d'étudier les collisions d'ions lourds fournissent un outil d'exploration du diagramme de phase de la matière nucléaire. Les collisions réalisées au GANIL permettent d'observer, à des énergies de quelques dizaines de MeV par nucléon, le phénomène de multifragmentation Celui-ci peut s'interpréter comme une manifestation de la transition liquide-gaz à l'échelle des noyaux [Rad02, Bor04, Riv05, Pic05, Tra05]. Cette interprétation fait l'objet d'un débat, en raison de la complexité des mécanismes mis en jeu au cours de ces réactions qui sont très rapides et fortement affectées par les effets dynamiques. De plus, traditionnellement, la notion de transition de phase s'applique à la limite thermodynamique, définie pour des systèmes dont la taille est très supérieure à la portée de l'interaction entre les constituants. Les noyaux, acteurs de ces expériences, sont quant à eux des systèmes de petite taille, et soumis à l'interaction coulombienne dont la portée est infinie. Cependant, dans le cadre de la physique statistique, le concept de transition de phase a pu être redéfini de façon à s'étendre à de tels systèmes [Cho02, GroD01, Gul03a]. La multifragmentation constitue ainsi un champ d'expérimentation pour la statistique des systèmes finis. Réciproquement, les concepts issus de cette théorie apportent un cadre pour l'interprétation des données recueillies. Ceci présente un intérêt fondamental pour la physique nucléaire, car de telles observations sont porteuses d'informations sur l'interaction forte qui gouverne les réactions.

1.2 Motivations : étude de la matière asymétrique

Dans le contexte qui vient d'être évoqué, il apparaît utile de clarifier et développer la notion de transition de phase et son application à la physique nucléaire. Le travail que nous présentons est une approche théorique des effets d'isospin intervenant dans la transition liquide-gaz de la matière nucléaire.

Il est reconnu depuis les années 1980 que la matière nuléaire symétrique (constituée d'un nombre égal de neutrons et protons) connaît une transition de phase du premier ordre, jusqu'à une température critique [Ber83, Fin82, Das05]. Nous nous intéressons ici à une matière constituée de neutrons et protons en proportion variable : on parle de matière asymétrique lorsque cette proportion est différente de 1/2. Neutrons et protons se distinguent par le nombre quantique d'isospin : à l'échelle d'un ensemble de nucléons, l'isospin donne une mesure de l'asymétrie du système, qui est souvent représentée par la fraction protonique Z/A (où Z est le nombre de protons et A le nombre de total de nucléons). Dans le cas de la matière asymétrique, il est nécessaire de considérer l'isospin comme un degré de liberté de la transition de phase : cette dimension supplémentaire rend plus complexe l'étude de la transition. Les propriétés des phases formées sont enrichies par des effets liés à l'isospin.

Les systèmes physiques étant généralement asymétriques (riches en neutrons), l'étude de ces effets est importante pour comprendre les phénomènes observés tant dans le domaine de la multifragmentation des noyaux que dans celui des étoiles compactes. Présentons ici brièvement ces deux domaines d'application de notre travail.

L'une des motivations pour l'étude de la multifragmentation des noyaux est la possibilité de mieux connaître l'équation d'état de la matière nucléaire, en recherchant sa dépendance en densité et en isospin [Bar05, Tsa01a, Ono03]. Les noyaux lourds employés actuellement ont une fraction protonique relativement proche de la valeur symétrique Z/A = 0.5. L'étude des noyaux exotiques, qui est en cours de développement, permettra une exploration plus large du domaine d'asymétrie.

Différents travaux portent sur la relation entre l'équation d'état de la matière nucléaire et les propriétés des étoiles compactes [Lat00, Bal03, Li05]. Ces astres sont des systèmes très riches en neutrons, dont la densité au centre peut atteindre plusieurs fois la densité de saturation adoptée par les noyaux ordinaires. Leurs propriétés sont donc particulièrement affectées par la dépendance en densité et isospin de l'équation d'état. La transition liquide-gaz de la matière nucléaire peut avoir d'importantes conséquences pour l'étude des étoiles à neutrons et des supernovae [Gle01, Lat00]. Cette transition affecterait la structure des étoiles à neutrons, impliquant la présence de phases « pasta » [Rav83, Wat03, Hor04a, Las87] localisées dans la partie interne de l'écorce. Elle pourrait par ailleurs entrer en jeu dans la dynamique des supernovae. Bien que les grandes étapes de l'explosion d'une supernova soient connues [Bur86, Pon99, Pra01], les modélisations actuelles échouent à reproduire ce phénomène [Bur03]. L'une des pistes explorées pour remédier à cette situation concerne la propagation des neutrinos [Arn77, Fre77, Bet79, Bur81], dont le libre parcours dans l'étoile dépend des structures rencontrées [Hor04a]. Dans ces conditions, des

fluctuations de densité liées à la transition liquide-gaz pourraient jouer un rôle déterminant dans la dynamique des supernovae [MarJ04].

1.3 Travail présenté

Le travail présenté ici porte sur la matière nucléaire infinie. Dans un premier temps, le système est étudié en l'absence d'effets coulombiens : nous nous trouvons alors dans les conditions de la limite thermodynamique. Ceci permet d'une part l'utilisation du principe d'équivalence entre ensembles, et d'autre part la détermination de l'équilibre de phase au moyen de la construction de Gibbs. Des fluctuations de densité de longueur d'onde finie sont ensuite considérées : elles introduisent dans notre étude des effets de taille finie, et permettent une prise en compte de l'interaction coulombienne. En vue d'une application à l'astrophysique, nous étudions également l'effet d'un gaz d'électrons mélangé à la matière nucléaire.

L'interaction entre nucléons est traitée dans une approche de champ moyen : l'énergie du système est alors une fonctionnelle de la densité à un corps [Vau96]. Celle-ci est obtenue à partir d'une interaction effective de type Skyrme : nous avons choisi comme paramétrisation de référence la force de Skyrme-Lyon Sly230a, qui est adaptée à l'étude de la matière asymétrique et notamment aux conditions rencontrées dans les étoiles à neutrons [Cha97, Rik03].

Cette approche nous a permis d'étudier les propriétés des phases formées selon différents scénarios.

Nous avons tout d'abord établi le diagramme d'équilibre de phase de la matière nucléaire, tenant compte du degré de liberté d'isospin. La coexistence de phase obtenue à partir des conditions d'équilibre de Gibbs fait apparaître le phénomène de distillation de l'isospin, qui est un effet connu de la transition liquide-gaz de la matière asymétrique [Mul95]. En raison de ce phénomène, une transformation isotherme de la matière asymétrique à Z/A constant présente une évolution continue des observables. Un tel comportement a souvent été interprété comme une transition du second ordre [Mul95, Das03, Qia03, Sil04, Sri02, Car98] : l'un des résultats de cette thèse consiste à démontrer que la matière asymétrique présente au contraire une transition d'ordre 1, jusqu'en des points critiques bien déterminés du diagramme de phase.

Dans le cas d'une séparation de phase hors équilibre, notre approche permet d'énoncer des prédictions sur les propriétés d'asymétrie des phases, *via* un scénario de décomposition spinodale. Il s'agit alors d'étudier la direction d'instabilité associée à un système homogène situé dans la région spinodale du plan des densités de neutrons et protons. Cette étude a été menée en supposant pour commencer une séparation en deux phases infinies, puis en considérant une décomposition en agrégats résultant de l'instabilité par rapport à des fluctuations de densité de taille finie. Les instabilités spinodales dans la matière nucléaire et les noyaux finis ont déjà été discutées dans la littérature [Bar05, Cho04, ColM94, Pei91]. Alors qu'il avait été proposé l'existence de deux types d'instabilités, mécanique et chimique [Mul95, Li97, Bar02], l'unicité de l'instabilité est aujourd'hui démontrée [MarJ03], et il est reconnu qu'elle présente un caractère essentiellement isoscalaire (c'est à dire que les deux phases formées se distinguent par leur densité totale plus que par leur composition). Notre étude, qui est en accord avec ce résultat, apporte un éclairage supplémentaire en mettant en relation l'étude des instabilités avec celle du diagramme de phase.

L'instabilité de la matière d'étoile constituée de neutrons, protons et électrons a fait l'objet de plusieurs études [Bay71b, Bon82, Lat85, Bet88, Pet95a, Pro06]. Parmi les travaux les plus récents, les références [Dou00b, Dou00a] emploient, comme c'est le cas pour notre étude, des interactions de Skyrme-Lyon. L'un des apports de notre travail est une analyse détaillée de la région d'instabilité de la matière d'étoile par rapport à la formation d'agrégats, mise en relation directe avec le cas de la matière nucléaire ordinaire. Une telle comparaison est importante dans la perpective d'un rapprochement entre la physique des collisions d'ions lourds et l'astrophysique des objets denses.

Le présent document s'organise de la façon suivante.

Deux chapîtres introductifs seront consacrés aux notions sur lesquelles se base notre étude. Les principes de la physique statistique seront d'abord exposés (chapître 2) : nous verrons comment la maximisation de l'entropie permet de définir une fonction de partition dont les propriétés déterminent la présence d'une transition de phase, ainsi que son ordre. Une illustration en sera donnée par l'exemple d'un fluide de Van der Waals. Nous entrerons ensuite dans le contexte de la physique nucléaire en présentant la méthode de champ moyen et son application à une force effective de Skyrme (chapître 3) : les équations thermodynamiques de la matière nucléaire pourront alors être établies. Suite à ces deux chapitres introductifs, nous exposerons les résultats obtenus au cours de cette thèse. Tout d'abord, nous présenterons le diagramme d'équilibre de phase (chapître 4). Dans le chapître 5, nous comparerons la distillation d'isospin obtenue à l'équilibre avec le cas d'une séparation de phase hors équilibre, selon le scénario de décomposition spinodale. Les instabilités dues aux fluctuations de longueur d'onde finie seront introduites dans le chapître 6. Finalement, le chapître 7 sera consacré à l'étude de la transition liquide-gaz dans la matière d'étoile, pour laquelle un gaz d'électrons doit être pris en compte. Les différents résultats obtenus seront résumés en conclusion, puis nous évoquerons en perspective un travail actuellement en cours de développement, dont le but est d'étudier les effets de la dynamique sur la région d'instabilité.

Chapitre 2

Physique statistique et transitions de phase

Dans ce chapître sont exposés les concepts de physique statistique permettant de formaliser l'étude des transitions de phase. Les différentes notions abordées seront illustrées dans le cas bien connu du fluide de Van der Waals. Elles établissent le cadre dans lequel sera étudiée la transition liquide-gaz de la matière nucléaire, qui fait l'objet de cette thèse.

Nous introduisons tout d'abord la notion d'entropie, reliée à la théorie de l'information. L'équilibre statistique d'un système correspond à la maximisation de l'entropie de Shannon, compte tenu des contraintes qui lui sont imposées. Ceci conduit à définir une fonction de partition, dépendante de l'ensemble statistique dans lequel se situe l'étude. A la limite thermodynamique cependant, les différents ensembles sont équivalents et les différentes fonctions de partition associées se déduisent l'une de l'autre par des transformées de Legendre approchées.

L'état d'un système donné est décrit par un ensemble de variables thermodynamiques, extensives (observables) et intensives (paramètres contrôlant la valeur moyenne des observables). Les propriétés de la fonction de partition sont en relation avec les variables thermodynamiques : les équations d'état sont l'expression de telles relations. L'étude de la fonction de partition permet d'établir l'existence d'une transition de phase, tout en déterminant son ordre. Dans le cas d'une transition du premier ordre, qui a pour origine une anomalie de courbure de l'entropie, l'équilibre statistique fait intervenir une coexistence de phase déterminée par construction de Gibbs.

2.1 Le principe de maximisation de l'entropie

L'équilibre statistique d'un système est défini par la maximisation de l'entropie, compte tenu des contraintes imposées aux système. Il s'agit d'un principe de base de la physique statistique, qui trouve sa source dans la théorie de l'information.

2.1.1 Théorie de l'information

Un système macroscopique contient un nombre très élevé de degrés de liberté. La description de l'état microscopique d'un tel système comporte la connaissance des états individuels de ses constituants, ce qui représente une quantité d'information immense. Dans la pratique, une telle connaissance du système n'est pas accessible : de plus, les propriétés qu'il est pertinent de connaître pour un système macroscopique s'expriment par des variables globales faisant abstraction du détail des états de ses constituants. Considérons le plus simple des systèmes macroscopiques, un gaz formé de N particules ponctuelles. Au niveau microscopique, il serait décrit classiquement par l'ensemble des positions $\vec{r_i}$ et des impulsions $\vec{p_i}$ de ses particules, soit 6N informations. L'étude de ses propriétés macroscopiques, en revanche, est seulement basée sur une équation d'état mettant en relation trois variables thermodynamiques : pression, volume et température.

C'est ainsi que la notion d'information manquante intervient dans l'étude des systèmes macroscopiques, qui se fait dans le cadre de la physique statistique. Les variables globales caractérisant un système découlent de ses propriétés microscopiques. L'équation d'état résulte d'une telle relation : elle suppose donc un certain traitement des degrés de liberté microscopiques, bien que ceux-ci ne soient pas explicités. Ils sont en fait considérés en tant qu'information manquante. Une telle notion peut en effet être associée à une quantité dénombrable : c'est ce qu'établit la théorie de l'information, où cette quantité est représentée par l'entropie de Shannon [Sha48]. Celle-ci est équivalente à l'entropie statistique présentée comme une mesure du désordre dans un système physique [Jay57a, Jay57b, Bal82].

Voyons maintenant comment des propriétés intuitivement attribuées à l'information permettent suivant la démarche de Shannon d'exprimer cette notion sous forme d'une fonction quantifiable. Considérons pour cela un ensemble de Ω événements possibles, notés $i = (1, ..., \Omega)$. A chacun de ces événements est attribuée la probabilité p_i . L'entropie $S(p_1, ..., p_{\Omega})$ est une mesure de l'information manquante, d'après la connaissance probabiliste des réalisations possibles. Cette fonction vérifie les conditions suivantes :

- Elle est nulle si un seul événement est possible, soit S(1, 0, ..., 0) = 0.
- Pour Ω événements possibles, elle est maximale s'ils sont équiprobables $(p_i = 1/\Omega \forall i)$.
- Pour Ω événements à probabilité non nulle, elle augmente avec $\Omega.$
- Elle n'est pas affectée par l'introduction d'un événement impossible : $S(p_1, ..., p_{\Omega}) = S(0, p_1, ..., p_{\Omega})$.
- Elle est invariante par permutation de l'ordre des événements pris en compte : $S(p_1, p_2, ...) = S(p_2, p_1, ...) = ...$
- Elle est additive, c'est à dire que si l'on sépare les événement possibles en deux groupes a et b, elle vérifie :

$$S(p_1^a, ..., p_{N_a}^a, p_1^b, ..., p_{N_b}^b) = S(p_a, p_b) + p_a S(\frac{p_1^a}{p_a} ... \frac{p_{N_a}^a}{p_a}) + p_b S(\frac{p_1^b}{p_b} ... \frac{p_{N_b}^b}{p_b})$$

$$avec \ p_{a,b} = N_{a,b} / (N_a + N_b)$$
(2.1)

Remarquons que si l'on considère n groupes de m événements équiprobables, la propriété d'additivité s'écrit

$$S_{mn} = S_m + S_n \tag{2.2}$$

où S_{Ω} désigne l'entropie associée à N événements équiprobables, soit $S(1/\Omega, ..., 1/\Omega)$. L'on voit alors que cette condition est vérifiée en posant $S_{\Omega} = k \ln \Omega$. Pour le cas général, on montre que les conditions listées ci-dessus définissent à une constante près la fonction d'entropie, qui s'exprime comme :

$$S = -k \sum_{i=1}^{M} p_i \ln p_i \tag{2.3}$$

Situons maintenant le concept d'entropie dans le cadre de la physique statistique. Chaque événement *i* correspond alors à un micro-état $|\Psi_i\rangle$ du système étudié, auquel est associé la probabilité p_i . La matrice densité de ce système s'écrit :

$$\hat{D} = \sum_{i} |\Psi_i > p_i < \Psi_i| \tag{2.4}$$

L'entropie prend alors la forme :

$$S = -kTr(\hat{D}\ln\hat{D}) \tag{2.5}$$

Dans cette expression, k est la constante de Boltzmann, qui sera par la suite posée égale à 1.

2.1.2 Maximisation de l'entropie sous contrainte

Le postulat de la physique statistique énonce que l'état d'un système est décrit par une matrice densité telle que l'entropie est maximale, compte tenu des contraintes imposées. Toute autre expression de la probabilité des différents états introduit un biais dans la description du système. Réduire l'entropie (information manquante) revient en effet à ajouter de l'information : ainsi, lorsque toutes les données connues sont prises en compte, une réduction supplémentaire de l'entropie constitue une fausse information.

Un système est connu par un certains nombre d'observables A_k , auxquelles sont associées les opérateurs \hat{A}_k . Deux types de contraintes peuvent s'appliquer à ce système :

- une loi de conservation sur une observable \hat{A}_{k1} impose la valeur A_{k1} pour chaque micro-état;
- la connaissance de la valeur moyenne $\langle \hat{A}_{k2} \rangle$ d'une autre observable définit une contrainte agissant sur le macro-état, c'est à dire sur la matrice densité \hat{D} du système. Cette matrice, qui décrit le système en termes des probabilités associées aux différents micro-états, doit vérifier la relation :

$$\langle A_{k2} \rangle = Tr(A_{k2}D) \tag{2.6}$$

Considérons un nombre donné d'observables A_k connues en valeur moyenne. La matrice D doit vérifier les différentes contraintes $\langle \hat{A}_k \rangle$, auxquelles vient s'ajouter la contrainte de normalisation $Tr\hat{D} = 1$ à laquelle nous donnerons l'indice k = 0. Parmi l'ensemble des matrices répondant à ces conditions, celle qui donne l'entropie la plus grande est la seule permettant une description non-biaisée du système. La détermination de la matrice \hat{D} selon ces critères est ce que l'on appelle la maximisation de l'entropie sous contrainte.

La maximisation sous contrainte s'obtient par la méthode des multiplicateurs de Lagrange, dont nous rappelons ici le principe dans le cadre qui nous intéresse. Chaque contrainte k définit un chemin dans l'espace des éléments de matrice D_{ij} , tel que :

$$f_{k\geq 1}(\{D_{ij}\}) = Tr(\hat{A}_k\hat{D}) - \langle \hat{A}_k \rangle = 0$$

$$f_0(\{D_{ij}\}) = Tr(\hat{D}) - 1 = 0$$

$$(2.7)$$

Considérons alors la transformation

$$S(\{D_{ij}\}) \to \sigma(\{D_{ij}\}) = S(\{D_{ij}\}) - \sum_{k} \lambda_k f_k(\{D_{ij}\})$$
(2.8)

où λ_k est le paramètre de Lagrange associé à la contrainte k. Pour le sous-espace vérifiant les différentes contraintes, S est inchangée par cette transformation. En revanche, les pentes $\partial S/\partial D_{ij}$ se trouvent modifiées de telle sorte que, pour un certain jeu de paramètres $\{\lambda_k\}$, le maximum de S sur le sous-espace adéquat correspond au maximum de σ sur l'ensemble de l'espace $\{D_{ij}\}$. Ce point de maximum correspondant à la matrice \hat{D} recherchée. En pratique, la relation entre les observables $\langle \hat{A}_k \rangle$ et leurs paramètres associés λ_k est établie en suivant la démarche inverse. On commence par fixer un jeu de paramètres : le maximum de σ correspondant désigne une matrice \hat{D} dont on déduit les valeurs moyennes $\langle \hat{A}_k \rangle$.

Le maximum de σ est tel que $\delta \sigma = 0$ pour toute variation $\delta D = \{\delta D_{ij}\}$:

$$\begin{aligned}
-\delta\sigma &= 0\\ &= -\delta S + \sum_k \delta f_k \\ &= \delta[Tr(\hat{D}\ln\hat{D})] + \lambda_0 \delta[Tr(\hat{D})] + \sum_{k\geq 1} \lambda_k \delta[Tr(\hat{D}\hat{A}_k)] \\ &= Tr[\delta\hat{D}(\ln\hat{D} + 1 + \lambda_0 + \sum_{k\geq 1} \lambda_k \hat{A}_k)]
\end{aligned}$$
(2.9)

Dans la suite, la somme sur k supposera toujours $k \ge 1$. La relation (2.9) devant être vérifiée pour toute variation $\delta \hat{D}$, il en résulte :

$$\hat{D} = \frac{1}{Z} e^{-\sum_{k} \lambda_k \hat{A}_k} \tag{2.10}$$

où $Z = e^{1+\lambda_0}$ assure la normalisation de \hat{D} . Il s'agit de la fonction de partition du système, qui dépend des paramètres $\lambda_{k\geq 1}$. Elle est reliée à l'entropie $S = -\hat{D} \ln \hat{D}$ par la transformée de Legendre exacte :

$$S(\{<\hat{A}_k>\}) = \ln Z(\{<\lambda_k>\}) + \sum_k \lambda_k < \hat{A}_k >$$
(2.11)

2.1.3 Distribution de probabilités

La matrice densité \hat{D} définit la distribution de probabilité des observables connues par leur valeur moyenne $\langle \hat{A}_k \rangle$.

Supposons que ces différentes observables puissent être mesurées simultanément, c'est à dire que les opérateurs \hat{A}_k soient diagonalisables sur la même base d'états propres $|\Psi_i\rangle$. La probabilité p_i associée à cet état est donnée selon la relation (2.10) par :

$$p_{i} = \frac{1}{Z(\{<\lambda_{k}>\})} e^{-\sum_{k} \lambda_{k}(A_{k})_{i}}$$
(2.12)

où $(A_k)_i$ est la valeur propre de l'observable \hat{A}_k dans l'état propre $|\Psi_i\rangle$.

Notons $W(\{A_k\})$ le nombre de micro-états tels que l'ensemble des valeurs propres $\{(A_k)_i\}$ corresponde à un ensemble de valeurs $\{A_k\}$ donné. La probabilité associée à l'observation de $\{A_k\}$ est alors :

$$P(\{A_k\}) = \frac{1}{Z(\{<\lambda_k>\})} W(\{A_k\}) e^{-\sum_k \lambda_k A_k}$$
(2.13)

Considérons l'ensemble dans le quel tous les différents micro-états sont équiprobables : nous le nommerons, par extension, ensemble micro canonique. L'entropie micro canonique S_{μ} est alors donnée par :

$$S_{\mu}(\{A_k\}) = \ln W(\{A_k\}) \tag{2.14}$$

et l'on peut réécrire la distribution de probabilité (2.13) comme :

$$P(\{A_k\}) = \frac{1}{Z(\{<\lambda_k>\})} e^{S_{\mu}(\{A_k\}) - \sum_k \lambda_k A_k}$$
(2.15)

Pour un ensembles de paramètres λ_k fixé, cette fonction présente des extrema aux points $\{A_k\}$ pour lesquels sont vérifées les relations :

$$\frac{\partial S_{\mu}}{\partial A_{k}} = \lambda_{k} \tag{2.16}$$

Dans le cas ordinaire, l'entropie possède une courbure concave sur l'ensemble de l'espace $\{A_k\}$: cet ensemble de conditions est alors vérifié en un seul point, correspondant au maximum de la distribution de probabilité. Pour certains systèmes physiques cependant, l'entropie présente une anomalie de courbure (intrusion convexe [GroD97, GroD01]). La distribution présente alors une bimodalité, qui est associée à une coexistence de phase. La figure 2.1 donne à une dimension une illustration qualitative de ces deux cas.

Remarquons que pour un grand système, une distribution de probabilité ordinaire (uni-modale) peut être approximée par un pic gaussien (devenant une fonction δ de Dirac à la limite thermodynamique). Dans ce cas, la valeur moyenne de la distribution s'identifie avec la valeur la plus probable. Un développement limité autour de cette valeur montre alors que la largeur de la distribution, représentant la fluctuation des observables, correspond à la courbure de l'entropie. Nous reviendrons sur ce point au cours de notre étude (voir chapître 5).

2.1.4 Propriétés de la fonction de partition

La fonction de partition est déterminée par la relation (2.10) de telle sorte que TrD = 1. On a donc :

$$Z(\{\lambda_k\}) = Tr\left(e^{-\sum_k \lambda_k \hat{A}_k}\right)$$
(2.17)

Chaque valeur moyenne $\langle \hat{A}_k \rangle$ est donnée par la dérivée première de ln Z par rapport à λ_k . Ces relations sont autant d'équations d'état faisant le lien entre chaque observable $\langle \hat{A}_k \rangle$ et son paramètre intensif associé λ_k :

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda_k} = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \lambda_k} = -Tr(\hat{D}\hat{A}_k) = -\langle \hat{A}_k \rangle$$
(2.18)



FIG. 2.1 – Illustration de la distribution de probabilité de l'observable A, gouvernée par le paramètre intensif associé λ . En haut : entropie microcanonique. En bas : distribution de probabilité correspondante pour une valeur de λ fixée. La colonne de gauche représente le cas ordinaire, pour lequel l'entropie est concave. La colonne de droite présente le cas d'une distribution bimodale, liée à une anomalie de courbure de l'entropie.

Les dérivées secondes sont quant à elles reliées aux fluctuations des observables autour de leurs valeurs moyennes.

$$\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \lambda_k^2} = -\frac{\partial}{\partial \lambda_k} \left[\frac{1}{Z} Tr\left(\hat{A}_k e^{-\sum_l \lambda_l \hat{A}_l}\right) \right]$$

$$= \frac{1}{Z} Tr\left(\hat{A}_k^2 e^{-\sum_l \lambda_l \hat{A}_l}\right) - \frac{1}{Z^2} \left[Tr\left(\hat{A}_k e^{-\sum_l \lambda_l \hat{A}_l}\right) \right]^2$$

$$= \langle \hat{A}_k^2 \rangle - \langle \hat{A}_k \rangle^2 = \sigma_k^2$$
(2.19)

où est σ_k la variance de la distribution de probabilité $P(A_k)$, représentant la fluctuation de la valeur A_k présentée par chaque micro-état autour de la valeur moyenne $\langle \hat{A}_k \rangle$.

2.2 La limite thermodynamique

Le formalisme défini jusqu'à présent vaut pour tout système physique, quels que soient sa taille et le type d'interactions mises en jeu. Il permet de généraliser les concepts de la thermodynamique à l'étude des petits systèmes, ou des systèmes présentant des forces à longue portée telles que l'interaction coulombienne. C'est ainsi que le concept de transition de phase peut s'appliquer au cas des noyaux, en se basant sur les propriétés de la distribution de probabilité des observables [GroD01, Cho02, Gul03a].

L'étude effectuée au cours de cette thèse se situe cependant dans le cadre de la limite thermodynamique. En effet, nous nous intéressons ici à la matière nucléaire, qui est un milieu infini pour lequel l'interaction coulombienne n'est pas prise en compte. Nous verrons dans le chapître 6 comment des effets coulombiens et de taille fini peuvent être introduits dans ce contexte, afin de proposer une approche de la formation de clusters de nucléons.

2.2.1 Définition

Un système donné présente une limite thermodynamique si toutes ses observables A_k sont telles que $\lim_{(N\to\infty,V\to\infty)} A_k/V = constante$ (par exemple, $\rho = N/V = constante$).

Il existe un théorème, le théorème de Van Hove, assurant que cette condition est vérifiée pour un système mettant en jeu des forces de portée finie [Hua63, Cho02]. Dans ce cas en effet, un système de taille infinie peut être décrit comme la somme de sous-parties équivalentes juxtaposées, car il est possible de négliger la contribution des interfaces. On aboutit finalement à la conclusion que, dans la limite $V \to \infty$, la fonction de partition par unité de volume $\ln Z/V$ est une constante. Il en est donc de même pour les observables associées, $a_k = A_k/V = \partial_{\lambda_k} \ln Z/V$. Le système peut ainsi être décrit par unité de volume, ce qui définit l'existence de la limite thermodynamique.

2.2.2 Équivalence entre ensembles

Un système est décrit par un ensemble d'observables : le type de contrainte imposé à chacune définit l'ensemble statistique dans lequel on se situe. Comme nous l'avons déjà évoqué, chaque observable peut correspondre à une valeur fixée A_k , ou fluctuer autour d'une valeur moyenne $\langle \hat{A}_k \rangle$ gouvernée par le paramètre intensif λ_k . Prenons l'exemple de l'énergie E : les ensembles correspondant à chacune de ces descriptions sont l'ensemble microcanonique (pour lequel E est fixée) et l'ensemble canonique (pour lequel E fluctue autour d'une valeur moyenne déterminée). Dans ce dernier cas, en notant \hat{H} l'opérateur hamiltonien, l'énergie moyenne $\langle \hat{H} \rangle$ est contrôlée par le paramètre $\beta = 1/T$, où T est la température : autrement dit, le système est plongé dans un bain thermique avec lequel il échange de l'énergie.

Ce sont donc les fluctuations des observables qui font la distinction entre les différents ensembles statistiques : or, celles-ci disparaissent à la limite thermodynamique. Ceci résulte du théorème central limite, qui s'applique à la statistique du système dans la mesure où celui-ci obéit au théorème de Van Hove.

Suppression des fluctuations

Considérons un système de volume V_0 , pour lequel on réalise plusieurs mesure de l'observable A_0 . En appelant Ω le nombre de mesures réalisées, le théorème central limite énonce que la distribution des valeurs de A_0 obtenues prend une forme gaussienne dont la largeur est inversement proportionnelle à $\sqrt{\Omega}$. En posant σ_0 la largeur de la distribution de probabilité associée à chaque mesure, on a pour Ω réalisations :

$$P_{\Omega}(A_0) \propto e^{-\frac{(\bar{A}_0 - A_0)^2}{2\sigma_0^2/\Omega}}$$
(2.20)

Supposons maintenant un système de grand volume V divisé en Ω sous-parties ayant chacune le volume $V_0 = V/\Omega$. En conséquence du théorème de Van Hove, une mesure portant sur ce système équivaut à Ω mesures portant sur l'une des sous-parties. Pour une description par unité de volume, on a $V_0 = 1$, soit $\Omega = V$ et $A_0 = A/V = a$. La distribution de l'observable densité a est alors :

$$P(a) \propto e^{-\frac{(\bar{a}-a)^2}{2\sigma_0^2/V}},$$
 (2.21)

ce qui correspond dans la limite $V \to \infty$ à une fluctuation nulle (pic de Dirac) [Gul04].

Approximation de point selle

La suppression des fluctuations d'observables à la limite thermodynamique assure l'équivalence des différents ensembles statistiques. Elle permet de relier les fonctions de partitions associées à chacun de ces ensembles par des transformées de Legendre. Ce sont des relations obtenues dans l'approximation de point selle [Hua63, Gul04].

Considérons un système décrit par n valeurs d'observables A_k . Nous voulons comparer les fonctions de partition Z_{can} et Z_{gc} , correspondant respectivement à des ensembles statistiques que nous nommons par extension « canonique » et « grand-canonique » :

- Dans l'ensemble « grand-canonique » (gc), les n variables A_k sont libres de fluctuer autour de leur valeur moyenne $\langle \hat{A}_k \rangle$ (avec k = 1, ..., n).
- Dans l'ensemble « canonique » (can), la variable A_1 est contrôlée. Il reste n 1 variables libres de fluctuer.

Supposons que les observables considérées soient simultanément diagonalisables. La fonction de partition du système dans l'ensemble (gc) s'écrit alors :

$$\ln Z_{gc}(\lambda_1, ..., \lambda_n) = \sum_{i} e^{-\sum_{k=1}^n \lambda_k A_k^{(i)}}$$
(2.22)

où la somme porte sur les micro-états *i*. Posons une certaine combinaison *c* d'observables $(A_1^{(c)}, ..., A_n^{(c)})$. Le nombre de micro-états vérifiant cette combinaison est noté $W(A_1^{(c)}, ..., A_n^{(c)})$. La fonction de partition (gc) peut alors se réécrire :

$$Z_{gc}(\lambda_1, ..., \lambda_n) = \sum_{c} W(A_1^{(c)}, ..., A_n^{(c)}) e^{-\sum_{k=1}^n \lambda_k A_k^{(c)}}$$
(2.23)

Lorsque l'on se place dans l'ensemble (can), l'observable A_1 est fixée. En notant c' la combinaison d'observables $(A_2^{(c')}, ..., A_n^{(c')})$, la fonction de partition s'exprime par :

$$Z_{can}(A_1, \lambda_2, ..., \lambda_n) = \sum_{c'} W(A_1, A_2^{(c')}, ..., A_n^{(c')}) e^{-\sum_{k=2}^n \lambda_k A_k^{(c')}}$$
(2.24)

Les fonctions de partition des ensembles (gc) et (can) vérifient alors la relation :

$$Z_{gc}(\lambda_{1},...,\lambda_{n}) = \sum_{c',j} W(A_{1}^{(j)}, A_{2}^{(c')}, ..., A_{n}^{(c')}) e^{-\sum_{k=2}^{n} \lambda_{k} A_{k}^{(c')}} e^{-\lambda_{1} A_{1}^{(j)}}$$

$$= \sum_{j} e^{-\lambda_{1} A_{1}^{(j)}} Z_{can}(A_{1}^{(j)}, \lambda_{2}, ..., \lambda_{n})$$

$$= \sum_{j} e^{\ln Z_{can}(A_{1}^{(j)}, \lambda_{2}, ..., \lambda_{n}) - \lambda_{1} A_{1}^{(j)}}$$
(2.25)

Chacun des termes de la somme sur j est proportionnel à la probabilité associée à l'observable $A_1^{(j)}$ dans l'ensemble (gc), étant donnés les paramètres $(\lambda_1, ..., \lambda_n)$. La fonction apparaissant dans l'exponentielle est proportionnelle à la taille du système. Par conséquent, à la limite thermodynamique, seul le terme pour lequel cette fonction est maximale contribue de façon significative à la somme sur j. Considérons en effet une expression de la forme F(x) = exp[Vf(x)]. Si f est maximale en x_0 , on a pour $V \to \infty$:

$$\frac{F(x)}{F(x_0)} = e^{-V[f(x_0) - f(x)]} \to 0 \quad \forall x \neq x_0$$
(2.26)

Nous pouvons donc exprimer Z_{gc} au moyen d'une approximation de point selle. Les fonctions de partition (gc) et (can) sont alors reliées par la transformée de Legendre approchée :

$$\ln Z_{gc}(\lambda_1, ..., \lambda_n) \simeq \ln Z_{can}(A_1^0, \lambda_2, ..., \lambda_n) - \lambda_1 A_1^0$$
(2.27)

où A_1^0 est la valeur de A_1 correspondant au maximum de la fonction sommée, déterminée par :

$$\left(\frac{\partial \ln Z_{can}}{\partial A_1}\right)_{A_1^0} = \lambda_1 \tag{2.28}$$

En appliquant l'approximation de point selle à l'expression de la valeur moyenne $\langle \hat{A}_1 \rangle = \partial_{\lambda_1} \ln Z_{gc}$, on trouve que A_1^0 correspond à la valeur approchée de $\langle \hat{A}_1 \rangle$. Le passage d'un ensemble à l'autre est donc assuré par la relation :

$$\ln Z_{gc}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \simeq \ln Z_{can}(A_1 = \langle \hat{A}_1 \rangle, \lambda_2, \dots, \lambda_n) - \lambda_1 \langle \hat{A}_1 \rangle$$
(2.29)

Les entropies correspondant aux ensembles (gc) et (can) sont quant à elles reliées à chacune des fonctions de partition par les transformées de Legendre exactes :

$$S_{gc} = \ln Z_{gc} + \sum_{k=1}^{n} \lambda_k < \hat{A}_k >$$

$$S_{can} = \ln Z_{can} + \sum_{k=2}^{n} \lambda_k < \hat{A}_k >$$
(2.30)

Il résulte de l'équation (2.29) que ces différentes entropies convergent à la limite thermodynamique vers une unique valeur :

$$S_{gc}(\langle \hat{A}_1 \rangle, ..., \langle \hat{A}_n \rangle) \simeq S_{can}(A_1 = \langle \hat{A}_1 \rangle, \langle \hat{A}_2 \rangle, ..., \langle \hat{A}_n \rangle)$$
(2.31)

2.2.3 Description d'un système en termes de densités

Dans le cas général, on compte parmi les observables caractérisant un système le nombre de particules N et le volume V. A la limite thermodynamique cependant, ces observables prennent des valeurs infinies : le système doit être décrit par unité de taille, ce qui fait intervenir des densités d'observables (telles que la densité de particules $\rho = N/V$).

Suppression d'une observable de taille

Lorsqu'un système est étudié par unité de volume, ou par unité de particule, l'observable correspondante (V ou N) est supprimée de la description. Son paramètre de Lagrange est quant à lui relié à la fonction de partition par unité de taille. Considérons par exemple l'ensemble grandcanonique à volume fixé, dont la fonction de partition sera notée Z_V . Dans une description par unité de volume, Z_V est reliée à la pression par la relation bien connue

$$\frac{P}{T} = \frac{\ln \mathcal{Z}_V}{V} \tag{2.32}$$

où P/T est le paramètre de Lagrange associé au volume. Pour cette raison, dans la littérature, le nom d' « équation d'état » est donné à la relation P(V,T) [Diu89].

Nous allons maintenant présenter une formulation générale de la relation (2.32): que l'on décrive un système par unité de volume ou de particule, le paramètre de Lagrange associé à l'observable supprimée (V ou N) s'exprime comme la fonction de partition d'un système de densité fluctuante.

Considérons d'abord un ensemble avec N et V fixés, et n autres contraintes $\langle \hat{A}_k \rangle$ (par exemple, dans le cas de l'ensemble canonique habituel on impose la valeur moyenne de l'énergie $\langle \hat{H} \rangle$). La fonction de partition correspondante s'exprime par unité de taille. Suite à la mise en facteur de V ou N, il reste une fonction de la densité $\rho = N/V$:

$$\ln Z(\{\lambda_k\}, N, V) = V \ln z(\{\lambda_k\}, \rho) = N \ln z(\{\lambda_k\}, \rho) / \rho$$
(2.33)

Passons maintenant dans un ensemble pour lequel le système est de taille fluctuante. Trois situations sont alors envisageables :

- V est fixé, N fluctue autour d'une moyenne $\langle \hat{N} \rangle$ contrôlée par λ_N .
- N est fixé, V fluctue autour d'une moyenne $\langle \hat{V} \rangle$ contrôlée par λ_V .

– N et V fluctuent.

Les fonctions de partition correspondant à chacun de ces ensembles sont notées respectivement :

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{V}(\{\lambda_{k}\},\lambda_{N},V) \\
\mathcal{Z}_{N}(\{\lambda_{k}\},N,\lambda_{V}) \\
\mathcal{Z}(\{\lambda_{k}\},\lambda_{N},\lambda_{V})
\end{aligned}$$
(2.34)

Elles sont reliées entre elles et à la fonction de partition (2.33) correspondant à une taille fixée par les transformées de Legendre approchées :

$$\ln \mathcal{Z}(\{\lambda_k\}, \lambda_N, \lambda_V) \simeq \ln \mathcal{Z}_V(\{\lambda_k\}, \lambda_N, V) - \lambda_V < V >$$
(2.35)

$$\ln \mathcal{Z}(\{\lambda_k\}, \lambda_N, \lambda_V) \simeq \ln \mathcal{Z}_N(\{\lambda_k\}, N, \lambda_V) - \lambda_N < \hat{N} >$$
(2.36)

$$\ln \mathcal{Z}(\{\lambda_k\}, \lambda_N, \lambda_V) \simeq \ln Z(\{\lambda_k\}, N, V) - \lambda_N < \hat{N} > -\lambda_V < \hat{V} >$$
(2.37)

Les paramètres de Lagrange λ_V et λ_N correspondent respectivement à la pression P et au potentiel chimique μ , via le paramètre de température $\beta = 1/T$:

$$\lambda_V = \beta P \quad ; \quad \lambda_N = -\beta \mu \tag{2.38}$$

Les conditions de point selle sous-jacentes dans les relations (2.35) et (2.36) impliquent

$$\lambda_V = \left(\frac{\partial \ln \mathcal{Z}_V}{\partial V}\right)_{V=\langle\hat{V}\rangle} = \frac{\ln \mathcal{Z}_V}{V} \quad soit \quad P = \frac{\ln \mathcal{Z}_V}{\beta V}$$
$$\lambda_N = \left(\frac{\partial \ln \mathcal{Z}_N}{\partial N}\right)_{N=\langle\hat{N}\rangle} = \frac{\ln \mathcal{Z}_N}{N} \quad soit \quad \mu = -\frac{\ln \mathcal{Z}_N}{\beta N}$$
(2.39)

où l'on a utilisé le fait qu'à la limite thermodynamique, $\ln Z_V \propto V$ et $\ln Z_N \propto N$. Étant donnée l'équivalence des deux descriptions (volume ou nombre de particules fixé) à la limite thermodynamique, les paramètres λ_V et λ_N ne sont pas indépendants. La relation qui existe entre eux s'obtient à partir de l'équation (2.37), dont les conditions de point selle impliquent :

$$\lambda_{V} = \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{V=\langle\hat{V}\rangle} = \ln z - \rho \frac{\partial \ln z}{\partial \rho} \\ \lambda_{N} = \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial N}\right)_{N=\langle\hat{N}\rangle} = \frac{\partial \ln z}{\partial \rho} \end{cases} P = \rho \mu + \frac{\ln z}{\beta}$$
(2.40)

Observables densités

A la limite thermodynamique, les différentes observables sont rapportées au volume ou au nombre de particules. Nous notons a_k les observables-densités telles que :

$$A_k = Va_k = Na_k/\rho \tag{2.41}$$

Bien que les observables-densités soient indépendantes de la taille du système, nous continuerons par la suite à les qualifier de « variables extensives », par opposition aux variables intensives qui sont leurs paramètres de Lagrange associés. Il suffit en effet de définir la taille du système pour retrouver le jeu d'observables $\{A_k\} = \{Va_k\}$, qui sont extensives dans le sens original du terme : à savoir que pour une réunion de deux systèmes (1) et (2) on a les observables $\{A_k = A_k^{(1)} + A_k^{(2)}\}$. Les paramètres intensifs sont quant à eux indépendants de la notion de taille. On a ainsi :

$$\partial_{\lambda_k} ln Z = -\langle \hat{A}_k \rangle \quad ; \quad \partial_{\lambda_k} ln Z / V = \langle \hat{A}_k \rangle / V = \langle \hat{a}_k \rangle$$
(2.42)

Par ailleurs, ces paramètres correspondent de la même façon aux pentes de l'entropie $S(\{A_k\})$ ou de son expression par unité de volume $s(\{a_k\})$:

$$\lambda_k = \frac{\partial S(\{A_k\})}{\partial A_k} = \frac{\partial Vs(\{a_k\})}{\partial a_k} \frac{da_k}{dA_k} = \frac{\partial s(\{a_k\})}{\partial a_k}$$
(2.43)

Les propriétés que nous venons d'énoncer pour un système décrit en termes de densités vont maintenant être appliquées à la détermination d'une coexistence de phase.

2.2.4 Coexistence de phase : la construction de Gibbs

Les résultats de la physique statistique se déduisent du principe fondamental de maximisation de l'entropie, exposé dans la section précédente. Nous allons voir que ce principe permet de déterminer si un système homogène est instable, et comment dans ce cas il se sépare en deux phases pour atteindre son équilibre statistique. Cela fait intervenir une construction géométrique dite de Gibbs, qui est la généralisation de la construction de Maxwell pour un nombre arbitraire d'observables à prendre en compte. Cette généralisation nous sera nécessaire pour l'étude de la matière nucléaire, composée de deux fluides (neutrons et protons).

La construction de Gibbs intervient si l'entropie d'un système homogène, représentée dans l'espace des observables, présente une anomalie de courbure. La courbure de l'entropie est qualifiée d'anormale lorsqu'elle est positive : en effet, la concavité est une des propriétés attendues de l'entropie d'équilibre à la limite thermodynamique. Considérons l'entropie par unité de volume s = S/V en fonction des observables densités $\{a_k\} = \{A_k/V\}$, telle que $S(\{A_k\}) = Vs(\{a_k\})$. Rassemblons deux systèmes (1) et (2) de volumes respectifs $V^{(1)}$ et $V^{(2)}$, et dont les densités sont $\{a_k\}^{(1)}$ et $\{a_k\}^{(2)}$. Ils forment un système global de volume $V = V^{(1)} + V^{(2)}$. En notant α la proportion $V^{(1)}/V$, les observables densités $\{a_k\}$ de ce système sont :

$$A_k = V^{(1)}a_k^{(1)} + V^{(2)}a_k^{(2)} = Va_k$$
(2.44)

$$a_k = \alpha a_k^{(1)} + (1 - \alpha) a_k^{(2)} \tag{2.45}$$

et son entropie d'équilibre vérifie l'inégalité :

$$S = Vs > V^{(1)}s^{(1)} + V^{(2)}s^{(2)}$$
(2.46)

$$s \ge \alpha s^{(1)} + (1 - \alpha) s^{(2)} \tag{2.47}$$

ce qui correspond à la propriété de concavité :

$$s(\alpha\{a_k\}^{(1)} + (1-\alpha)\{a_k\}^{(2)}) \ge \alpha s(\{a_k\}^{(1)}) + (1-\alpha)s(\{a_k\}^{(2)})$$
(2.48)

Dans le cas d'une coexistence de phase à la limite thermodynamique, le système global est une juxtaposition de deux sous-systèmes homogènes décrivant chacune des deux phases. Dans ce cas, les particules étant indiscernables, seuls les effets d'interface entre les deux phases contribuent à l'augmentation de l'entropie par mise en contact des deux systèmes : or, pour un système infini, le rapport interface sur volume est nul, ce qui supprime cette contribution. L'inégalité devient alors une égalité, et l'entropie s^m du mélange de phase se déduit par interpolation linéaire de l'entropie s^h des systèmes homogènes correspondant à chacune des phases :

$$s^{m}(\{a_{k}\}) = \alpha s^{h}(\{a_{k}\}^{(1)}) + (1 - \alpha)s^{h}(\{a_{k}\}^{(2)})$$
(2.49)

où le point $\{a_k\}$ est fixé par les positions des phases $\{a_k\}^i$ et la proportion α selon l'équation (2.45).

En l'absence d'anomalie de courbure de s^h , l'équilibre statistique est obtenu pour un système homogène. En effet, si s^h est concave dans tout l'espace des observables, toute interpolation linéaire entre deux points est inférieure à cette fonction. Si en revanche s^h présente une région de convexité, autrement dit une anomalie de courbure, un mélange de phase peut aboutir à un système dont l'entropie est supérieure à celle du système homogène correspondant. Il s'agit alors de déterminer quelle combinaison de phases permet d'obtenir l'entropie maximale, c'est à dire d'atteindre l'équilibre statistique. Cela correspond à une construction géométrique qui élimine toute convexité par interpolation linéaire, à savoir l'enveloppe concave de l'entropie s^h .

Une illustration en est donnée par la figure 2.2, pour un système à une seule observable a. Le haut de la figure représente l'entropie $s^h(a)$ avec une convexité. On voit alors que le couple de points permettant de maximiser l'entropie est tel que les deux tangentes à l'entropie en chacun de ces points sont confondues en une seule et même droite. Le bas de la figure représente la dérivée, $\lambda = ds^h/da$, correspondant au paramètre intensif associé à l'observable a.

On reconnaît que la construction tangente sur $s^h(a)$ est équivalente à la construction de Maxwell (loi des aires) sur ds^h/da . En effet, l'égalité des pentes des tangentes s'écrit

$$(ds/da)^{(1)} = (ds/da)^{(2)} = \lambda_t$$
(2.50)

où λ_t est la valeur de λ au point de transition.

L'égalité de l'ordonnée à l'origine des tangentes implique quant à elle

$$(s - \lambda_t a)^{(1)} = (s - \lambda_t a)^{(2)}$$
(2.51)

qui peut aussi s'écrire sous la forme intégrale

$$\int_{(1)}^{(2)} \frac{ds}{da} da - \lambda_t (a^{(2)} - a^{(1)}) = 0$$
(2.52)

exprimant l'égalité des aires grisées de part et d'autre de l'axe $\lambda = \lambda_t$ pour la courbe $\lambda(a)$.

Lorsque plusieurs observables sont en jeu, la démarche que l'on vient de présenter doit être généralisée à plusieurs dimensions. L'enveloppe concave de l'entropie s'obtient alors par construction d'une surface réglée, constituée des segments reliant les couples de points ayant un même plan tangent. Il s'agit de la construction de Gibbs. L'identité des plans tangents implique l'égalité des pentes et celle des ordonnées à l'origine, à savoir

$$\{\partial s^h / \partial a_k\}^{(1)} = \{\partial s^h / \partial a_k\}^{(2)}$$

$$(2.53)$$

$$(s^{h} - \sum_{k} \lambda_{k} a_{k})^{(1)} = (s^{h} - \sum_{k} \lambda_{k} a_{k})^{(2)}$$
(2.54)

où les variables λ_k sont les paramètres intensifs associés aux observables a_k . Pour un système décrit par unité de volume, la relation (2.54) exprime l'égalité des pressions. En effet, d'après la relation (2.39), on a à la limite thermodynamique :

$$s^{h} - \sum_{k} \lambda_{k} a_{k} \simeq s^{h} - \sum_{k} \lambda_{k} < \hat{a}_{k} > = \ln \mathcal{Z}_{V}(\{\lambda_{k}\})/V = \beta P$$
(2.55)

Ainsi les propriétés géométriques liées à la construction de l'enveloppe concave permettent d'exprimer les conditions d'équilibre de Gibbs, qui requièrent l'égalité de tous les paramètres intensifs des deux phases :

$$(\{\lambda_k\}, P)^{(1)} = (\{\lambda_k\}, P)^{(2)}$$
(2.56)



FIG. 2.2 – Illustration de la construction de l'enveloppe concave de l'entropie, déterminant une coexistence de phase. A une dimension, elle se réduit à une construction de Maxwell (loi des aires). Les courbes sont représentées en fonction de l'observable-densité a = A/V. En haut : entropie par unité de volume pour un système homogène, avec intrusion convexe corrigée par interpolation linéaire. En bas : paramètre associé à l'observable $a, \lambda = ds^h/da$.

2.3 Ordre d'une transition de phase

Nous venons de voir qu'une anomalie de courbure de l'entropie d'un système homogène se traduit par un équilibre statistique pour lequel deux phases sont en coexistence. Il s'agit d'un cas de transition de phase. La notion de transition de phase ne concerne cependant pas uniquement des systèmes présentant une coexistence. Il existe différents types de transitions, chacune correspondant à un caractère particulier de la fonction de partition. Elles sont classées suivant ce que l'on appelle leur ordre.

2.3.1 Singularités de la fonction de partition

La fonction de partition d'un système à la limite thermodynamique est susceptible de présenter des singularités. Dans le cas d'un système de taille finie, les variables thermodynamiques sont reliées entre elles par des fonctions continues et dérivables en tout point. En revanche, si l'on fait tendre sa taille vers l'infini, la divergence de certaines quantités peut entraîner des comportements singuliers. Une transition de phase est ainsi définie par une discontinuité ou une divergence affectant une des dérivées de la fonction de partition dans l'espace des paramètres intensifs, $\ln Z(\{\lambda_k\})$. Par exemple, pour une transition faisant intervenir une coexistence de phases, l'approximation de point selle se traduit par le saut d'une observable $\langle \hat{A} \rangle$ de part et d'autre d'un point de transition λ_t , soit une discontinuité de la dérivée $\partial \ln Z/\partial \lambda$.

Remarquons que les singularités ainsi rencontrées à la limite thermodynamique peuvent être mises en relation avec des propriétés particulières des fonctions décrivant un système fini. C'est ce qui permet d'étendre la notion de transition de phase aux systèmes physiques en général. Une distribution bimodale peut ainsi être considérée comme la signature d'une coexistence de phase [Gul99, Lyn94]. Par ailleurs, les singularités peuvent être reliées à l'annulation de la fonction de partition d'un système fini représenté dans le plan des paramètres intensifs complexes [GroS67]. Cependant, l'étude présentée dans ce document se situe dans le cadre de la limite thermodynamique, et la définition traditionnelle des transitions de phase peut y être employée.

2.3.2 Ehrenfest et le premier ordre

La définition d'Ehrenfest s'appuie sur le degré de non-analyticité de la fonction de partition $\ln Z(\{\lambda_k\})$. D'une façon générale, elle fait correspondre une transition d'ordre n à une discontinuité présente dans une dérivée n-ième de $\ln Z$. L'ordre est fixé par le premier degré de dérivation pour lequel une discontinuité est rencontrée. Ainsi [Ehr59] :

- une discontinuité de $\partial \ln Z/\partial \lambda_k$ (pour au moins un k quelconque) définit une transition d'ordre 1. Ceci correspond à un saut dans l'équation d'état $\langle \hat{A}_k \rangle (\lambda_k)$. Cette situation se produit lorsque l'équilibre thermodynamique met en jeu une coexistence de phase.
- Une discontinuité de $\partial^2 \ln Z / \partial \lambda_k^2$ définit une transition d'ordre 2.
- Si le n-1 premières dérivées sont continues, une discontinuité de $\partial^n \ln Z / \partial \lambda_k^n$ définit une transition d'ordre n.

Actuellement, la définition d'Ehrenfest est utilisée pour déterminer les transitions du premier ordre. Pour les ordres supérieurs, les critères ont été modifiés.

2.3.3 Transition continue

Au delà du premier ordre, une transition est qualifiée de continue. Les équations d'état $\langle A_k \rangle$ (λ_k) ne présentent en effet aucun saut. La transition de phase est alors reliée à une singularité dans une des dérivées d'ordre supérieur à un. Cette singularité peut être une discontinuité (définition d'Ehrenfest) ou, souvent, une divergence.

Ainsi, la transition liquide-gaz présente un point critique à une température T_c au delà de laquelle les deux phases ne sont plus distinctes. Ce point critique se traduit par une divergence de la fluctuation de densité, c'est à dire de la dérivée seconde $\partial^2 Z/\partial \lambda^2$, où λ désigne le paramètre de Lagrange associé à la densité (pression ou potentiel chimique selon l'ensemble étudié).

2.4 Illustration : fluide de Van der Waals

Les différentes notions de physique statistique qui ont été exposées dans ce chapître vont maintenant être illustrées dans le cas du fluide de Van der Waals, qui constitue un modèle simple pour l'étude de la transition liquide-gaz. L'existence d'une transition de ce type est liée à la forme de l'interaction entre particules, à savoir ici la force Van der Waals, qui est attractive à moyenne portée et répulsive à courte portée (coeur dur de taille finie).

Nous allons plus particulièrement chercher à mettre en évidence à partir de cet exemple connu la distinction entre le concept de transition de phase et celui de transformation thermodynamique. En effet, nous verrons par la suite qu'une transition du premier ordre peut donner lieu à une transformation continue, selon les contraintes imposées au système. Un tel effet a souvent conduit à interpréter comme un second ordre la transition de phase liquide-gaz de la matière nucléaire asymétrique, alors que l'étude complète de son équation d'état démontre qu'il s'agit d'une transition du premier ordre : ce point sera étudié dans le chapître 4.

2.4.1 Fonctions de partition et équations d'état

Considérons un fluide unique de particules de masse m, interagissant par la force de Van der Waals. Trois observables permettent de décrire ce système : le nombre de particules \hat{N} , le volume \hat{V} et l'énergie donnée par l'hamiltonien \hat{H} .

Ensemble canonique

Exprimons d'abord la fonction de partition canonique, décrivant un système pour lequel le nombre de particules N et le volume V sont fixés, déterminant la densité $\rho = N/V$. L'énergie fluctue autour d'une valeur moyenne $\langle \hat{H} \rangle$ contrôlée par le paramètre $\beta = 1/T$. La fonction de partition Z_c est donnée par :

$$Z_c(\beta, N, V) = Tr(e^{-\beta \hat{E}}) = \sum_i e^{-\beta E_i}$$
(2.57)

Cette fonction peut s'obtenir sous forme analytique dans une approche semi-classique, en traitant l'interaction en champ moyen. Le détail de ce calcul se trouve par exemple dans la référence [Diu89]. Nous en rappelons ici les grandes lignes.

 Z_c s'obtient par une intégration sur l'espace des phases (positions $\vec{r_i}$ et impulsions $\vec{p_i}$ des différentes particules) :

$$Z_{c}(\beta, N, V) = \int \dots \int \frac{d\vec{r_{1}} \dots d\vec{r_{N}} d\vec{p_{1}} \dots d\vec{p_{N}}}{N!h^{3N}} e^{-\beta E(\{\vec{p_{i}}\})}$$

avec $E(\{\vec{p_{i}}\}) = \sum_{i} \frac{\vec{p_{i}}^{2}}{2m} + E_{p}$; $E_{p} = \sum_{i,j \neq i} U_{ij}/2 \simeq aN^{2}/V$ (2.58)

où l'on a introduit l'énergie potentielle E_p , que l'on a exprimée dans une approximation de champ moyen telle que pour tout *i* on a $\sum_j U_{ij}/2 \simeq aN/V$ (*a* étant une constante liée à la portée de l'interaction). Après quelques étapes de calcul, on obtient finalement l'expression :

$$Z_{c}(\beta, N, V) = \frac{1}{N!} \left(\frac{V - Nb}{v_{0}} \right)^{N} e^{-\beta \frac{aN^{2}}{V}}$$

soit $\ln Z_{c}(\beta, N, V) = N \left[1 + \ln \frac{b}{v_{0}} + \ln \left(\frac{1 - \rho b}{\rho b} \right) + \beta a \rho \right]$ (2.59)

 $v_0 = \left(\frac{\beta h^2}{2\pi m}\right)^{3/2}$

avec b paramètre lié au volume exclu par le rayon de coeur dur a paramètre lié à la portée de l'interaction

L'énergie moyenne du système, composée d'un terme cinétique et d'un terme potentiel, est donnée par l'équation d'état :

$$\langle \hat{H} \rangle = -\frac{\partial \ln Z_c}{\partial \beta} = \frac{3}{2\beta} - Na\rho$$
 (2.60)



FIG. 2.3 – Inversion de pente de la fonction $\lambda_0(V) = \partial_V \ln Z_c$, équivalant pour chaque température fixée à une courbe P(V). Les courbes sont tracées pour différentes valeurs du paramètre de température β , soit β/β_c compris entre 0.9 et 1.2 par pas de 0.05. Le point critique est marqué.

Ensembles de taille fluctuante

Passons maintenant à des ensembles de taille fluctuante. Nous considérerons deux cas : N fixé pour V fluctuant, et inversement. Commençons par le premier cas, pour lequel on parle d'ensemble isobare (le volume moyen étant contrôlé, pour une température donnée, par la pression). La fonction de partition correspondante est notée Z_N , et elle est reliée à Z_c dans l'approximation de point selle par :

$$\ln \mathcal{Z}_N(\beta, N, \lambda) \simeq \ln Z_c(\beta, N, V) - \lambda V \tag{2.61}$$

où, pour $\lambda=\beta P$ fixé, le volume $V=<\hat{V}>$ est solution de l'équation

$$\lambda = \lambda_0(V) = \partial_V \ln Z_c \tag{2.62}$$

La fonction $\lambda_0(V)$ dépend en fait de la densité $\rho = N/V$, selon :

$$\lambda_0(\rho) = \frac{\partial \ln Z_c}{\partial V} = \frac{\rho}{1 - \rho b} - \beta a \rho^2 \tag{2.63}$$

Si $\lambda_0(\rho)$ est monotone, l'équation (2.62) a une seule solution : il s'agit du point selle déterminant l'équation (2.61). Au dessus d'une valeur critique du paramètre β , soit $T < T_c = 1/\beta_c$, $\lambda_0(\rho)$ présente une inversion de pente, comme le montre la figure 2.3. Il existe alors un intervalle de λ pour lequel ln $Z_c - \lambda V$ a plusieurs extrema : la solution correspondant au maximum principal est alors déterminée par la construction de Maxwell qui s'effectue sur $\lambda_0(1/\rho)$, remplaçant l'inversion de pente par un plateau. Au passage de la valeur de transition λ_c , la position de cette solution saute d'une branche à l'autre. Il y a transition entre deux phases de volumes distincts : le volume est une observable paramètre d'ordre de cette transition. Le nombre de particules étant fixé, l'une des phases est à haute densité (liquide), l'autre à basse densité (gaz).

Le point critique est déterminé par la double condition $(\partial \lambda_0 / \partial \rho)_c = (\partial^2 \lambda_0 / \partial \rho^2)_c = 0$ qui donne la densité critique et les coordonnées intensives associées :

$$\rho_c = \frac{1}{3b} \quad ; \quad \beta_c = \frac{27b}{8a} \quad ; \quad \lambda_c = \frac{1}{8b}$$
(2.64)

En vue d'une représentation numérique, il est utile d'exprimer les fonctions thermodynamiques en fonction des coordonnées réduites :

$$R = \frac{\rho}{\rho_c} \quad ; \quad \mathcal{B} = \frac{\beta}{\beta_c} \quad ; \quad \mathcal{L} = \frac{\lambda}{\lambda_c} \tag{2.65}$$

On introduit de plus la quantité $v_0^c = v_0(\beta = \beta_c)$. On a alors, en résumé :

$$\frac{\ln Z_c}{N}(\mathcal{B},R) = 1 + \ln \frac{b}{v_0^c} - \frac{3}{2}\ln \mathcal{B} + \ln\left(\frac{3-R}{R}\right) + \frac{9}{8}\mathcal{B}R$$
(2.66)

$$\frac{\ln \mathcal{Z}_N}{N}(\mathcal{B}, \mathcal{L}) \simeq \frac{\ln Z_c}{N}(\mathcal{B}, R) - \frac{3}{8} \frac{\mathcal{L}}{R}$$
(2.67)

avec dans l'équation (2.67), pour $(\mathcal{B}, \mathcal{L})$ fixé, R solution de

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0(\mathcal{B}, R) = \frac{8R}{3-R} - 3\mathcal{B}R^2$$
(2.68)

la solution correspondant au point selle étant déterminée si besoin par construction de Maxwell sur $\mathcal{L}_0(1/R)$.

Considérons maintenant l'autre ensemble de taille fluctuante, à savoir l'ensemble grand-canonique, tel que V est fixé et N fluctue. La valeur moyenne $\langle \hat{N} \rangle$ est contrôlée par le paramètre $\alpha = \beta \mu$, où μ est le potentiel chimique. Ce paramètre est traditionnellement affecté d'un signe – par rapport au paramètre de Lagrange correspondant : $\alpha = -\lambda_V$. La fonction de partition grand-canonique, notée ici \mathcal{Z}_V , s'obtient dans l'approximation de point selle par :

$$\ln \mathcal{Z}_{V}(\beta, \alpha, V) \simeq \ln Z_{c}(\beta, N, V) + \alpha N$$

= $N \left[-\frac{3}{2} \ln \frac{\beta}{\beta_{c}} + \ln \left(\frac{1-\rho b}{\rho b} \right) + \beta a \rho \right] + \alpha' N$ (2.69)

où l'on a posé $\alpha' = \alpha + 1 + \ln \frac{b}{v_0^c}$. Pour α' fixé, le nombre de particules $N = \langle \hat{N} \rangle$ apparaissant dans cette relation est solution de l'équation

$$\alpha' = \alpha'_0(N) = -\frac{\partial}{\partial N} \left(N \left[-\frac{3}{2} \ln \frac{\beta}{\beta_c} + \ln \left(\frac{1-\rho b}{\rho b} \right) + \beta a \rho \right] \right)$$
(2.70)

avec α'_0 s'exprimant en fonction de la densité :

$$\alpha_0'(\rho) = -\left(-\frac{3}{2}\ln\frac{\beta}{\beta_c} + \ln\left(\frac{1-\rho b}{\rho b}\right) + \frac{1}{\rho b - 1} + 2\beta a\rho\right)$$

$$= -\left(-\frac{3}{2}\ln\mathcal{B} + \ln\left(\frac{3-R}{R}\right) + \frac{3}{R-3} + \frac{9}{4}\mathcal{B}R\right)$$
(2.71)

ce qui donne la valeur au point critique $\alpha'_c = -(\ln 2 + 3/4)$. On introduit alors la variable réduite $\mathcal{A} = \alpha'/|\alpha'_c|$. La fonction de partition grand-canonique par unité de volume s'exprime en fonction des variables réduites par :

$$3b\frac{\ln \mathcal{Z}_V}{V}(\mathcal{B},\mathcal{A}) \simeq R\left[-\frac{3}{2}\ln \mathcal{B} + \ln\left(\frac{3-R}{R}\right) + \frac{9}{8}\mathcal{B}R\right] + \left(\ln 2 + \frac{3}{4}\right)\mathcal{A}R\tag{2.72}$$

avec pour $(\mathcal{B}, \mathcal{A})$ fixé R solution de l'équation

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0(R) = \frac{1}{\ln 2 + 3/4} \left[-\frac{3}{2} \ln \mathcal{B} + \ln \left(\frac{3-R}{R} \right) + \frac{3}{R-3} + \frac{9}{4} \mathcal{B}R \right]$$
(2.73)

la solution correspondant au point selle étant déterminée si besoin par construction de Maxwell sur $\mathcal{A}_0(R)$.

La partie gauche de la figure 2.4 représente la fonction de partition à N fixé et V fluctuant, par particule dans l'espace des paramètres intensifs : $\ln Z_N/N(\mathcal{B}, \mathcal{L})$. Pour $\mathcal{B} > 1$, soit une température sous-critique, la détermination du point selle fait intervenir la construction de Maxwell : cela se traduit par une rupture de pente des fonctions de partition de part et d'autre du point de transition correspondant, $(\mathcal{B}, \mathcal{L}_t(\mathcal{B}))$ ou $(\mathcal{B}, \mathcal{A}_t(\mathcal{B}))$.



FIG. 2.4 – Equations d'état dans l'ensemble à N fixé et V fluctuant, représentées dans le plan des paramètres intensifs $(\beta, \lambda = \beta P)$. A gauche : fonction de partition $\ln Z_N/N$ représentée à une constante près $(C_0 = 1 + \ln(b/v_0^c))$. Au centre : équation d'état liée au volume, $\langle \hat{V} \rangle (\beta, \lambda)$, où l'on a posé $\langle \hat{V} \rangle /N = 1/\rho$. Elle correspond à la pente en λ de la fonction de partition. A droite : équation d'état liée à l'énergie, $\langle \hat{H} \rangle (\beta, \lambda)$, où l'on a posé $\langle \hat{H} \rangle /N = \epsilon$. Elle correspond à la pente en β de la fonction de partition. La ligne de pli présente sur la surface $\ln Z_N(\beta, \lambda)$ se traduit par une ligne de discontinuité dans chacune de ces équations d'états : \hat{V} et \hat{H} sont paramètres d'ordre de la transition d'ordre 1 correspondante.

Équations d'état

Les pentes de chaque fonction de partition exprimée dans l'espace des paramètres intensifs correspondent aux valeurs moyennes des observables associées.

Ainsi, pour l'ensemble à N fixé, l'énergie et le volume moyens sont reliés à $\ln Z_N$ par :

avec $R = \rho/\rho_c$, en posant $\rho = N/\langle \hat{V} \rangle$.

Remarquons que, pour cet ensemble, l'énergie moyenne est donnée par la pente à $\lambda = \beta P$ constant. Une pression constante correspond à un chemin du plan (β, λ) pour lequel chacun des deux paramètres varie : la pente de $\ln Z_N$ le long de ce chemin donne l'enthalpie du système, $\langle \hat{H} \rangle + P < \hat{V} \rangle$.

Pour l'ensemble à V fixé, l'énergie et le nombre moyen de particules sont reliés à $\ln Z_V$ par :

avec $R = \rho/\rho_c$, en posant $\rho = \langle \hat{N} \rangle /V$.

Ces différentes équations d'état sont représentées sur la droite de la figure 2.4. La ligne de rupture de pente apparaissant sur la surface de chacune des fonctions de partitions se traduit par une discontinuité des équations d'états correspondantes. C'est ce qui caractérise une transition de phase du premier ordre. Cette ligne de discontinuité prend fin au point critique, pour lequel les équations d'état présentent une tangente verticale : il s'agit d'un point de transition du second ordre.

2.4.2 Transition de phase et transformation thermodynamique

Nous allons maintenant étudier le comportement des variables thermodynamiques lorsque le système subit une transformation le soumettant à une transition de phase. Nous choisissons pour cela de nous placer dans l'ensemble à N fixé et V fluctuant, qui s'étudie dans l'espace des variables intensives $(\beta, \lambda = \beta P)$.



FIG. 2.5 – Diagramme des phases dans le plan des paramètres intensifs (β, λ) . La rupture de pente de ln Z_N forme une ligne de transition du premier ordre (ou ligne de coexistence), terminée par un point critique du second ordre. A droite : même diagramme représenté en température-pression, soit avec le changement de variable $(T = 1/\beta, P = \lambda/\beta)$. Trois exemples de transformations thermodynamiques entre deux points L et G sont indiqués. Elles impliquent respectivement une transition du premier ordre, du second ordre, et (en pointillés) aucune transition.

Diagramme de phase et transformations

Les singularités observées dans la fonction de partition $\ln \mathcal{Z}_N(\beta, \lambda)$ définissent un diagramme des phases dans le plan intensif (β, λ) (*cf* figure 2.5). Ce diagramme comporte une ligne de transition du premier ordre, terminée par un point critique du second ordre (β_c, λ_c) . On appelle « liquide » et « gaz » les états situés de part et d'autre de la ligne, caractérisés par une haute ou basse densité. Les systèmes situés sur cette ligne se composent de deux phases en coexistence.

Supposons que le système soit porté d'un point de type liquide L à un point de type gaz G. Ceci peut se faire suivant différents chemins dans le plan (β, λ) , ainsi qu'il est illustré sur la figure 2.5. Chacun de ces chemins définit une transformation thermodynamique. Nous pouvons en distinguer trois sortes :

- transformation franchissant la ligne de discontinuité, pour lequel le système subit une transition d'ordre 1;
- transformation contournant cette ligne, pour lequel il n'y a pas de transition de phase (on parle alors de « cross-over »);
- dans le cas limite, la transformation passe par le point critique, donnant lieu à une transition d'ordre 2.

Nous allons maintenant nous intéresser au comportement des variables thermodynamiques pour différentes transformations franchissant la ligne de premier ordre.

Comportement de la courbe calorique

La courbe calorique T(E) est un des exemples les plus connus de relation entre une variable extensive et sa variable intensive associée. Son allure dépend des contraintes imposées au



FIG. 2.6 – Courbes caloriques obtenues pour deux transformations thermodynamiques, respectivement à pression constante et à volume constant. Toutes deux impliquent une transition du premier ordre. A gauche : équation d'état $\epsilon(\beta, \lambda)$ présentant une ligne de discontinuité. Les chemins correspondant à chacune des deux transformations sont indiqués. Dans le cas de la pression contante, la discontinuité est traversée en un point du plan (β, λ) . Dans le cas du volume constant (en pointillés), la contrainte portant sur un paramètre d'ordre impose au système de longer la ligne de coexistence. A droite : courbes caloriques $\epsilon(T)$ correspondant à chaque transformation. A pression constante, on a une phase pure de part et d'autre du point de transition : le passage est marqué par un saut en énergie. A volume constant, en dessous de la température de transition l'évolution se poursuit en coexistence de phase, donnant lieu à une variation continue de l'énergie globale.

système. Nous voulons ici comparer deux cas, définissant deux transformations thermodynamiques différentes : l'une à pression constante, l'autre à volume constant. Toutes deux sont représentées sur la figure 2.6.

Dans le cas d'une transformation à pression constante, correspondant à la situation familière de l'ébullition de l'eau sous conditions atmosphériques, la courbe calorique T(E) est caractérisée par un plateau. Partant d'un liquide, tandis que l'on apporte de l'énergie au système, sa température augmente jusqu'à atteindre le point de transition. L'énergie apportée est alors employée à l'ébullition, qui se fait à température constante tandis que la proportion de gaz augmente. Lorsque tout le système est transformé en gaz, la température augmente à nouveau. Le plateau de température s'étend sur une variation d'énergie ΔE qui est la chaleur latente de la transition.

La chaleur latente équivaut au saut de l'observable E(T) au point de transition. Cette discontinuité due à la transition d'ordre 1 peut être observée pour cette transformation spécifique car elle correspond à un chemin pour lequel la ligne de transition est traversée en un seul point. C'est en ce point de traversée qu'est contenue toute l'évolution du système entre son état liquide et son état gazeux; de part et d'autre de ce point, on assiste donc à un saut des observables paramètres d'ordre, la densité et l'énergie.
Observons maintenant une transformation à volume constant. Pour un nombre de particules donné, ceci revient à fixer la densité. Le fait d'imposer une telle contrainte s'oppose à toute discontinuité dans l'évolution des observables. En effet, la densité étant un paramètre d'ordre de la transition liquide-gaz, si sa valeur est constante il est impossible au système de traverser la ligne de coexistence en un point. La transformation est contrainte, une fois cette ligne atteinte, de la longer afin que le système évolue par une variation progressive de la proportion des deux phases. Il en résulte une courbe calorique continue, sans saut de l'énergie, alors qu'il se produit une transition de phase du premier ordre puisque les points mis en jeu appartiennent à la ligne d'ordre 1 du diagramme des phases. La coexistence de phase permettant cette évolution est d'ailleurs caractéristique d'une transition d'ordre 1.

2.4.3 Cas d'un système à deux fluides

Pour finir, évoquons brièvement un cas simple de système à deux fluides. En supposant une transformation de volume (expansion ou compression isotherme) appliquée à un fluide de Van der Waals additionné d'un gaz parfait, l'on obtient un autre exemple de cas où une transition d'ordre 1 conduit à une évolution continue des observables. Ceci est illustré qualitativement par la figure 2.7.

Pour la transformation considérée, le nombre de particules de chacun des deux fluides est conservé : il en résulte une contrainte de proportion constante. Pour un fluide de Van der Waals pur, une évolution en volume pour une température sous-critique se traduit par une région de coexistence, correspondant à un plateau de pression pour la courbe P(V). Pour un gaz parfait, il n'existe pas de transition de phase et la pression est toujours inversement proportionnelle au volume. Ainsi, lorsqu'on mélange un fluide de Van der Waals (1) et un gaz parfait (2) de façon à fixer la proportion ρ_1/ρ_2 , les pressions associées à chacun des deux fluides s'additionnent de telle sorte que le plateau caractérisant la transition de phase du fluide (1) pur disparaît. Il en résulte une évolution continue du volume V(P), avec une rupture de pente en entrée et sortie de la région de coexistence. C'est ce qu'illustre la partie gauche de la figure 2.7.

Ce comportement est encore une fois lié à la contrainte imposée à un paramètre d'ordre. En effet, la densité ρ_1 du fluide de Van der Waals est un paramètre d'ordre de la transition liquide gaz; or sa valeur est liée à celle de ρ_2 , dont l'évolution est continue. Ainsi la contrainte $\rho_1/\rho_2 = constante$ supprime toute possibilité d'évolution discontinue pour ρ_1 .

Afin d'avoir une représentation claire du rôle joué par cette contrainte, faisons apparaître le chemin particulier de la transformation qui lui correspond dans un espace non-contraint. Ceci consiste à considérer les densités ρ_1 et ρ_2 comme indépendantes, c'est à dire à prendre en compte une dimension supplémentaire dans l'espace des observables. Il en va de même pour l'espace des variables intensives associées. Plaçons-nous dans l'ensemble grand-canonique tel que les valeurs moyennes de ρ_1 et ρ_2 sont contrôlées par les paramètres intensifs α_1 et α_2 . La fonction de partition correspondante est notée $Z_V(\beta, \alpha_1, \alpha_2)$. En l'absence d'interaction entre les deux fluides, dans cet ensemble leurs contributions se factorisent de telle sorte que l'on a :

$$\ln \mathcal{Z}_V(\beta, \alpha_1, \alpha_2) = \ln \mathcal{Z}_V^{(1)}(\beta, \alpha_1) + \ln \mathcal{Z}_V^{(2)}(\beta, \alpha_2)$$
(2.76)

avec $Z_V^{(1)}$ et $Z_V^{(2)}$ les fonctions de partition grand-canoniques pour chaque fluide pur. Chacune des densités ρ_1 et ρ_2 est donnée par la pente de $\ln Z_V$ dans la direction correspondante, suivant l'équation d'état :

$$\rho_i(\beta, \alpha_i) = \partial_{\alpha_i} \ln \mathcal{Z}_V(\beta, \alpha_1, \alpha_2) \tag{2.77}$$

La fonction $\ln Z_V(\beta, \alpha_1, \alpha_2)$ est représentée sur la partie droite de la figure 2, dans le plan (α_1, α_2) pour une valeur sous-critique de la température soit $\beta > \beta_c$. Dans ces conditions, le fluide de Van der Waals présente une transition liquide-gaz d'ordre 1. La surface obtenue possède un pli, c'est à dire une rupture de pente dans la direction α_1 à la valeur de transition $(\alpha_1)_t(\beta)$ (indépendamment de α_2). Les valeurs moyennes ρ_1 et ρ_2 en chaque point (α_1, α_2) sont données par les pentes de cette surface. Nous voyons ainsi que ρ_2 doit former une surface continue, et ρ_1 présenter un saut de part et d'autre de la ligne $\alpha_1 = (\alpha_1)_t(\beta)$. Nous avons représenté la valeur



FIG. 2.7 – Evolution continue d'une transformation portant sur un mélange de deux fluides (1) et (2) en proportion ρ_1/ρ_2 constante. La température est fixée de telle sorte que le fluide de Van der Waals (1) présente une transition de phase d'ordre 1. Le fuide (2) est un gaz parfait, ne donnant lieu à aucune singularité. A gauche : disparition du plateau de pression due à la somme des deux contributions. A droite : représentation du chemin suivi par une transformation $\rho_1/\rho_2 = constante$, correspondant à la contrainte d'un paramètre d'ordre de la transition (voir texte).

résultante du rapport ρ_1/ρ_2 . A cause de la discontinuité de ρ_1 , ce rapport prend également des valeurs distinctes de part et d'autre de chaque point de transition : il s'agit d'un paramètre d'ordre.

Lorsque l'on étudie un système pour lequel le nombre de particules de chaque espèce est fixé, on impose la constance du paramètre d'ordre ρ_1/ρ_2 . Par conséquent, si dans une transformation de volume la ligne de coexistence est atteinte, elle ne peut être traversée en un point mais doit être longée jusqu'à ce que la valeur fixée de la proportion des fluides rejoigne celle d'une phase pure. C'est ce qu'illustre le chemin tracé sur les surfaces ln $\mathcal{Z}_V(\beta, \alpha_1, \alpha_2)$ et $\rho_1/\rho_2(\beta, \alpha_1, \alpha_2)$ de la figure 2.7.

Ainsi, la discontinuité liée à une transition d'ordre 1 ne se retrouve pas nécessairement dans l'évolution des observables lors d'une transformation thermodynamique mettant en jeu une telle transition. En particulier, cette évolution est nécessairement continue lorsqu'une loi de conservation s'applique à l'un des paramètres d'ordre de la transition. Nous en discuterons les conséquences pour la matière nucléaire dans le chapître 4.

Chapitre 3

Thermodynamique de la matière nucléaire

L'étude de la transition de type liquide-gaz que présente la matière nucléaire passe par l'expression des fonctions thermodynamiques nécessaires à la description d'un ensemble de nucléons. Ce chapître expose comment peut se formuler une telle description. Pour commencer, nous introduisons l'approche de champ moyen : cette approximation permet de traiter le système en interaction comme un ensemble de particules indépendantes. En utilisant ensuite pour modéliser l'interaction entre nucléons une interaction effective de type Skyrme, nous obtenons l'énergie moyenne du système sous forme d'une fonctionnelle de la matrice densité à un corps. Il est alors possible d'étudier la statistique de la matière nucléaire de façon analogue à celle d'un gaz de Fermi. Le formalisme grand-canonique en permet une approche simple qui, dans le cadre de la limite thermodynamique, donne accès de façon équivalente aux différents ensembles statistiques.

3.1 Approche de champ moyen

L'approximation de champ moyen consiste à décrire un système de particules en interaction mutuelle comme un ensemble de particules indépendantes plongées dans un potentiel, donné par l'opérateur de champ moyen \hat{W} .

3.1.1 Description en particules indépendantes

Une façon d'introduire l'opérateur de champ moyen est de considérer le problème général de la recherche de l'état fondamental d'un système à N corps (méthode Hartree-Fock). L'approche de champ moyen s'appuie sur le principe variationnel s'appliquant lorsqu'une fonction d'onde $|\psi\rangle$ est un état propre de \hat{H} :

$$\delta\left(\frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}\right) = 0 \tag{3.1}$$

Cette équation est résolue en recherchant $|\Psi\rangle$ de façon itérative parmi un sous-ensemble de fonctions d'onde. Dans l'approche de champ moyen, ce sont des déterminants de Slater $|\Phi\rangle$, c'est à dire des produits antisymétrisés d'états individuels $|i\rangle$:

$$|\Phi\rangle = \prod_{i} a_{i}^{+}|0\rangle \tag{3.2}$$

où |0> est le vide de particules.

La valeur moyenne de \hat{H} (équation (3.39)) sur l'état $|\Phi\rangle$ s'exprime en fonction de la matrice densité à un corps $\hat{\rho}$. Considérons en effet des opérateurs à un, deux et trois corps (ce dernier

cas nous sera utile dans la section suivante). En notant n_i l'occupation d'un état i, les valeurs moyennes sur $|\Phi \rangle$ de ces opérateurs sont :

$$< \Phi |a_i^+ a_j| \Phi > = < j |\hat{\rho}|_i > = \rho_{ji} = n_i \delta_{ij}$$

$$< \Phi |a_i^+ a_j^+ a_l a_k| \Phi > = \rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{li} \rho_{kj} = n_i n_j (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk})$$

$$< \Phi |a_h^+ a_i^+ a_j^+ a_m a_l a_k| \Phi > = n_h n_i n_j \sum_{\pi} (-1)^{\pi} \delta_{hk} \delta_{il} \delta_{jm}$$

$$(3.3)$$

où la somme sur les permutations π apparaissant dans le troisième produit se développe comme :

$$\sum_{\pi} (-1)^{\pi} \delta_{hk} \delta_{il} \delta_{jm} = \delta_{hk} \delta_{il} \delta_{jm} + \delta_{hm} \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{hl} \delta_{im} \delta_{jk} - \delta_{hk} \delta_{im} \delta_{jl} - \delta_{hm} \delta_{il} \delta_{jk} - \delta_{hl} \delta_{ik} \delta_{jm}$$
(3.4)

La valeur moyenne $\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$ s'exprime donc en fonction des densités à un corps :

$$< \Phi |\hat{H}| \Phi > = E[\hat{\rho}]$$

= $\sum_{ij} < i |\hat{T}|_{j} > \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ii'jj'} < ii' |\hat{V}|_{jj'} > \rho_{ji}\rho_{j'i'}$ (3.5)

avec $|\widetilde{jj'}\rangle = |jj'\rangle - |j'j\rangle$.

Une variation $\delta \hat{\rho}$ de la densité à un corps entraı̂ne au premier ordre pour l'énergie moyenne :

$$\delta E = \frac{\delta E[\hat{\rho}]}{\delta \hat{\rho}} \delta \hat{\rho} = \sum_{ij} \frac{\delta E}{\delta \rho_{ji}} \delta \rho_{ji}$$
(3.6)

L'opérateur de champ moyen, que l'on note \hat{W} , est défini par

$$\delta E = Tr(\hat{W}\delta\hat{\rho}) = \sum_{ij} W_{ij}\delta\rho_{ji} \quad soit \quad W_{ij} = \frac{\delta E}{\delta\rho_{ji}}$$
(3.7)

et présente la propriété de commutation

$$\left[\hat{W},\hat{\rho}\right] = 0 \tag{3.8}$$

Explicitons maintenant la variation de l'énergie moyenne, en supposant dans un premier temps l'interaction \hat{V} indépendante de la densité.

$$E[\hat{\rho}] = <\Phi|\hat{H}|\Phi> = <\hat{H}> = <\hat{T}> + <\hat{V}>$$
(3.9)

$$\delta < \hat{T} > = \sum_{ij} < i |\hat{T}| j > \delta \rho_{ji}$$
(3.10)

$$\delta < \hat{V} > = \sum_{ii'jj'} < ii' |\hat{V}| \widetilde{jj'} > \rho_{j'i'} \delta \rho_{ji} = \sum_{ij} \Gamma_{ij} \delta \rho_{ji}$$
(3.11)

où l'on a introduit pour exprimer la moyenne du terme à deux corps l'opérateur $\hat{\Gamma}$ tel que :

$$\Gamma_{ij} = \sum_{i'j'} \langle ii' | \hat{V} | \widetilde{jj'} \rangle \rho_{j'i'}$$
(3.12)

L'opérateur de champ moyen \hat{W} a donc pour éléments $W_{ij} = T_{ij} + \Gamma_{ij}$. Il peut être exprimé sur la même base propre que $\hat{\rho}$, pour laquelle $\rho_{ij} = n_i \delta_{ij}$ avec $n_{i \leq N} = 1$ et $n_{i>N} = 0$. Les valeurs propres de \hat{W} correspondent alors à des niveaux d'énergie individuels ϵ_i donnés par :

$$\epsilon_i = \langle i|\hat{T} + \hat{\Gamma}|i\rangle = \langle i|\hat{T}|i\rangle + \sum_{i' \leq N} \langle ii'|\hat{V}|\tilde{ii'}\rangle$$
(3.13)

Quant à l'énergie moyenne du système en interaction, elle s'exprime sur cette base par :

$$E[\hat{\rho}] = \sum_{i \le N} \left\{ \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i' \le N} \langle ii' | \hat{V} | \tilde{ii'} \rangle \right\}$$
(3.14)

Si l'on considère une interaction dépendante de la densité $\hat{V}[\hat{\rho}]$, un terme de réarrangement s'ajoute aux expressions précédentes. On a alors :

$$\Gamma_{ij} = \sum_{i'j'} \langle ii' | \hat{V} | \tilde{jj'} \rangle \rho_{j'i'} + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \frac{\partial \langle kl | \hat{V} | \widetilde{mn} \rangle}{\partial \rho_{ji}} \rho_{mk} \rho_{nl}$$
(3.15)

soit, sur la base propre de $\hat{\rho}$, les énergies individuelles

$$\epsilon_i = \langle i|\hat{T}|i\rangle + \sum_{i' \le N} \langle ii'|\hat{V}|i\tilde{i'}\rangle + \frac{1}{2}\sum_{kl \le N} \frac{\partial \langle kl|\hat{V}|kl\rangle}{\partial \rho_{ii}}$$
(3.16)

reliées à l'énergie moyenne globale selon :

$$E[\hat{\rho}] = \sum_{i \le N} \left\{ \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i' \le N} \langle ii' | \hat{V} | \tilde{ii'} \rangle - \frac{1}{2} \sum_{kl \le N} \frac{\partial \langle kl | \hat{V} | \tilde{kl} \rangle}{\partial \rho_{ii}} \right\}$$
(3.17)

Afin d'expliciter la fonctionnelle $E[\hat{\rho}]$, il faut connaître l'expression de l'opérateur \hat{V} . Nous avons pour cela utilisé une interaction effective de type Skyrme, présentée dans la partie suivante.

3.1.2 Interaction effective de Skyrme

Les interactions effectives permettent de décrire efficacement un ensemble de nucléons en interaction. Il s'agit d'interactions modèles définies de façon à obtenir en champ moyen des résultats semblables à ceux d'un traitement exact. Plus précisément, l'application d'une interaction effective à une fonction d'onde de champ moyen doit donner des valeurs aussi proches que possible de l'application de l'interaction nue à la fonction d'onde exacte.

Ces interactions s'expriment en fonction d'un certain nombre de paramètres. Ceux-ci sont ajustés par rapport à des propriétés nucléaires connues, notamment par l'étude expérimentale de la structure des noyaux. Des données concernant par exemple les masses, rayons de charge, énergies de séparation..., sont utilisées comme contraintes. La qualité des paramètres obtenus est vérifiée par la prédiction d'autres propriétés de structure mesurables, telles que les moments électriques et magnétiques, l'énergie des premiers états excités et les probabilités de transition.

Les interactions effectives de type Skyrme sont des forces locales de contact dans l'espace des coordonnées. Nous allons en donner un exemple schématique, avant de présenter les différentes paramétrisations qui seront employées dans la suite de cette étude.

Exemple schématique

Il s'agit ici d'illustrer à l'aide d'une interaction simplifiée comment l'énergie d'un ensemble de nucléons prend la forme d'une fonctionnelle de la densité. Le système est ici constitué d'un fluide unique de nucléons (matière symétrique) de masse m. Considérons un hamiltonien constitué d'une partie cinétique, et d'une interaction de contact, c'est à dire locale, à deux et trois corps :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_2 + \hat{V}_3 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + t_0 \delta(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2) + t_3 \delta(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2) \delta(\hat{\mathbf{r}}_2 - \hat{\mathbf{r}}_3)$$
(3.18)

Dans le formalisme de seconde quantification, ces différents termes s'écrivent en fonction des opérateurs de création et annihilation :

$$\hat{T} = \sum_{ij} \langle i | \hat{T} | j \rangle a_i^+ a_j
\hat{V}_2 = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{V}_2 | \tilde{k}l \rangle a_i^+ a_j^+ a_l a_k
\hat{V}_3 = \frac{1}{36} \sum_{hijklm} \langle hij | \hat{V}_3 | \widetilde{klm} \rangle a_h^+ a_i^+ a_j^+ a_m a_l a_k$$
(3.19)

où les éléments de matrice sont antisymétrisés selon :

$$|\tilde{kl}\rangle = |kl\rangle - |lk\rangle |\tilde{klm}\rangle = |klm\rangle + |mkl\rangle + |lmk\rangle - |kml\rangle - |mlk\rangle - |lkm\rangle$$
(3.20)

L'opérateur a_i^+ (a_i) crée (détruit) une particule dans un état $|i\rangle$. Dans l'espace des coordonnées, les états sont développés sur la base $|\vec{r}, s\rangle$, où *s* représente les parties spin et isospin de la fonction d'onde :

$$|i\rangle = \sum_{s} \int d\vec{r} |\vec{r}, s\rangle < \vec{r}, s |i\rangle = \int d\vec{r} |\vec{r}, s_i\rangle \phi_i(\vec{r})$$
(3.21)

On obtient alors l'expression de \hat{H} en fonction de la densité hamiltonienne $\hat{h}(\vec{r})$ tel que

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{h}(\vec{r}) = \int d\vec{r} (\hat{h}_c(\vec{r}) + \hat{h}_2(\vec{r}) + \hat{h}_3(\vec{r}))$$
(3.22)

avec

$$\hat{h}_{c}(\vec{r}) = \frac{\hbar^{2}}{2m} \sum_{ij} \nabla \phi_{i}^{*}(\vec{r}) \nabla \phi_{j}(\vec{r}) a_{i}^{+} a_{j}$$

$$\hat{h}_{2}(\vec{r}) = \frac{t_{0}}{2} \sum_{ijkl} \phi_{i}^{*}(\vec{r}) \phi_{j}^{*}(\vec{r}) \phi_{k}(\vec{r}) \phi_{l}(\vec{r}) \delta_{s_{i}s_{k}} \delta_{s_{j}s_{l}} a_{i}^{+} a_{j}^{+} a_{l} a_{k}$$

$$\hat{h}_{3}(\vec{r}) = \frac{t_{3}}{6} \sum_{hijklm} \phi_{k}^{*}(\vec{r}) \phi_{i}^{*}(\vec{r}) \phi_{j}^{*}(\vec{r}) \phi_{k}(\vec{r}) \phi_{l}(\vec{r}) \phi_{m}(\vec{r})$$

$$\delta_{s_{h}s_{k}} \delta_{s_{i}s_{l}} \delta_{s_{j}s_{m}} a_{h}^{+} a_{i}^{+} a_{j}^{+} a_{m} a_{l} a_{k}$$
(3.23)

Remarquons que cet hamiltonien peut être exprimé sous une forme plus compacte, en introduisant les opérateurs $\hat{\psi}^+(\vec{r},s)$ tels que

$$\hat{\psi}^+(\vec{r},s)|0> = |\vec{r},s>$$
 (3.24)

Les opérateurs de création (annihilation) a_i^+ et $\hat{\psi}^+(\vec{r},s)$ (a_i et $\hat{\psi}(\vec{r},s)$) vérifient les relations suivantes :

$$\sum_{s} \hat{\psi}^{+}(\vec{r},s) = \sum_{i} \phi_{i}^{*}(\vec{r})a_{i}^{+} \quad ; \quad \sum_{s} \hat{\psi}(\vec{r},s) = \sum_{i} \phi_{i}(\vec{r})a_{i} \tag{3.25}$$

Ainsi, la densité hamiltonienne prend la forme :

$$\hat{h}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_s \nabla \hat{\psi}^+(\vec{r},s) \nabla \hat{\psi}(\vec{r},s)
+ \frac{t_0}{2} : \left(\sum_s \hat{\psi}^+(\vec{r},s) \hat{\psi}(\vec{r},s) \right)^2 :
+ \frac{t_3}{6} : \left(\sum_s \hat{\psi}^+(\vec{r},s) \hat{\psi}(\vec{r},s) \right)^3 :$$
(3.26)

Nous voulons maintenant obtenir l'énergie moyenne du système de nucléons. Partant des expressions (3.23), il s'agit de calculer les valeurs moyennes d'opérateurs de un à trois corps exprimés comme des produits d'opérateurs de création a^+ et d'annihilation a. Sur un état $|\phi\rangle$ correspondant à un déterminant de Slater (3.2), ces moyennes sont données en fonction des densités à un corps par (3.3). Compte tenu des contributions liées aux différents arrangements de spin-isospin, on obtient les valeurs moyennes des trois termes de la densité hamiltonienne :

$$<\Phi|\hat{h}_{c}(\vec{r})|\Phi> = \frac{\hbar^{2}}{2m}\sum_{i}|\nabla\phi_{i}(\vec{r})|^{2}n_{i}$$

$$<\Phi|\hat{h}_{2}(\vec{r})|\Phi> = \frac{3t_{0}}{8}\left[\sum_{i}|\phi_{i}(\vec{r})|^{2}n_{i}\right]^{2}$$

$$<\Phi|\hat{h}_{3}(\vec{r})|\Phi> = \frac{t_{3}}{16}\left[\sum_{i}|\phi_{i}(\vec{r})|^{2}n_{i}\right]^{3}$$
(3.27)

Ces relations font apparaître les densités locales à un corps $\rho(\vec{r})$ (densité de particules) et $\tau(\vec{r})$ (densité d'énergie cinétique), données par :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{s} \langle \vec{r}, s | \hat{\rho} | \vec{r}, s \rangle = \sum_{i} |\phi_{i}(\vec{r})|^{2} n_{i}
\tau(\vec{r}) = \sum_{s} \langle \vec{r}, s | \frac{\hat{p}\hat{\rho}\hat{p}}{\hbar^{2}} | \vec{r}, s \rangle = \sum_{i} |\nabla\phi_{i}(\vec{r})|^{2} n_{i}$$
(3.28)

Ainsi, l'énergie moyenne du système s'obtient en fonction de la densité d'énergie $\langle \hat{h}(\vec{r}) \rangle = \mathcal{H}(\vec{r})$:

$$E[\hat{\rho}] = <\Phi|\hat{H}|\Phi> = \int d\vec{r}\mathcal{H}(\vec{r})$$
(3.29)

où $\mathcal{H}(\vec{r})$ est une fonctionnelle de la densité à un corps $\hat{\rho}$:

$$\mathcal{H}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\vec{r}) + \frac{3t_0}{8} \rho^2(\vec{r}) + \frac{t_3}{16} \rho^3(\vec{r})$$
(3.30)

Dans le modèle schématique présenté ici, il suffit de fixer le point de saturation de la matière nucléaire (minimum de E/A) pour déterminer les paramètres t_0 et t_3 . Pour un gaz de fermions à température nulle, on a la relation

$$\tau(\vec{r}) = \frac{3}{5} \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3} \rho^{5/3}(\vec{r}) \tag{3.31}$$

avec pour la matière nucléaire symétrique la dégénérescence g = 4. Pour la matière homogène, on en déduit l'énergie par nucléon :

$$E/A(\rho) = \mathcal{H}/\rho = \frac{3\hbar^2}{10m} \left(\frac{3\pi^2\rho}{2}\right)^{2/3} + \frac{3t_0}{8}\rho + \frac{t_3}{16}\rho^2$$
(3.32)

Ainsi, avec le point de saturation ($\rho_0 = 0.16 fm^{-3}$, $(E/A)_0 = -16 MeV$) on obtient $t_0 = -1024 MeV.fm^3$ (potentiel attractif) et $t_3 = 14604 MeV.fm^6$ (potentiel répulsif). D'autres propriétés connues apportent cependant des contraintes supplémentaires. Par exemple, le module d'incompressibilité K_{∞} , qui est lié à la dérivée seconde au point de saturation :

$$K_{\infty} = 9\rho^2 \left(\frac{\partial^2 E/A}{\partial \rho^2}\right)_{\rho_0} \tag{3.33}$$

Avec les paramètres qui viennent d'être déterminés, on obtient $K_{\infty} = 376 MeV$, ce qui est une valeur excessive : l'incompressibilité connue est de l'ordre de 200 à 250 MeV [ColG04, Shl04].

Paramétrisations utilisées

Depuis son introduction en 1956 [Sky56, Sky59], l'interaction effective de Skyrme a fait l'objet d'abondantes études, qui sont toujours en cours d'évolution. Ces différents travaux ont pour but d'établir un ensemble de paramètres permettant la meilleure description des systèmes nucléaires, compte tenu des propriétés connues des noyaux et de la matière nucléaire.

Ils se basent le plus souvent sur l'interaction standard de la forme [Cha97] :

$$V(\hat{\mathbf{r}}_{1}, \hat{\mathbf{r}}_{2}) = t_{0}(1 + x_{0}P_{\sigma})\delta(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{t_{1}}{2}(1 + x_{1}P_{\sigma})\left[\hat{\mathbf{P}'}^{2}\delta(\hat{\mathbf{r}}) + \delta(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{P}}^{2}\right] + t_{2}(1 + x_{2}P_{\sigma})\hat{\mathbf{P}'} \cdot \delta(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{P}} + \frac{t_{3}}{6}(1 + x_{3}P_{\sigma})[\rho(\hat{\mathbf{R}})]^{\sigma}\delta(\hat{\mathbf{r}}) + iW_{0}\hat{\sigma} \cdot \left[\hat{\mathbf{P}'} \times \delta(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{P}}\right]$$
(3.34)

avec

$$\hat{r} = \hat{r}_1 - \hat{r}_2 , \quad \hat{R} = (\hat{r}_1 + \hat{r}_2)/2 , \quad \hat{\mathbf{P}} = (\hat{\nabla}_1 - \hat{\nabla}_2)/2i
\hat{\sigma} = \hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2 , \quad P_{\sigma} = (1 + \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)/2$$
(3.35)

et $\hat{\mathbf{P}'}$ est le complexe conjugué de $\hat{\mathbf{P}}$, agissant à gauche. Cette interaction conduit à la fonctionnelle de densité d'énergie :

$$\mathcal{H} = \mathcal{K} + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_{eff} + \mathcal{H}_{fin} + \mathcal{H}_{so} + \mathcal{H}_{sg}$$
(3.36)

faisant intervenir successivement les termes d'énergie cinétique (\mathcal{K}), de portée nulle (\mathcal{H}_0), dépendant de la densité (\mathcal{H}_3), de masse effective (\mathcal{H}_{eff}), de portée finie (\mathcal{H}_{fin}), de couplage spin-orbite (\mathcal{H}_{so}), et de couplage spin-gradient (\mathcal{H}_{sg}).

Remarquons ici que la dépendance en isospin du terme de masse effective est encore mal connue [Bar05]. L'étude de ce terme est un sujet d'actualité. Ce n'est que récemment qu'a été levée la contradiction qui semblait exister entre le comportement des masses effectives relativistes ou non [Van05a, Van05b]. Pour ce qui est des travaux portant sur la paramétrisation des interactions de type Skyrme, l'une des dernières améliorations visées consiste à décorréler les contraintes portant sur l'incompressibilité et la masse effective [Coc04].

Les différents termes de l'équation (3.36) s'expriment en fonction des densités de particules, d'énergie cinétique et de spin ρ_q , τ_q et \vec{J}_q (q = n, p). En notant $\rho = \rho_n + \rho_p$, $\tau = \tau_n + \tau_p$ et $\vec{J} = \vec{J}_n + \vec{J}_p$, on a :

$$\begin{aligned}
\mathcal{K} &= \frac{\hbar^2}{2m} \tau \\
\mathcal{H}_0 &= \frac{t_0}{4} [(2+x_0)\rho^2 - (2x_0+1)(\rho_n^2 + \rho_p^2)] \\
\mathcal{H}_3 &= \frac{t_3}{24} \rho^{\sigma} [(2+x_3)\rho^2 - (2x_3+1)(\rho_p^2 + \rho_n^2)] \\
\mathcal{H}_{eff} &= \frac{1}{8} [t_1(2+x_1) + t_2(2+x_2)] \tau \rho + \frac{1}{8} [t_2(2x_2+1) - t_1(2x_1+1)] (\tau_n \rho_n + \tau_p \rho_p) \\
\mathcal{H}_{fin} &= \frac{1}{32} [3t_1(2+x_1) - t_2(2+x_2)] (\nabla \rho)^2 - \frac{1}{32} [3t_1(2x_1+1) + t_2(2x_2+1)] [(\nabla \rho_n)^2 + (\nabla \rho_p)^2] \\
\mathcal{H}_{so} &= \frac{W_0}{2} [\vec{J} \cdot \nabla \rho + \vec{J_p} \cdot \nabla \rho_p + \vec{J_n} \cdot \nabla \rho_n] \\
\mathcal{H}_{sg} &= -\frac{1}{16} (t_1 x_1 + t_2 x_2) \vec{J}^2 + \frac{1}{16} (t_1 - t_2) \left[\vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2 \right]
\end{aligned}$$
(3.37)

Pour notre étude, nous considérons la matière nucléaire saturée en spin : seuls les 5 premiers termes sont utilisés. Le cinquième, \mathcal{H}_{fin} , est nul dans le cas de la matière homogène, mais il intervient pour la description de la matière infinie présentant une fluctuation de densité (cf chapître 6).

Nous allons maintenant présenter les trois interactions de Skyrme qui ont été utilisées au cours de cette thèse. La comparaison des résultats obtenus avec ces différentes interactions nous a permis essentiellement de vérifier la robustesse des caractères observés. Il s'agit, par ordre chronologique, des paramétrisations SIII (1975), SGII (1981) et Sly230a (1996).

	Sly230a	SGII	SIII	schéma
$t_0 \ (MeV.fm^3)$	-2490.23	-2645.00	-1128.75	-1024
$t_1 \ (MeV.fm^5)$	489.53	340.00	395.00	0
$t_2 \ (MeV.fm^5)$	-566.58	-41.90	-95.00	0
$t_3 \ (MeV.fm^{3+3\sigma})$	13803.0	15595.00	14000.00	14604
x_0	1.1318	0.0900	0.45	0
x_1	-0.8426	-0.0588	0	0
x_2	-1.0	1.4250	0	0
x_3	1.9219	0.06044	1	0
σ	1/6	1/6	1	1
$W_0 \ (MeV.fm^5)$	131.00	105.0	120.0	0

TAB. 3.1 – Paramètres de Skyrme pour les trois forces qui seront comparées au long de ce document, ainsi que l'exemple schématique présenté en première partie de la section 3.1.2.

L'interaction SIII a été obtenue par Beiner *et al.* [Bei75], par une réalisation systématique de la démarche initiée par Vautherin et Brink [Vau72] : celle-ci consiste à ajuster les paramètres en prenant en compte l'énergie de liaison et le rayon de noyaux doublement magiques. SIII est une des premières paramétrisations permettant de reproduire l'énergie de liaison des éléments sur l'ensemble du tableau périodique. De nouvelles connaissances concernant les propriétés nucléaires ont cependant révélé la nécessité de plusieurs améliorations. Ainsi, l'étude des résonances géantes monopolaires a apporté une meilleure connaissance du module d'incompressibilité K_{∞} [ColG04,

	Sly230a	SGII	SIII
$ ho_0 \ (fm^{-3})$	0.16	0.159	0.145
$E/A_0 (MeV)$	-15.99	-15.59	-15.85
$K_{\infty} (MeV)$	230.9	215.4	355.9
$m^* (MeV)$	0.7	0.79	0.76
$a_s (MeV)$	32.04	26.85	28.17

TAB. 3.2 – Propriétés physiques au point de saturation pour les trois paramétrisations de Skyrme utilisées.



FIG. 3.1 – Comparaison, pour les trois paramétrisations de Skyrme utilisées, de l'évolution en densité de l'énergie par nucléon (en haut) et du coefficient d'asymétrie (en bas). Le point de saturation (correspondant aux valeurs du tableau 3.2) est indiqué dans chaque cas.

Shl04], pour lequel SIII donne une valeur excessive : l'interaction SkM [Kri80] a alors été établie de façon à prendre en compte cette nouvelle contrainte. Remarquons également que SIII a été construite de façon à décrire les noyaux de la vallée de stabilité. Sa dépendance en isospin n'est pas contrainte, ce qui en fait une paramétrisation peu adaptée à la description de la matière asymétrique. Nous l'avons incorporée dans notre étude car elle est encore employée, en raison de sa simplicité, dans les modèles de transport [Bar05] : la comparaison des différents résultats donne ainsi une idée de l'impact d'un tel choix sur les comportements observés.

Les deux autres paramétrisations employées, SGII et Sly230a, donnent une description réaliste de la matière nucléaire. SGII [Ngu81b] a été établie en prenant en compte des contraintes sur l'incompressibilité, la dépendance en spin (apparaissant dans les résonances de Gamow-Teller) et les effets d'appariement. La paramétrisation Sly230a [Cha97] a quant à elle pour objectif d'améliorer la dépendance en isospin de la force de Skyrme, en vue de la description des noyaux exotiques et des étoiles à neutrons. Pour cela, elle prend en compte :

- d'une part les propriétés d'asymétrie accessibles à l'expérience : l'énergie de symétrie obtenue par la systématique des masses expérimentales, et les masses effectives isovecteur $(m_n^* m_p^*)$ déduites de la résonance dipolaire;
- d'autre part, la description théorique de la matière de neutrons, en se référant aux résultats issus des calculs microscopiques de l'équation d'état par Wiringa *et al.* [Wir88, Wir93].

Il s'agit par ailleurs de l'une des forces de Skyrme présentant un comportement réaliste du point de vue de la description des étoiles à neutrons, selon l'étude systématique élaborée par Rikovska *et al.* [Rik03].

Le tableau 3.1 donne les paramètres de Skyrme pour les trois interactions qui seront utilisées dans notre étude. Quelques-unes des propriétés physiques associées sont indiquées dans le tableau 3.2, où le coefficient d'asymétrie a_s est défini par :

$$a_s = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E/A}{\partial I^2} \right)_{I=0} \quad avec \quad I = (N-Z)/A = \rho_3/\rho \tag{3.38}$$

Le comportement des différentes paramétrisations de Skyrme pour ce qui est de l'incompressibilité et de l'énergie de symétrie est illustré par la figure 3.1.

3.2 Thermodynamique en champ moyen

Dans une approche de champ moyen, les nucléons sont décrits comme des particules indépendantes, réparties sur des états individuels. Ils peuvent alors être traités de façon analogue à un gaz de Fermi. Il est par conséquent commode d'en étudier la statistique en partant du formalisme grandcanonique, sachant que l'équivalence entre ensembles est garantie par la limite thermodynamique qui s'applique à la matière nucléaire.

3.2.1 Fonction de partition exacte

Commençons par formuler la statistique de la matière nucléaire en l'absence d'approximation. Pour simplifier les expressions, nous considérons le cas de la matière nucléaire symétrique, les nucléons étant traités comme une seule espèce de dégénérescence g = 4. L'énergie exacte d'un ensemble de nucléons en interaction doit en principe être donnée par un hamiltonien \hat{H} , qui s'exprime en seconde quantification comme une somme d'opérateurs à un et plusieurs corps. L'opérateur à un corps constitue la partie cinétique, tandis que l'interaction entre particules est décrite au minimum par un opérateur à deux corps. L'hamiltonien s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
\dot{H} &= \dot{T} + \dot{V} \\
\hat{T} &= \sum_{ij} < i |\hat{T}| j > a_i^+ a_j \\
\hat{V} &= \frac{1}{4} \sum_{ii'jj'} < ii' |\hat{V}| \tilde{jj'} > a_i^+ a_{i'}^+ a_j a_{j'}
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Le nombre de particules correspond à l'opérateur \hat{N} :

$$\hat{N} = \sum_{i} a_i^+ a_i \tag{3.40}$$

Pour un système dont on connaît les valeurs moyennes $\langle \hat{H} \rangle$ et $\langle \hat{N} \rangle$, la maximisation sous contrainte de l'entropie conduit à l'expression de la matrice densité [Bal82]

$$\hat{D} = \frac{e^{-\beta\hat{H} + \alpha\hat{N}}}{Z_{GC}} \tag{3.41}$$

où Z_{GC} est la fonction de partition grand-canonique exacte du système de nucléons en interaction, exprimée par

$$Z_{GC} = Tr\left(e^{-\beta\hat{H} + \alpha\hat{N}}\right) \tag{3.42}$$

Cette équation ne connaît cependant pas de solution exacte. La maximisation de l'entropie doit alors être recherchée par approximation, c'est à dire en définissant un sous-ensemble de matrices densité pour lesquelles il nous est possible de calculer les fonctions thermodynamiques associées. C'est ce que permet l'approche de champ moyen, que nous allons maintenant présenter.

3.2.2 Fonction de partition de champ moyen

Considérons un système de particules indépendantes plongées dans le champ \hat{W} , répondant à des contraintes $\langle \hat{W} \rangle$ et $\langle \hat{N} \rangle$ sur l'énergie et le nombre de particules. L'entropie d'un tel système $S_0 = -Tr(\hat{D}_0 \ln \hat{D}_0)$ est obtenue en maximisant la quantité $S_0 - \beta \langle \hat{W} \rangle + \alpha \langle \hat{N} \rangle$. La matrice densité D_0 est alors donnée par :

$$D_0 = \frac{e^{-\beta\hat{W} + \alpha\hat{N}}}{Z_0} \tag{3.43}$$

où Z_0 est la fonction de partition grand-canonique du système de particules indépendantes :

$$Z_0 = Tr\left(e^{-\beta\hat{W} + \alpha\hat{N}}\right) = \sum_k e^{-\beta W_k + \alpha N_k}$$
(3.44)

Dans cette expression, k représente un état microscopique global, défini par une combinaison d'occupation des états individuels $\{n_i^{(k)} = 0, 1\}$. On a alors :

$$N_k = \sum_i n_i^{(k)} \quad ; \quad W_k = \sum_i \epsilon_i n_i^{(k)} \tag{3.45}$$

On retrouve alors pour Z_0 l'expression habituelle de la fonction de partition grand-canonique pour un ensemble de fermions indépendants :

$$\ln Z_0 = \sum_i \ln \left(1 + e^{-\beta \epsilon_i + \alpha} \right) \tag{3.46}$$

qui est reliée aux contraintes $\langle \hat{W} \rangle$ et $\langle \hat{N} \rangle$ par :

L'entropie S_0 est déterminée par les occupations n_i . En utilisant les égalités :

$$\ln Z_0 = \sum_{i} \ln[1/(1-n_i)] \quad et \quad \beta \epsilon_i - \alpha = \ln[(1-n_i)/n_i]$$
(3.48)

on obtient [Vau96] :

$$S_0 = -\sum_i (1 - n_i) \ln(1 - n_i) + n_i \ln n_i$$
(3.50)

La matrice densité à un corps $\hat{\rho}_0$ du système décrit par \hat{D}_0 est diagonale sur la base des états individuels i:

$$\langle i|\hat{\rho}_0|j\rangle = n_i\delta_{ij} \tag{3.51}$$

L'équation (3.50) s'exprime alors comme :

$$S_0 = -Tr \left[(1 - \hat{\rho}) \ln(1 - \hat{\rho}) + \hat{\rho} \ln \hat{\rho} \right]$$
(3.52)

L'entropie S_0 correspond à l'approximation de champ moyen de l'entropie grand-canonique S_{GC} du système de nucléons en interaction [Bal82, Vau96] :

$$S_{0} = \ln Z_{0} + \beta < \hat{W} >_{0} - \alpha < \hat{N} >_{0}$$

$$S_{0} \simeq S_{GC} = \ln Z_{GC} + \beta < \hat{H} >_{GC} - \alpha < \hat{N} >_{GC}$$
(3.53)

Dans cette expression, on a noté d'un indice 0 les moyennes obtenues avec la matrice densité \hat{D}_0 et GC celles qui seraient obtenues avec la matrice densité grand-canonique exacte du système en interaction. L'approximation de champ moyen de la fonction de partition $\ln Z_{GC}$ est alors :

$$\ln Z_{GC} \simeq \ln Z_0 + \beta (\langle \hat{W} \rangle_0 - \langle \hat{H} \rangle_0) \tag{3.54}$$

La statistique de l'ensemble de nucléons en interaction peut ainsi être traitée en passant par la description d'un système de particules indépendantes. La fonction de partition Z_0 d'un tel système s'exprime en fonction des énergies individuelles de champ moyen, selon une forme analogue à celle d'un gaz de Fermi. Par opposition avec le cas du gaz parfait cependant, les énergies ϵ_i ne sont pas seulement cinétiques mais contiennent le potentiel de champ moyen.

3.3 Formulation des fonctions thermodynamiques

Nous allons maintenant présenter l'application de l'approche de champ moyen à une interaction effective de Skyrme, neutrons et protons étant considérés comme deux fluides distincts. Nous aboutirons à la formulation explicite des fonctions thermodynamiques de la matière nucléaire, déterminées par les densités. Les expressions ainsi obtenues sont à l'origine des résultats exposés dans les chapîtres suivants.

3.3.1 Fonctionnelle d'énergie de Skyrme

Pour une matière nucléaire homogène, saturée en spin et sans interaction coulombienne, quatre des termes de l'équation (3.36) contribuent à la densité d'énergie :

$$\mathcal{H} = \mathcal{K} + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_{eff} \tag{3.55}$$

En posant l'indice q = n, p permettant de distinguer les deux espèces de nucléons, chacun de ces termes s'exprime en fonction des densités $\rho_q(\vec{r})$ (densité de particules) et $\tau_q(\vec{r})$ (densité d'énergie cinétique). A chacune des espèces de nucléons est associée une matrice densité à un corps $\hat{\rho}_q$, sélectionnant les états d'isospin correspondant. En représentant par σ le nombre quantique de spin, ρ_q et τ_q sont alors données par :

$$\rho_q(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \langle \vec{r}, \sigma | \hat{\rho}_q | \vec{r}, \sigma \rangle$$
(3.56)

$$\tau_q(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \langle \vec{r}, \sigma | \frac{1}{\hbar^2} \hat{p} \hat{\rho}_q \hat{p} | \vec{r}, \sigma \rangle$$
(3.57)

Nous souhaiterons par la suite mettre en relief les effets d'isospin apparaissant dans le cas de la matière asymétrique ($\rho_n \neq \rho_p$). Pour cela, il nous est utile d'introduire le changement de variable suivant :

$$\rho = \rho_n + \rho_p , \qquad \tau = \tau_n + \tau_p
\rho_3 = \rho_n - \rho_p , \qquad \tau_3 = \tau_n - \tau_p$$
(3.58)

Les densités ρ et ρ_3 sont respectivement dénommées densité « isoscalaire » et « isovecteur », en référence aux directions qu'elles définissent dans le plan (ρ_n, ρ_p) : la direction isoscalaire laisse la densité d'isospin (N-Z)/V inchangée, par opposition à la direction isovecteur qui lui est orthogonale. Les quatre termes retenus s'expriment alors par :

$$\mathcal{K} = \frac{\hbar^2}{2m}\tau \tag{3.59}$$

$$\mathcal{H}_{0} = C_{0}\rho^{2} + D_{0}\rho_{3}^{2}$$
(3.60)

$$\mathcal{H}_{\sigma} = C_{0}\rho^{\sigma+2} + D_{0}\rho_{3}^{\sigma} \rho^{2}$$
(3.61)

$$\mathcal{H}_3 = C_3 \rho^{\sigma+2} + D_3 \rho^{\sigma} \rho_3^2 \tag{3.61}$$

$$\mathcal{H}_{eff} = C_{eff}\rho\tau + D_{eff}\rho_3\tau_3 \tag{3.62}$$

où les coefficients C_i et D_i , respectivement associés aux contributions symétriques et asymétriques, sont des combinaisons linéaires des paramètres de Skyrme traditionnels :

$$C_{0} = 3t_{0}/8$$

$$D_{0} = -t_{0}(2x_{0}+1)/8$$

$$C_{3} = t_{3}/16$$

$$D_{3} = -t_{3}(2x_{3}+1)/48$$

$$C_{eff} = [3t_{1}+t_{2}(4x_{2}+5)]/16$$

$$D_{eff} = [t_{2}(2x_{2}+1)-t_{1}(2x_{1}+1)]/16$$
(3.63)

La densité d'énergie \mathcal{H} et l'énergie par nucléons $E/A = \mathcal{H}/\rho$ sont représentées sur la figure 3.2 en fonction de ρ , pour différentes valeurs de la fraction protonique $Z/A = \rho_p/\rho$. Elles sont calculées avec les paramètres de l'interaction de Skyrme Sly230a.

3.3.2Potentiels de champ moyen

L'opérateur hamiltonien effectif de champ moyen \hat{W}_q pour chaque particule de type q est défini par la relation $\delta \langle \hat{H} \rangle = Tr(\hat{W}_q \delta \hat{\rho}_q)$, c'est à dire une dérivée fonctionnelle de la densité d'énergie.

Pour une interaction de type Skyrme, il se calcule à partir de la fonctionnelle \mathcal{H} :

$$\delta \langle \hat{H} \rangle = \int d\vec{r} \delta \mathcal{H}(\rho_n(\vec{r}), \rho_p(\vec{r}), \tau_n(\vec{r}), \tau_p(\vec{r}))$$
(3.64)

Une variation $\delta \hat{\rho}_q$ entraîne :

$$\delta \rho_q = \sum_{\sigma} \langle \vec{r}, \sigma | \delta \hat{\rho}_q | \vec{r}, \sigma \rangle$$
(3.65)

$$\delta \tau_q = \sum_{\sigma} \langle \vec{r}, \sigma | \hat{p} \delta \hat{\rho}_q \hat{p} | \vec{r}, \sigma \rangle / \hbar^2$$
(3.66)

soit

$$\begin{split} \delta \langle \hat{H} \rangle &= \int d\vec{r} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \rho_q} \sum_{\sigma} < \vec{r}, \sigma | \delta \hat{\rho}_q | \vec{r}, \sigma > \\ &+ \int d\vec{r} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau_q} \sum_{\sigma} < \vec{r}, \sigma | \hat{p} \delta \hat{\rho}_q \hat{p} | \vec{r}, \sigma > /\hbar^2 \\ &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \rho_q} Tr\left(\delta \hat{\rho}_q\right) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau_q} Tr\left(\frac{\hat{p} \delta \hat{\rho}_q \hat{p}}{\hbar^2}\right) \end{split}$$
(3.67)

La trace étant invariante par permutation circulaire des opérateurs, cette expression se met sous la forme :

$$\delta \langle \hat{H} \rangle = Tr \left(\left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau_q} \frac{\hat{p}^2}{\hbar^2} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \rho_q} \right] \delta \hat{\rho}_q \right)$$
(3.68)



FIG. 3.2 – Fonctionnelle Sly230a pour la matière nucléaire infinie, homogène et saturée en spin. En haut : énergie par particule. En bas : densité d'énergie. Les courbes sont tracées en fonction de la densité totale ρ pour différentes valeurs de la fraction protonique : de Z/A = 0 (matière de neutrons) à Z/A = 0.5 (matière symétrique), par pas de 0.05. Dans le cas de la matière symétrique, le point de saturation est indiqué : il s'agit du minimum de $E/A(\rho)$, correspondant à une construction tangente sur $\mathcal{H}(\rho)$.

ce qui donne l'expression du champ moyen pour les particules de type q:

$$\hat{W}_q = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau_q} \frac{\hat{p}^2}{\hbar^2} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \rho_q} = \frac{1}{2m_q^*} \hat{p}^2 + U_q \tag{3.69}$$

où $U_q = \partial_{\rho_q} \mathcal{H}$ est le potentiel de champ moyen local :

$$U_{q} = U_{0_{q}} + U_{3_{q}} + U_{eff_{q}}$$

$$= [2C_{0}\rho + (\sigma + 2)C_{3}\rho^{\sigma+1} + \sigma D_{3}\rho^{\sigma-1}\rho_{3}^{2} + C_{eff}\tau]$$

$$\pm [2D_{0}\rho_{3} + 2D_{3}\rho^{\sigma}\rho_{3} + D_{eff}\tau_{3}]$$
(3.70)

La masse effective m_q^* est quant à elle définie de façon à regrouper en un terme d'énergie cinétique la dépendance en impulsion du champ moyen :

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*} = \frac{\hbar^2}{2m} + C_{eff}\rho \pm D_{eff}\rho_3$$
(3.71)

Dans les deux expressions ci-dessus, le signe \pm distingue le cas des neutrons (+) et des protons (-).

Dans la matière nucléaire uniforme, les états propres de cet hamiltonien de champ moyen sont des ondes planes de moment $\vec{p_i}$, auxquelles sont associées un spin haut ou bas. L'énergie de chaque état individuel correspondant est donnée par :

$$\epsilon_q^i = \frac{p_i^2}{2m_q^*} + U_q \tag{3.72}$$

3.3.3 Fonctions thermodynamiques

Pour l'étude de la matière nucléaire à température finie, on se place dans l'ensemble grandcanonique. La fonction de partition du système de neutrons et protons en interaction est :

$$Z_{GC} = Tr[e^{-\beta \hat{H} + \alpha_n \hat{N}_n + \alpha_p \hat{N}_p}]$$
(3.73)

Elle est donnée par la maximisation sous contrainte de l'entropie de Shannon :

$$\ln Z_{GC} = S_{GC} - \beta (\langle \hat{H} \rangle_{GC} - \mu_n \langle \hat{N}_n \rangle_{GC} - \mu_p \langle \hat{N}_p \rangle_{GC}).$$
(3.74)

Afin d'obtenir une expression de Z_{GC} , on recherche d'abord la fonction de partition Z_0 d'un système de particules indépendantes, où chaque espèce se trouve dans le potentiel de champ moyen correspondant U_q . Cette fonction se factorise comme $Z_0 = Z_0^n Z_0^p$, avec

$$Z_0^q = Tr[e^{-\beta \tilde{W}_q + \alpha_q \tilde{N}_q}] \tag{3.75}$$

L'occupation des états individuels f_q^i est telle que $\langle \hat{N}_q \rangle = \partial_{\alpha_q} Z_0^q = \sum_i f_q^i$, soit $f_q^i = 1/[1 + exp(\beta \epsilon_q^i - \alpha)]$.

Le passage à la continuité permet d'exprimer les densités ρ_q et τ_q par des intégrales de Fermi :

$$\rho_q = 2 \int_0^\infty f_q(p) \frac{4\pi p^2}{h^3} dp$$
(3.76)

$$\tau_q = 2 \int_0^\infty \frac{p^2}{\hbar^2} f_q(p) \frac{4\pi p^2}{h^3} dp$$
 (3.77)

où le facteur 2 tient compte de la dégénéres cence de spin. En fonction du potentiel chimique μ_q tel que $\alpha_q = \beta \mu_q$, l'occupation des états s'écrit :

$$f_q(p) = \frac{1}{1 + e^{\beta(p^2/2m_q^* + U_q - \mu_q)}}$$
(3.78)

Afin de mettre ces intégrales sous une forme analogue à celle d'un gaz de Fermi, on introduit le potentiel chimique auxiliaire μ'_q tel que :

$$\mu_{q}^{'} = \mu_{q} - U_{q} \tag{3.79}$$

On a alors :

$$f_q(p) = \frac{1}{1 + e^{\beta(p^2/2m_q^* - \mu_q')}}$$
(3.80)

Les équations (3.78), (3.76) et (3.80) définissent un problème auto-cohérent, car la masse effective m_a^* dépend des densités selon l'équation (3.71). Il est résolu par la démarche suivante :

- Une paire (μ'_n, μ'_p) est fixée.
- Il lui correspond une solution unique (ρ_n, ρ_p) , obtenue par une résolution itérative de l'autocohérence entre $\rho_{n,p}$ et $m_{n,p}^*$.
- L'équation (3.77) est ensuite utilisée pour calculer $\tau_{n,p}$.

Chaque fonction de partition Z_0^q peut être exprimée en fonction de la densité d'énergie cinétique correspondante :

$$\frac{\ln Z_0^q}{V} = 2 \int_0^\infty \ln(1 + e^{-\beta(\frac{p^2}{2m_q^*} - \mu_q')}) \frac{4\pi p^2}{h^3} dp = \frac{\hbar^2}{3m_q^*} \beta \tau_q \tag{3.81}$$

On connaît alors la fonction de partition $\ln Z_0 = \ln Z_0^n + \ln Z_0^p$ du système de particules indépendantes, dont on déduit l'entropie de champ moyen :

$$S_0 = \ln Z_0 + \beta (\langle \hat{W_n} \rangle_0 + \langle \hat{W_p} \rangle_0 - \mu_n \langle \hat{N_n} \rangle_0 - \mu_p \langle \hat{N_p} \rangle_0)$$
(3.82)

où $\langle \hat{W}_q \rangle_0$ est l'énergie individuelle moyenne des particules de type q :

$$\langle \hat{W}_q \rangle_0 = 2V \sum_q \int_0^\infty f_q(p) \epsilon_q(p) \frac{4\pi p^2}{h^3} dp = -\partial_\beta \ln Z_0 \tag{3.83}$$

avec $\epsilon_q(p) = p^2/2m_q^* + U_q.$

Selon le principe variationnel, l'entropie contrainte de champ moyen est la meilleure approximation du maximum exact de l'entropie, dans la mesure où l'on travail sur un ensemble de fonctions d'onde restreint (déterminants de Slater). Elle permet d'obtenir l'expression approchée de la fonction de partition $\ln Z_{GC}$ du système de nucléons en interaction :

$$\ln Z_{GC} \simeq S_0 - \beta (\langle \hat{H} \rangle_0 - \mu_n \langle \hat{N}_n \rangle_0 - \mu_p \langle \hat{N}_p \rangle_0), \qquad (3.84)$$

où l'énergie de champ moyen et les nombres de particules sont définis en fonction des densités à un corps

$$\langle \hat{H} \rangle_0 = V \mathcal{H} \; ; \; \langle \hat{N}_q \rangle_0 = V \rho_q \tag{3.85}$$

L'on peut enfin exprimer le potentiel grand-canonique, par unité de volume, en fonction des densités à un corps :

$$-g = \frac{\ln Z_{GC}}{\beta V} \simeq \frac{2}{3}\mathcal{K} + \mathcal{H}_0 + (\sigma + 1)\mathcal{H}_3 + \frac{5}{3}\mathcal{H}_{eff}$$
(3.86)

Le potentiel $\frac{\ln Z_{GC}}{\beta V}$ est équivalent à la pression P du système, ainsi qu'il a été établi dans la partie 2.2.3. Nous avons donc maintenant un ensemble de relations selon lesquelles, pour une paire de densités (ρ_n, ρ_p) et une température fixées, les paramètres intensifs μ_n, μ_p et P sont déterminés. C'est ce qui va nous permettre d'étudier la transition de phase liquide-gaz de la matière nucléaire.

Chapitre 4

Diagramme des phases liquide-gaz de la matière nucléaire

Les nucléons interagissent par une interaction attractive à moyenne portée et répulsive à courte portée. On s'attend pour cette raison à ce que la matière nucléaire présente une transition de phase liquide-gaz analogue à celle d'un fluide de Van der Waals [Hua63]. Il est en fait connu que la matière nucléaire symétrique est soumise à une transition de phase du premier ordre, jusqu'à une température critique [Fin82, Ber83, Das05]. Il s'agit cependant d'un cas particulier : la matière symétrique est constituée d'un nombre égal de neutrons et de protons et, compte tenu de la symétrie d'isospin entre ces deux particules, se comporte comme un fluide unique. Nous nous intéressons dans ce chapître au diagramme de phase de la matière asymétrique, c'est à dire pour laquelle on prend en compte le contenu isotopique comme degré de liberté. Cela a pour effet d'ajouter une dimension à l'étude de la transition, car la description du système comporte une observable supplémentaire [Bal82, Gle01]. La densité se décompose en effet en deux observables indépendantes ρ_n et ρ_p , auxquelles sont associés les potentiels chimiques respectifs μ_n et μ_p dont dépendent les équilibres de phase.

Tout au long de ce chapître, les résultats présentés ont été obtenus pour l'interaction effective de Skyrme Sly230a [Cha97]. On peut trouver dans la littérature des études de la thermodynamique de la matière nucléaire effectuées avec d'autres types d'interactions [Bar81, Lat85, Shl05, Dou00b, Mul95].

Nous avons vu dans le chapître précédent comment le formalisme grand-canonique permet d'obtenir, pour une température fixée, l'expression des fonctions thermodynamiques de la matière nucléaire en fonction des densités de neutrons et protons. Il est ainsi possible de constater l'existence d'une anomalie de courbure de l'entropie de la matière homogène, dont la correction se traduit par une région de coexistence dans laquelle le système se décompose en deux phases [GroD01, Mul95]. Nous pouvons alors déterminer la coexistence de phases liquide-gaz obtenue pour la matière nucléaire par construction de Gibbs. Après une présentation de la réalisation pratique de cette construction, les caractéristiques du diagramme de phases seront étudiées en détail.

4.1 Construction de Gibbs

L'entropie que nous avons obtenue dans la partie 3.3.3 est le résultat d'une maximisation sur un sous-ensemble de matrices densités, qui décrivent uniquement des systèmes homogènes. Du fait de cette restriction, elle ne vérifie pas nécessairement la propriété de concavité dans tout l'espace des observables. Si l'entropie du système homogène s^h présente une région convexe, elle peut être maximisée par mélange de deux phases : l'entropie maximale correspond alors à l'enveloppe concave de s^h , donnée par la construction de Gibbs. Cette construction, détaillée dans la partie 2.2.4, relie des couples de points de l'espace des observables (c'est à dire des couples de phases) pour lesquels s^h a le même plan tangent, ce qui se traduit par les conditions d'équilibre de Gibbs (égalité des paramètres intensifs des deux phases).

4.1.1 Maximisation de l'entropie contrainte

Pour la matière nucléaire, la condition d'équilibre entre deux phases (1) et (2) s'écrit : $(\beta, \mu_n, \mu_p, P)^{(1)} = (\beta, \mu_n, \mu_p, P)^{(2)}$. La représentation de ce problème demande *a priori* quatre dimensions dans l'espace des paramètres intensifs. Cela apparaît également quand on essaie de se représenter la construction géométrique de l'enveloppe concave, qui met en jeu la valeur que prend l'entropie en chaque point de l'espace des observables à trois dimensions, $(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p)$.

Cependant, le formalisme que nous avons utilisé pour l'expression des fonctions thermodynamiques supprime naturellement une dimension de ce problème. La relation entre densités et potentiels chimiques se fait par l'intermédiaire d'intégrales de Fermi, qui sont définies pour une température (paramètre $\beta = 1/T$) fixée. Ainsi, nous n'avons pas directement accès à l'entropie dans l'espace complet des observables, $s(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p)$, mais seulement à l'entropie à température constante dans l'espace des densités, qui est une fonction que l'on peut noter $s_{\beta}(\rho_n, \rho_p)$. Il s'agit de la projection sur le plan des densités de l'entropie calculée pour les points de l'espace $(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p)$ tels que $\partial s/\partial \mathcal{H} = \beta = constante$.

Dans ce cas, l'égalité $\beta^{(1)} = \beta^{(2)}$ de l'équilibre de Gibbs est assurée par construction. Dans un ensemble isotherme, le problème de l'égalisation des paramètres intensifs se réduit donc à trois dimensions, les conditions d'équilibre devenant

$$(\mu_n, \mu_p, P)^{(1)} = (\mu_n, \mu_p, P)^{(2)}$$
(4.1)

Qu'en est-il maintenant de l'interprétation géométrique de cette égalité?

Du fait de la déformation causée par la projection, la pente suivant ρ_q (où q = n, p) de la fonction $s_\beta(\rho_n, \rho_p)$ n'est plus reliée directement au potentiel chimique associé μ_q . Prenons en effet l'exemple de la pente de s_β suivant ρ_q , la densité de l'autre espèce $\rho_{\bar{q}}$ étant constante :

$$\left(\frac{\partial s_{\beta}}{\partial \rho_{q}}\right)_{\beta,\rho_{\bar{q}}} = \left(\frac{\partial s}{\partial \rho_{q}}\right)_{\mathcal{H},\rho_{\bar{q}}} + \left(\frac{\partial s}{\partial \mathcal{H}}\right)_{\rho_{q},\rho_{\bar{q}}} \left(\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \rho_{q}}\right)_{\beta,\rho_{\bar{q}}} = -\beta\mu_{q} + \beta\left(\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \rho_{q}}\right)_{\beta,\rho_{\bar{q}}}$$
(4.2)

Par conséquent, l'équation (4.1) ne peut s'interpréter en termes d'enveloppe concave de la fonction $s_{\beta}(\rho_n, \rho_p)$.

Considérons en revanche une fonction que l'on appelle entropie contrainte s_c , obtenue à partir de s par la transformation de Legendre suivante :

$$s_c = s - \frac{\partial s}{\partial \mathcal{H}} \mathcal{H} = s - \beta \mathcal{H} = -\beta f \tag{4.3}$$

où f = F/V est l'énergie libre du système par unité de volume. L'énergie libre F correspond au potentiel thermodynamique de l'ensemble canonique.

L'utilité des transformations de Legendre, notamment en thermodynamique, est bien connue [Diu89]. Nous en rappelons ici l'essentiel. Prise dans le feuillet de l'espace tel que $\beta = constante$ et projetée sur le plan des densités, l'entropie contrainte s_c présente l'intéressante propriété d'avoir les mêmes dérivées partielles en ρ_q que l'entropie s dans l'espace complet des observables.

Il est commode de définir l'entropie contrainte comme étant une fonction de l'espace mixte ¹ (β, ρ_n, ρ_p) . Pour chaque valeur de β_0 donnée, $s_c(\beta_0, \rho_n, \rho_p)$ est donnée par la fonction $s(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p) - \beta_0 \mathcal{H}$ prise aux points où elle présente une pente nulle en \mathcal{H} , c'est à dire tels que $\partial s/\partial \mathcal{H} = \beta_0$. A température constante, les pentes de l'entropie contrainte suivant les densités correspondent aux dérivées partielles de $s_c(\beta, \rho_n, \rho_p)$:

$$\frac{\partial s_c}{\partial \rho_q}(\beta, \rho_n, \rho_p) = \frac{\partial s}{\partial \rho_q}(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p) = -\beta \mu_q \tag{4.4}$$

¹Le terme « mixte » exprime l'implication de la variable intensive β , les deux autres dimensions correspondant à des variables extensives (ρ_n et ρ_p).

Ainsi, la relation $(\beta, \mu_n, \mu_p)^{(1)} = (\beta, \mu_n, \mu_p)^{(2)}$ caractérise deux points pour lesquels l'entropie contrainte, représentée dans le plan $\beta = constante$, a des plans tangents parallèles. Pour définir l'équilibre de phase il faut encore ajouter la condition d'égalité des pressions, $P^{(1)} = P^{(2)}$. Comme on a

$$\beta P = s - \beta (\mathcal{H} - \mu_n \rho_n - \mu_p \rho_p) = s_c + \beta (\mu_n \rho_n + \mu_p \rho_p)$$
(4.5)

cette dernière condition implique que les plans tangents à s_c aux points (1) et (2) ont la même ordonnée à l'origine, donc sont finalement identiques.

La définition de l'entropie contrainte permet ainsi de retrouver la signification géométrique de l'équilibre de Gibbs, à savoir la contruction d'une enveloppe concave : réaliser cette construction en trois dimensions sur l'entropie $s(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p)$ revient à la réaliser en deux dimensions sur $s_c(\rho_n, \rho_p)$ pour différentes valeurs de β fixées. Notons que cette opération n'est rien d'autre que la convexification de l'énergie libre $f = -s_c/\beta$.

Il est maintenant possible de représenter cette construction géométrique, en se plaçant dans l'espace (ρ_n, ρ_p) pour une température donnée. Une image qualitative en est donnée par la figure 4.1.



FIG. 4.1 – Représentation qualitative de la construction de Gibbs sur l'entropie contrainte, pour un paramètre β fixé, dans le plan des densités (ρ_n, ρ_p). La surface correspondant au système homogène présente une région de convexité, qui est corrigée par la construction d'une enveloppe concave : une partie de la surface (région de coexistence) est alors transformée en surface réglée. Les droites correspondantes relient des couples de points de la surface ayant un même plan tangent (conditions d'équilibre de Gibbs).

Les résultats quantitatifs obtenus avec l'interaction effective de Skyrme Sly230a à T = 10 MeVsont représentés sur la figure 4.2. La partie gauche de la figure montre la région convexe que présente l'entropie contrainte du système homogène à cette température. La fonction représentée est en fait $s'_c = s_c + \beta \mu_{ts} \rho$, où μ_{ts} est le potentiel chimique de transition de la matière nucléaire symétrique. Le terme supplémentaire consiste seulement à ajouter une pente en ρ , de façon à rendre plus apparentes les propriétés de la courbure qui est identique pour s_c et s'_c . Les échelles de grandeurs de ce graphique rendraient néanmoins peu lisible la représentation tri-dimensionnelle



FIG. 4.2 – Entropie contrainte calculée pour la matière nucléaire en champ moyen avec une interaction effective de Skyrme (Sly230a), à T = 10 MeV, en fonction des densités de neutrons et protons. La surface représentée est $s'_c = s_c + \mu_{ts}\rho$, où le terme supplémentaire ajoute une pente permettant de mettre en valeur les propriétés de la courbure (ρ étant la densité totale et μ_{ts} le potentiel chimique de transition de la matière symétrique). A gauche : représentation en trois dimensions. A droite : projection sur le plan des densités, la surface s'_c pour le système homogène étant donnée par des lignes de niveaux. La frontière de la région de coexistence est tracée (courbe fermée en trait épais). Les lignes droites correspondent à des droites de la surface réglée, liant des couples de phases en coexistence. Les points critiques sont marqués.

de l'enveloppe concave. Dans la partie droite de la figure, s'_c est représentée en projection sur le plan (ρ_n, ρ_p) . Les lignes de niveaux rappellent la convexité de la surface avant que la construction de Gibbs ne soit effetcuée. La partie réglée de l'enveloppe concave, qui corrige cette anomalie de courbure, est représentée en surimpression. La frontière de cette région forme une courbe fermée, constituée de tous les points participant à un équilibre de phase. Les segments de droites représentés relient quelques-uns des couples de phases en coexistence (couples de points pour lesquels s_c a un même plan tangent).

La suite expose comment cette construction a été réalisée en pratique. Après avoir introduit une méthode générale pour la résolution de ce type de problème, nous l'appliquerons au cas de la matière nucléaire.

4.1.2 Construction sur un ensemble mono-extensif

La construction de Gibbs est basée sur une approche microcanonique : il s'agit de maximiser l'entropie $s(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p)$, à savoir une fonction de l'espace des observables (les variables extensives). En introduisant l'entropie contrainte, nous avons remplacé une de ces variables extensives (l'observable \mathcal{H}) par sa variable intensive associée (le paramètre de Lagrange β). Ceci peut s'interpréter comme un changement d'ensemble statistique, du microcanonique ($\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p$) au canonique (β, ρ_n, ρ_p). En réitérant le même type de transformation, portant cette fois-ci sur l'une des densités, par exemple ρ_n , on se place dans un ensemble dont les variables sont β, μ_n, ρ_p : il ne reste plus qu'une variable extensive, et en fixant les paramètres β et μ_n la construction de l'équilibre de phase se réduit à une simple construction de Maxwell. C'est ce que nous allons maintenant démontrer, en établissant cette méthode pour un cas général.

Prenons un système à N degrés de liberté macroscopiques et travaillons par unité de volume, de sorte que les variables extensives et les potentiels thermodynamiques soient des densités. Son entropie microcanonique est une fonction des N observables, $s(a_1, ..., a_N)$. Dans le cadre de la limite thermodynamique, les ensembles statistiques sont équivalents. Cela signifie que l'état de chaque degré de liberté k est aussi bien décrit par la donnée de l'observable a_k que par celle du paramètre intensif associé λ_k .

Choisissons de décrire les n premiers degrés de liberté avec les variables intensives. On se place alors dans un ensemble statistique noté « n/N » dont la fonction de partition est reliée à l'entropie par la transformée de Legendre (dans l'approximation de point selle de la limite thermodynamique) :

$$\frac{\ln Z_{n/N}}{V}(\lambda_1, ..., \lambda_n, a_{n+1}, ..., a_N) = s(a_1, ..., a_N) - \sum_{k=1}^n \lambda_k a_k$$
(4.6)

Par commodité, on supposera que l'une des n variables intensives introduites est le paramètre $\lambda_1 = \beta$, remplaçant l'observable $a_1 = \mathcal{H}$. Le potentiel thermodynamique par unité de volume de cet ensemble statistique est donné par :

$$g_{n/N}(\lambda_1, ..., \lambda_n, a_{n+1}, ..., a_N) = -\frac{\ln Z_{n/N}}{\beta V} = \frac{\sum_{k=1}^n \lambda_k a_k - s(a_1, ..., a_N)}{\beta}$$
(4.7)

Cette fonction présente deux propriétés importantes pour la construction de Gibbs.

- Les dérivées partielles de $g_{n/N}$ suivant les variables extensives restantes sont proportionnelles aux dérivées partielles correspondantes de l'entropie, donc aux variables extensives associées :

$$\frac{\partial g_{n/N}(\lambda_1, \dots, \lambda_n, a_{n+1}, \dots, a_N)}{\partial a_k} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial s}{\partial a_k} = -\frac{\lambda_k}{\beta} \quad pour \ k > n$$
(4.8)

– La pression est donnée par :

$$P = \frac{s - \sum_{k=1}^{N} \lambda_k a_k}{\beta} = -g_{n/N} - \sum_{k=n+1}^{N} \frac{\lambda_k}{\beta} a_k \tag{4.9}$$

Imaginons que l'on représente $g_{n/N}$ dans le sous-espace des variables extensives $(a_{n+1}, ..., a_N)$, pour une valeur fixée des variables intensives $(\lambda_1, ..., \lambda_n)$. Si la surface résultante présente deux points de même plan tangent, on a alors $(\lambda_1, ..., \lambda_N, P)^{(1)} = (\lambda_1, ..., \lambda_N, P)^{(2)}$: les conditions d'équilibre de Gibbs sont vérifiées. Autrement dit, la construction de l'enveloppe concave de $s(a_1, ...a_N)$ équivaut à un ensemble de constructions d'enveloppes convexes sur le potentiel thermodynamique $g_{n/N}(\lambda_1, ..., \lambda_n, a_{n+1}, ..., a_N)$ tracé dans l'espace $(a_{n+1}, ..., a_N)$ pour différentes valeurs des paramètres $(\lambda_1, ..., \lambda_n)$. Il s'agit cette fois-ci d'enveloppes convexes car les dérivées $\partial g_{n/N}/\partial a_k$ sont proportionnelles aux dérivées $\partial s/\partial a_k$, mais de signe opposé.

Dans le cas d'un ensemble où l'on n'a conservé qu'une seule variable extensive a_N (que l'on peut appeler ensemble « mono-extensif »), le potentiel thermodynamique $g_{mono}(\lambda_1, ..., \lambda_{N-1}, a_N)$ est tel que $\partial g_{mono}/\partial a_N = -\lambda_N/\beta$. L'enveloppe convexe de la courbe $g_{mono}(a_N)$ tracée pour des valeurs fixées des paramètres intensifs $(\lambda_1, ..., \lambda_{N-1})$ est donc simplement la droite qui lui est tangente en deux points. La position de ces deux points est donnée par construction de Maxwell sur la courbe $\frac{\partial g_{mono}}{\partial a_N}(a_N) = -\frac{\lambda_N}{\beta}(a_N)$ (cf partie 2.2.4). Ainsi, la méthode proposée consiste à se placer dans un ensemble mono-extensif de façon à

Ainsi, la méthode proposée consiste à se placer dans un ensemble mono-extensif de façon à décomposer la construction de l'enveloppe concave de l'entropie, qui peut mettre en jeu un nombre arbitraire de dimensions, en une série de simples constructions de Maxwell réalisées en fonction d'une seule variable extensive. Chacune de ces constructions permet d'obtenir un couple de phases en équilibre. La totalité du diagramme des phases est obtenue en fixant différentes valeurs pour les variables intensives de l'ensemble considéré.

Cette démarche est applicable dès lors que la variable extensive restante a_N fait partie des paramètres d'ordre de la transition de phase : elle prend des valeurs disctinctes pour les deux phases. Dans le cas contraire, l'équilibre de phase se ferait à $a_N = constante$: autrement dit la construction de l'enveloppe concave de $s(a_1, ..., a_N)$ se ferait dans une direction orthogonale à celle de l'observable a_N . Par conséquent, la courbe $(\lambda_N(a_N))_{\lambda \neq N} = ctes$ ne présenterait aucune anomalie de courbure donnant lieu à une construction de Maxwell. Remarquons que cette méthode

générale pourrait être particulièrement utile pour l'étude des systèmes composés d'une variété de constituants : c'est par exemple le cas de la matière d'étoile à neutrons pour les hautes densités baryoniques, auxquelles on voit apparaître différents types de baryons (hypérons) et leptons [Gle01].

4.1.3 Matière nucléaire « proton-canonique »

Revenons maintenant au cas de la matière nucléaire. Rappelons que l'entropie contrainte introduite dans la partie précédente est en fait reliée au potentiel thermodynamique de l'ensemble canonique, connu sous le nom d'énergie libre F = Vf. En notant $\ln Z_C$ la fonction de partition canonique, l'énergie libre s'exprime comme

$$\frac{F}{V} = f(\beta, \rho_n, \rho_p) = -\frac{\ln Z_C}{\beta V} = -\frac{S - \beta < \hat{H} >}{\beta V} = \mathcal{H} - Ts = -Ts_c$$
(4.10)

soit, au facteur $T = 1/\beta$ près, l'opposée de l'entropie contrainte s_c . Ainsi, pour une température donnée, la maximisation de l'entropie est équivalente à la minimisation de l'énergie libre dans l'espace (ρ_n, ρ_p) . Les points de cet espace pour lesquels f a un même plan tangent vérifient les conditions d'équilibre de Gibbs.

L'application de la méthode proposée nécessite une transformation supplémentaire afin de se placer dans un ensemble mono-extensif : il reste en effet deux variables extensives dans l'ensemble canonique, ρ_n et ρ_p , et l'une d'elles doit être remplacée par sa variable intensive associée. Choisissons par exemple de remplacer ρ_n par μ_n . L'ensemble étudié a maintenant pour variables thermodynamiques (β, μ_n, ρ_p) . Les systèmes correspondants sont pourvus d'un réservoir de neutrons, tandis que le nombre de protons y est conservé. C'est un ensemble mixte, que nous noterons par la suite « pC » pour « protons canoniques » (les neutrons étant pour leur part traité de façon grand-canonique). Le potentiel thermodynamique associé, $G_{pC} = Vg_{pC}$, est donné par la relation :

$$g_{pC}(\beta,\mu_n,\rho_p) = \mathcal{H} - \mu_n \rho_n - s(\mathcal{H},\rho_n,\rho_p)/\beta$$

= $-Ts_c - \mu_n \rho_n$ (4.11)

qui est telle que

$$\frac{\partial g_{pC}(\beta,\mu_n,\rho_p)}{\partial \rho_p} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial s(\mathcal{H},\rho_n,\rho_p)}{\partial \rho_p} = \mu_p \tag{4.12}$$

Ainsi, une construction de Maxwell sur la courbe $\mu_p(\rho_p)$ tracée à β et μ_n constants permet de déterminer deux points vérifiant les conditions de Gibbs pour un équilibre de phase dans la matière nucléaire, à savoir $(\beta, \mu_n, \mu_p, P)^{(1)} = (\beta, \mu_n, \mu_p, P)^{(2)}$. Un résultat identique serait obtenu en suivant la démarche symétrique consistant à travailler sur $\mu_n(\rho_n)$ dans l'ensemble neutroncanonique pour β et μ_p fixés.

Remarquons qu'il existe une deuxième façon de réaliser la construction de Maxwell permettant d'obtenir $(\mu_p, P)^{(1)} = (\mu_p, P)^{(2)}$ pour β et μ_n fixés. Elle consiste à décrire le système par unité de particule (ici par unité de proton), auquel cas le potentiel thermodynamique s'exprime par $g_Z(\frac{1}{\rho_n}) = \frac{G_{pC}}{Z}$.

Le changement de variable $\rho_p \to \rho_p^{-1}$ est nécessaire pour obtenir l'équilibre par construction des aires égales dans cette description. Il assure en effet que le potentiel d'un système composé de deux phases s'obtient toujours par interpolation linéaire entre les deux points associés. Afin d'expliciter cette propriété, considérons la réunion de deux systèmes dont le volume et le nombre de protons sont respectivement (V_1, Z_1) et (V_2, Z_2) , de façon à former le système (V, Z) avec :

$$V_{1} = \alpha V \quad ; \quad V_{2} = (1 - \alpha) V Z_{1} = \alpha' Z \quad ; \quad Z_{2} = (1 - \alpha') Z$$
(4.13)

La densité de protons globale $\rho_p = Z/V$ est reliée aux densités partielles $\rho_p^{(i)} = Z_i/V_i$ (i = 1, 2) selon :

$$\rho_p = \alpha \rho_p^{(1)} + (1 - \alpha) \rho_p^{(2)}
\frac{1}{\rho_p} = \alpha' \frac{1}{\rho_p^{(1)}} + (1 - \alpha') \frac{1}{\rho_p^{(2)}}$$
(4.14)

Lorsque l'on travaille par unité de volume, le potentiel thermodynamique $g_V(\rho_p) = \frac{G_{pC}}{V}$ est donné par une interpolation linéaire en ρ_p :

$$Vg_V(\rho_p) = V_1g_V(\rho_p^{(1)}) + V_2g_V(\rho_p^{(2)})$$

soit $\frac{G_{pC}}{V} \left(\alpha \rho_p^{(1)} + (1-\alpha)\rho_p^{(2)} \right) = \alpha \frac{G_{pC}}{V} (\rho_p^{(1)}) + (1-\alpha) \frac{G_{pC}}{V} (\rho_p^{(2)})$ (4.15)

Par unité de particule en revanche, le potentiel thermodynamique s'obtient par une interpolation linéaire en $1/\rho_p$:

$$Zg_{Z}(\frac{1}{\rho_{p}}) = Z_{1}g_{Z}(\frac{1}{\rho_{p}^{(1)}}) + Z_{2}g_{Z}(\frac{1}{\rho_{p}^{(2)}})$$

soit $\frac{G_{pC}}{Z}\left(\frac{\alpha'}{\rho_{p}^{(1)}} + \frac{1-\alpha'}{\rho_{p}^{(2)}}\right) = \alpha'\frac{G_{pC}}{Z}(\frac{1}{\rho_{p}^{(1)}}) + (1-\alpha')\frac{G_{pC}}{Z}(\frac{1}{\rho_{p}^{(2)}})$

$$(4.16)$$

Ainsi, dans chacun de ces deux cas, la construction des aires égales sur la variable μ_p suppose qu'elle soit tracée en fonction de l'observable appropriée (ρ_p ou $1/\rho_p$).

Reprenons le cas de la description par unité de proton. Les paramètres intensifs P et μ_p s'expriment respectivement comme la dérivée et l'ordonnée à l'origine de la tangente du potentiel $\frac{G_{pC}}{Z}(\frac{1}{\rho_p})$:

$$\frac{\partial}{\partial \rho_p^{-1}} \frac{G_{pC}}{Z}(\rho_p^{-1}) = \frac{\partial}{\partial \rho_p^{-1}} \left(\rho_p^{-1} \frac{G_{pC}}{V}(\rho_p) \right) = \frac{G_{pC}}{V}(\rho_p) - \mu_p \rho_p = -P \tag{4.17}$$

$$\frac{G_{pC}}{Z}(\rho_p^{-1}) + P\rho_p^{-1} = \frac{G_{pC}/V + P}{\rho_p} = \mu_p$$
(4.18)

par conséquent la condition $(\mu_p, P)^{(1)} = (\mu_p, P)^{(2)}$ s'obtient par construction de Maxwell sur la courbe $P(\rho_p^{-1})$, qui est l'analogue de la construction que l'on a l'habitude de voir effectuer sur P(V).

La figure 4.3 illustre les deux constructions de Maxwell possibles qui viennent d'être évoquées.

4.1.4 Résolution numérique

Nous venons de voir comment le repérage d'un couple de phases en coexistence peut se rapporter à une construction de Maxwell sur la courbe $\mu_p(\rho_p)$, tracée pour une valeur constante des paramètres β et μ_n . Sachant que cette construction consiste à repérer deux points tels que $(\mu_p, P)^{(1)} = (\mu_p, P)^{(2)}$, sa résolution numérique est simple : il suffit de tracer μ_p en fonction de P et de repérer un point de croisement entre deux branches, qui définit les valeurs au point de transition $\mu_p^t(\beta, \mu_n)$ et $P^t(\beta, \mu_n)$.

La majeure partie du travail numérique consiste à déterminer, pour une température donnée, un chemin du plan (ρ_n, ρ_p) tel que le potentiel chimique des neutrons μ_n est constant. En effet, si le formalisme de Fermi-Dirac utilisé pour exprimer les fonctions thermodynamiques nous place de fait dans un ensemble isotherme, les potentiels chimiques sont quant à eux obtenus en fonction des densités : pour β donné, on obtient $\mu_q(\rho_n, \rho_p)$. La figure 4.4 donne une représentation de μ_n en lignes de niveaux sur le plan des densités, pour T = 10 MeV : chaque ligne de niveau donne ainsi un chemin à μ_n constant, dit « iso- μ_n », qui correspond à une relation $\rho_p(\rho_n)$

La pression P est également connue en fonction des densités. Le long d'un chemin iso- μ_n on obtient ainsi les courbes $P(\rho_p)$ et $\mu_p(\rho_p)$, et l'on peut tracer μ_p en fonction de P comme un graphe paramétrisé par ρ_p . Si ce graphe présente un point de croisement, c'est qu'il existe deux points de densités différentes pour lesquels toutes les variables intensives sont égales (conditions d'équilibre de Gibbs) : le croisement repère une coexistence de phase.

Remarquons que l'emploi de cette méthode ne nécessite pas d'interprétation en termes de construction de Maxwell sur un ensemble mono-extensif. La construction de Gibbs est assurée par la seule égalisation des variables intensives, autrement dit il suffit d'avoir un croisement du graphe $P - \mu_p$ tracé pour un chemin iso- μ_n . Cependant, l'interprétation que nous proposons permet non



FIG. 4.3 – Illustration de la construction de Maxwell-Gibbs dans l'ensemble proton-canonique et neutron-grand-canonique. La température est fixée à T = 10 MeV et le potentiel chimique des neutrons à $\mu_n = -30 MeV$. Le bas de la figure représente le potentiel thermodynamique par unité de volume G_{pC}/V en fonction de la densité de protons ρ_p . La ligne droite constitue l'enveloppe convexe interpolant entre les deux phase A et B. Cela correspond à la construction de Maxwell sur $\mu_p(\rho_p)$, représentée au centre à gauche. La figure en haut à droite montre l'enveloppe convexe du potentiel thermodynamique par proton G_{pC}/Z en fonction du volume occupé par proton (densité inverse $1/\rho_p$). Cette construction est associée à une construction de Maxwell sur la pression en fonction de $1/\rho_p$, représentée en haut au centre. Chacune des deux constructions de Maxwell se traduit par un point de croisement dans le diagramme $P - \mu_p$ (figure centrale).



FIG. 4.4 – Représentation de différents chemins iso- μ_n (avant construction de Gibbs) dans le plan (ρ_n, ρ_p) à T = 10 MeV. Ils correspondent à des courbes de niveaux de la surface $\mu_n(\rho_n, \rho_p)$ obtenue pour cette température. D'un chemin à l'autre, les différentes valeurs de μ_n sont espacées d'un pas de 10 MeV. Comme repère, la valeur de μ_n est indiquée (en MeV) sur quelques-unes des courbes. Le long de chacun de ces chemins, un équilibre de phase s'obtient par construction de Maxwell sur la fonction $\mu_p(\rho_p)$, ce qui fixe la position du liquide et du gaz correspondants dans le plan (ρ_n, ρ_p) .

seulement de donner un sens physique à un tel chemin, mais aussi de mieux controler les resultats obtenus.

On peut ainsi prévoir l'allure du graphe $P - \mu_p$, assurant par exemple que des cas pathologiques tels que des croisements multiples ne pourraient être dus qu'à une erreur de numérique. En effet, un croisement n'a lieu que si le potentiel $g_{pC}(\rho_p)$ présente une anomalie de courbure, auquel cas il correspond aux deux seuls points pour lesquels g_{pC} a une tangente commune. L'anomalie de coubure de g_{pC} se traduit pour P et μ_p par une inversion de pente (« back-bending ») sur le même intervalle de ρ_p . Le graphe $P(\mu_p)$ présente alors trois branches : deux d'entre elles se croisent, la troisième correspondant à la région d'inversion de pente. Dans le cas où g_{pC} est toujours convexe, P et μ_p sont deux fonctions monotones de ρ_p et le graphe $P(\mu_p)$ n'a qu'une branche.

Par ailleurs, l'ensemble proton-canonique fournit une méthode alternative pour le calcul de la pression, par rapport à celle qui est fournie par l'équation (3.86) à laquelle nous avons abouti dans le chapître 3. En effet, en longeant un chemin à μ_n constant, nous avons la relation :

$$P = -g_{pC} + \mu_p \rho_p \tag{4.19}$$

et le potentiel proton-canonique peut s'obtenir par intégration de $\mu_p(\rho_p)$

$$g_{pC}(\rho_p) = g_{pC}(\rho_p^0) + \int_{\rho_p^0}^{\rho_p} \mu_p(r_p) dr_p$$
(4.20)

ce qui permet d'obtenir la pression à partir de sa valeur en un point $(P(\rho_0))$ et du potentiel chimique des protons $\mu_p(\rho_p)$. Nous avons ainsi deux méthodes numériques pour obtenir P, donc le point de croisement du graphe $P - \mu_p$. Celle que nous venons d'exposer n'est rien d'autre que la construction de Maxwell effectuée sur la fonction $\mu_p(\rho_p)$ le long d'un chemin iso- μ_n . Ces deux méthodes nous ont permis d'avoir une évalutation de l'erreur numérique, qui est liée essentiellement au calcul des intégrales de Fermi et à la détermination du chemin iso- μ_n . Pour toutes les températures, les résultats obtenus avec les deux méthodes sont en accord étroit, avec des écarts de moins de 0.2%.

Le diagramme des phases complet s'obtient en appliquant la méthode du point de croisement de $P - \mu_p$ pour différentes valeurs de β et μ_n fixées. Dans l'espace des variables extensives, la distance entre les deux phases varie selon les différents équilibres. Chaque point où cette distance s'annule est un point critique du diagramme des phases. Il correspond à la frontière entre les cas où $g_{pC}(\rho_p)$ présente une anomalie de courbure donnant lieu à un croisement de $P - \mu_p$, et celui où ce potentiel est toujours convexe. Un point critique est donc situé sur un chemin iso- μ_n tel que la courbure de g_pC présente un minimum de valeur nulle.

Pour une température donnée, les chemins iso- μ_n donnant lieu à un équilibre de phase sont compris dans un intervalle borné de valeurs de μ_n . C'est ce qu'illustre la figure 4.5.

Les bornes de cet intervalle correspondent à deux valeurs critiques de μ_n . Elles peuvent être déterminées avec précision en repérant le point d'annulation de la courbe $\left(\frac{d^2g_{pC}}{d\rho_p^2}\right)_{min}(\mu_n)$, représentant en fonction de μ_n le minimum de la courbure de g_{pC} obtenue le long du chemin iso- μ_n correspondant. Aux alentours de la valeur critique de μ_n , cette courbe présente une allure linéaire : elle prend des valeurs positives tant que g_pC ne présente aucune anomalie de courbure, devient négative à l'apparition d'une concavité. Le passage par zéro est ainsi aisément repéré. Dans le plan des densités, le point critique lui-même est situé sur le chemin iso- μ_n critique, au point de courbure minimale (nulle) de $g_{pC}(\rho_p)$.

Pour une valeur critique de la température, l'intervalle de μ_n donnant lieu à des équilibres de phases disparaît. On sait par ailleurs que ce point critique ultime (dont la température sera noté T_u) concerne la matière nucléaire symétrique, l'instabilité se réduisant avec l'asymétrie neutronsprotons. On peut ainsi le repérer plus simplement en décrivant le système comme étant constitué d'un seul fluide de densité ρ et de potentiel chimique μ . Pour chaque valeur de β donnée, l'équilibre de phase de la matière symétrique est donné par construction de Maxwell sur $\mu(\rho)$, qui correspond à une construction tangente sur $f(\rho)$ (énergie libre). Le point critique ultime est donc repéré par l'annulation de la courbe $\left(\frac{d^2 f}{d\rho^2}\right)_{min}(\beta)$, représentant la courbure minimale de l'énergie libre (de la matière symétrique) pour différentes valeurs de β au voisinage de la valeur critique.



FIG. 4.5 – Repérage des équilibres de phase pour différents chemins iso- μ_n correspondant à des valeurs de μ_n régulièrement espacées de -80 à 10MeV (par pas de 10MeV), à une température T = 10MeV. Parmi les chemins représentés, on obtient un équilibre de phase pour les valeurs de μ_n allant de -60 à 0MeV, qui sont comprises dans l'intervalle de coexistence. Au delà de cet intervalle (chemins à $\mu_n = -80,-70$ et 10MeV) les courbes obtenues ne donnent lieu à aucune construction. A gauche : diagramme $P - \mu_p$ paramétrisé par la densité le long de chaque chemin pour un système homogène. A droite : constructions de Maxwell correspondantes sur les courbes $\mu_p(\rho_p)$.

4.2 Caractéristiques de la coexistence de phase

Maintenant que la mise en pratique de la construction de Gibbs a été détaillée, nous allons nous attacher à décrire et commenter le diagramme de coexistence de phase qu'elle nous a permis d'obtenir.

4.2.1 Dépendance en isospin du diagramme de phase isotherme

Fixons pour commencer une température sub-critique $T < T_u$, c'est à dire telle que l'énergie libre $f(\beta, \rho_n, \rho_p)$ présente une région concave. Le diagramme de coexistence de phase isotherme dans le plan (ρ_n, ρ_p) est donné par la construction de l'enveloppe convexe de f, qui était déjà illustrée par les figures 4.1 et 4.2. Le contour sur lequel s'appuie l'enveloppe convexe définit une courbe dans le plan des densités, qui est la frontière de la région de coexistence. Son allure reflète l'invariance par échange neutron-proton qui caractérise l'interaction nucléaire : on obtient ainsi une courbe symétrique par rapport à l'axe $\rho_n = \rho_p$ (axe de la matière symétrique). Cette courbe est formée de deux branches, qui sont l'ensemble des couples de phases en coexistence. Les deux branches forment une courbe fermée car elles se rejoignent en deux points critiques, de part et d'autre de l'axe de la matière symétrique. Considérant la densité totale, qui se lit suivant la diagonale du plan (ρ_n, ρ_p) , on voit que l'une des branches se situe du côté des hautes densités, l'autre du côté des basses densités : elles sont respectivement associées aux phases « liquide » et « gaz ». Pour chaque équilibre, les deux phases se distinguent essentiellement par leur densité totale : c'est pourquoi l'on peut employer le terme de transition liquide-gaz. Autrement dit, la transition de phase de la matière nucléaire est dominée par sa composante isoscalaire $\rho = \rho_n + \rho_p$ [MarJ03, Bar05].

Afin d'étudier plus en détail les caractéristiques de ce diagramme des phases, reportons-nous maintenant à la figure 4.6, qui montre pour T = 10 MeV le diagramme de coexistence ainsi que quelques-uns des chemins iso- μ_n . Deux représentations en sont données : l'une dans le plan (ρ_n, ρ_p) , et l'autre dans le plan $(Z/A, \rho)$, par un changement de variable permettant de mettre en relief la dépendance en asymétrie. Le changement de variable qui permet d'exprimer $Z/A = \rho_p/\rho$ n'étant pas linéaire, la construction de Gibbs n'aurait pu être effectuée directement dans le plan $(Z/A, \rho)$. Cela apparaît dans l'allure des chemins iso- μ_n obtenus après construction de l'enveloppe convexe. Dans le plan (ρ_n, ρ_p) , ces chemins sont des droites entre deux points à l'équilibre. En effet, entre ces deux points, l'énergie libre reconstruite correspond à une des droites de la surface réglée, le long de laquelle elle présente (par construction) des pentes constantes. En d'autres termes, chaque segment de droite joignant deux points en coexistence correspond à un chemin à μ_n et μ_p constants. Par contre, la variable Z/A n'est pas une observable-densité, et ne permet donc pas le raisonnement en termes d'interpolation linéaire qui est à l'origine de la construction de Gibbs (cf équation (4.15) et chapître 2). Par conséquent, l'énergie libre reconstruite ne présente pas de surface réglée lorqu'elle est représentée dans le plan $(Z/A, \rho)$: ce qui se traduit par l'allure des chemins iso- μ_n . L'on peut toutefois noter l'exception de la matière symétrique pour laquelle Z/A n'est pas un degré de liberté mais une constante $((Z/A)_{sym} = 0.5)$, ce qui supprime la source de non-linéarité.

La représentation de la coexistence de phase en $(Z/A, \rho)$ met en évidence le domaine d'asymétrie pour lequel (à cette température) la matière nucléaire peut présenter une coexistence de phase. On voit dans le cas présent que ce domaine recouvre une grande plage des valeurs de Z/A. Il existe cependant une valeur limite d'asymétrie au-delà de laquelle on ne rencontre plus de transition de phase. On pouvait s'attendre à un tel résultat dans la mesure où la matière de neutrons (Z/A = 0)est connue pour ne pas présenter de point de saturation (passage par un minimum de l'énergie de liaison par particule en fonction de la densité). En l'absence de saturation, il n'existe pas de phase liée (liquide). La transition liquide-gaz doit donc disparaître à partir d'une certaine valeur de l'asymétrie. L'interaction de Skyrme utilisée pour cette étude (à savoir la paramétrisation Sly230a) est une interaction réaliste, qui a été fittée sur la matière de neutrons : son comportement rend donc compte de la propriété de non-saturation de la matière très asymétrique [Cha97, Dou00b].

Remarquons enfin que les points critiques ne correspondent pas aux points d'asymétrie maximale, bien qu'ils se situent à des valeurs de Z/A proches des valeurs extrêmales atteintes par la



FIG. 4.6 – Diagramme de coexistence isotherme (T = 10 MeV) dans le plan des observables. A gauche : plan des densités neutrons-protons. A droite : représentation en asymétrie et densité totale, par le changement de variables $Z/A = \rho_p/(\rho_n + \rho_p)$, $\rho = \rho_n + \rho_p$. Les courbes fermées forment la frontière de la région de coexistence. Les lignes pleines sont des chemins iso- μ_n tracés pour des valeurs de μ_n comprises entre -75 et 10 MeV, régulièrement espacées d'un pas de 5 MeV. Les points points critiques sont marqués. Les points notés A, A', B, B' se réfèrent au chemin Z/A = 0.3 : les chemin AA' et B'B correspondent respectivement à l'évolution du gaz et du liquide lorsqu'un système de composition globale Z/A = 0.3 traverse la région de coexistence.

courbe de coexistence. Les points d'asymétrie maximale se trouvent sur la branche gaz de la coexistence. Ceci est lié au phénomène de distillation de l'isospin, qui est une caractéristique importante de la transition liquide-gaz de la matière nucléaire asymétrique [Mul95, Bar98, Li98]. Nous allons maintenant observer cette propriété plus en détail.

Considérons les couples de phases en équilibre. Chacun correspond aux deux intersections d'une ligne iso- μ_n avec la courbe de coexistence. La représentation en $(Z/A, \rho)$ fait clairement apparaître que deux phases en coexistence n'ont pas la même valeur de Z/A, autrement dit elles n'ont pas le même contenu en isospin. Un système global de fraction isotopique Z/A se sépare en deux phases de fractions isotopiques différentes, $(Z/A)_L$ et $(Z/A)_G$. On voit d'après l'allure des lignes iso- μ_n que, dans le cas d'un système riche en neutrons, ces différentes valeurs vérifient la relation $(Z/A)_L < Z/A < (Z/A)_G < 0.5$. Cette relation est inversée dans le cas d'un système riche en protons. De façon générale, on peut dire que le liquide formé est plus symétrique que le système global, et le gaz plus asymétrique. Un tel phénomène a été observé dans le cadre de l'étude de la multifragmentation, où l'on parle de distillation des neutrons (c'est à dire que le gaz formé est plus riche en neutrons que le système global, qui est lui-même tel que Z/A < 0.5). Comme il a été remarqué plus haut, le cas de la matière symétrique fait exception : elle se comporte comme un fluide unique, avec une valeur constante de la fraction isotopique Z/A = 0.5.

La figure 4.7 donne une représentation du diagramme de phase dans le plan des potentiels chimiques (μ_n, μ_p) , obtenu en traçant les différentes valeurs de transitions μ_p^t obtenues en faisant varier μ_n , toujours pour une température fixée. Ce diagramme forme une ligne de coexistence symétrique par rapport à l'axe $\mu_n = \mu_p$. Elle se termine de part et d'autre de cet axe par les deux points critiques $(\mu_n^>(T), \mu_p^<(T))$ et $(\mu_n^>(T), \mu_p^<(T))$, qui par symétrie sont tels que $\mu_n^< = \mu_p^<$ et $\mu_n^> = \mu_p^>$.

Jusqu'à maintenant, nous avons présenté l'étude du diagramme des phases pour une température finie fixée. Nous voulons dans les parties suivantes considérer l'effet de la température sur ce diagramme en explorant tout le domaine concerné par la transition de phase, de la température nulle à la température du point critique ultime T_u .



FIG. 4.7 – Ligne de coexistence, correspondant par définition à une ligne de coexistence du premier ordre, dans le plan des potentiels chimiques pour T = 10 MeV. Le chemin Z/A = 0.3 est indiqué.

4.2.2 Singularité à température nulle

La spécificité de la température nulle est la possibilité d'atteindre une densité de particules nulle avec un potentiel chimique de valeur finie [Pet95a]. Considérons en effet la distribution de Fermi-Dirac à température finie : $n(p) = 1/(1 + exp[\beta(\epsilon(p) - \mu)])$, où $\epsilon(p)$ est l'énergie individuelle d'une particule d'impulsion p. La densité de particules $\rho = \int n(p)dp$ ne peut s'annuler : on a seulement $\rho \to 0$ à la limite $\mu \to -\infty$. Pour une température nulle en revanche, la distribution de Fermi-Dirac est une fonction de Heavyside, ne prenant que deux valeurs : 1 pour $\epsilon(p) \le \mu$ et 0 pour $\epsilon(p) > \mu$: ainsi la densité s'annule quand le potentiel chimique est égal à $\epsilon(0)$.

Voyons cela plus en détail. Pour la matière nucléaire, nous avons les potentiels chimiques effectifs $\mu'_q = \mu_q - U_q(\rho_q, \rho_{\bar{q}})$, tels que

$$\rho_q = \int_0^\infty \frac{8\pi p^2 dp}{h^3} \frac{1}{1 + exp[\beta(\frac{p^2}{2m_q^*} - \mu_q')]}$$
(4.21)

Pour une température finie, on voit que $\rho_q \to 0$ pour $\mu'_q \to -\infty$, ce qui entraı̂ne $\mu_q \to -\infty$. A température nulle en revanche, l'expression de la densité devient

$$\rho_q = \int_0^{p_{F_q}} \frac{8\pi p^2 dp}{h^3} \tag{4.22}$$

où le moment de Fermi p_{F_q} des particules q est lié à leur potentiel chimique effectif par $\mu'_q = \frac{p^2}{2m_q^*}$. La densité ρ_q s'annule pour $p_{F_q} = 0$, ce qui correspond à $\mu'_q = 0$. Le potentiel chimique est alors donné par le potentiel de champ moyen, qui prend une valeur finie $\mu_q = U_q(\rho_q = 0, \rho_{\bar{q}})$.

Cette particularité de la température nulle entraîne une modification de la construction de l'enveloppe convexe de l'énergie libre, et des conditions d'équilibre de Gibbs correspondantes. Dans le cas de la température finie, le fait d'avoir $\mu_q \to -\infty$ pour $\rho_q \to 0$ implique une pente infinie de l'énergie libre à l'approche des bords du plan ρ_n, ρ_p . Ceci garantit que les effets de bords n'entrent pas en compte dans la construction. L'enveloppe convexe est alors bien définie par un ensemble de droites qui ont la propriété d'être tangentes en deux points à la surface de l'énergie libre : c'est ce que l'on peut appeler une construction « bi-tangente ». A température nulle en revanche, l'énergie libre (qui est alors l'énergie de l'état fondamental) présente des pentes de valeurs finies sur les bords $\rho_q = 0$. Par conséquent, son enveloppe convexe peut dans certains cas être limitée par le bord du plan. La construction de cette enveloppe consiste en effet à déterminer les couples de points donnant les valeurs minimales de l'énergie par interpolation linéaire : les effets de bords ont pour conséquence que ces conditions ne sont plus nécessairement remplies par des points de même plan tangent.

Prenons pour illustration le cas simple (à une dimension) de la matière symétrique, représenté sur la figure 4.8. L'énergie libre par unité de volume F/V est représentée en fonction de la densité, à droite pour une température finie, et à gauche pour T = 0 (auquel cas la densité d'énergie libre F/V correspond à la densité d'énergie E/V). Dans les deux cas, la fonction présente une concavité, corrigée par une interpolation linéaire. Pour la température finie, la droite construite est tangente à la courbe en deux points (construction bitangente). Pour la température nulle, la droite construite s'appuie sur le bord et n'est tangente à la courbe que pour le point à haute densité : c'est ce que l'on peut appeler une construction mono-tangente, par contraste avec le cas de la température finie. Dans le cas de la matière symétrique, la phase liquide est en équilibre avec le vide. Pour la matière asymétrique, un équilibre mono-tangent peut impliquer un gaz vide ($\rho_n = \rho_p = 0$) ou un gaz pur de densité finie (seule une des densités ρ_q s'annule) : c'est ce que nous allons voir en détaillant les différents équilibres de phases obtenus dans le plan des densités à T = 0.

Le diagramme de coexistence pour T = 0 est représenté sur la figure 4.9. Il se distingue par l'apparition de trois types d'équilibres différents, se traduisant par différentes conditions sur les potentiels chimiques : les régions correspondantes ont été notées 0, 1 et 2, en référence au nombre de fluides constituant la phase gaz (la phase liquide ayant toujours des densités de neutrons et



FIG. 4.8 – Spécificité de la construction de l'équilibre à T = 0: illustration de la construction mono-tangente dans le cas unidimensionnel de la matière symétrique. En haut : énergie libre par unité de volume F/V en fonction de la densité ρ . A gauche : T = 0 (où F/V = E/V). A droite : température finie T = 10 MeV. Dans les deux cas, l'interpolation linéaire corrigeant la concavité est tracée. La droite correspondante est deux fois tangente à la courbe pour T non nulle (construction bi-tangente), et une seule fois pour T = 0 (construction mono-tangente). En bas : pour la température nulle, énergie par particule E/A en fonction de la densité. Dans le cas d'un équilibre avec le vide (qui ne se produit qu'à T = 0), la densité du liquide est également donnée par le minimum de E/A (point de saturation). Pour la matière asymétrique, cela se produit si Z/A se trouve dans un intervalle donné (voir texte).

protons non-nulles). La zone 0 regroupe les équilibres avec le vide, qui se situent aux alentours de l'axe $\rho_p = \rho_n$. Le diagramme étant symétrique par rapport à cet axe, les deux autres régions, 1 et 2, sont dédoublées de part et d'autre de la zone 0. La zone 1 concerne les équilibres pour lesquels le gaz se situe sur un des bords $\rho_q = 0$: on a alors un gaz pur en équilibre avec un liquide à deux fluides. La zone 2, qui est très réduite, est constituée des équilibres pour lesquels le gaz comme le liquide sont à deux fluides. Dans ce cas, les effets de bords n'interviennent pas dans la détermination de l'équilibre, qui se fait par construction bi-tangente comme dans le cas de la température finie. On retrouve alors les conditions d'équilibre de Gibbs habituelles, soit, pour un gaz G en équilibre avec un liquide L, $(\beta, \mu_q, \mu_{\bar{q}}, P)^G = (\beta, \mu_q, \mu_{\bar{q}}, P)^L$. La zone 2 est limitée par deux frontières. L'une correspond à un point critique, au-delà duquel l'anomalie de courbure disparaît, ce qui marque la fin de la région de coexistence. L'autre frontière est le cas limite où la phase gazeuse devient un fluide pur. On entre alors dans la zone 1, pour laquelle les conditions d'équilibre sont modifiées par les effets de bord : elles sont désormais reliées à des constructions mono-tangentes.

Faisons ici une remarque concernant la physique des étoiles à neutrons, sur laquelle nous reviendrons plus en détail dans le chapître 7. La formation de ces étoiles est suivie d'une phase de refroidissement au cours de laquelle leur température devient rapidement très basse, c'est pourquoi elles sont souvent étudiées à température nulle. La coexistence de phase liquide-gaz y est alors décrite comme un équilibre entre des noyaux riches en neutrons et un gaz pur de neutrons [Pet95a]. Il s'agit d'une simplification. On voit en effet sur le diagramme de phase à T = 0 (figure 4.9) que la zone d'équilibres de type 1 est largement dominante par rapport à la zone 2, donnant le plus souvent pour les systèmes riches en neutrons une phase gaz appartenant au bord $\rho_p = 0$. Cependant, un tel cas n'arrive jamais à température finie (même infinitésimale), où le gaz comporte toujours une fraction protonique non nulle.

Revenons maintenant à la construction de l'équilibre de phase, afin d'ajouter une précision concernant l'emploi de la construction mono-tangente dans le plan (ρ_n, ρ_p) . Considérons un équilibre repéré par les points G et L, où le point G appartient au bord $\rho_q = 0$ pour une valeur finie de $\rho_{\bar{q}}$ (c'est à dire à l'intérieur de la zone 1). Dans ce cas, le plan tangent à la surface d'énergie en L y est tangent en G dans la direction $\rho_{\bar{q}}$, mais pas dans la direction ρ_q . Autrement dit, seule la pente perpendiculaire au bord peut s'écarter du plan mono-tangent. Cela se traduit par des conditions de Gibbs modifiées : l'égalité $\mu_q^G = \mu_q^L$ n'est plus imposée. Ainsi, l'équilibre entre un gaz de neutrons et un liquide à deux fluides donne lieu à une discontinuité du potentiel chimique des protons.

Sachant que G appartient au bord $\rho_q = 0$, les conditions d'équilibre deviennent donc $(\beta, \mu_{\bar{q}}, P)^G = (\beta, \mu_{\bar{q}}, P)^L$. C'est ce qu'il convient de prendre en compte pour résoudre le problème en pratique. Si le point G correspond à une densité de protons nulle (gaz de neutrons), on peut réaliser une construction mono-tangente à une dimension sur le potentiel proton-canonique $g_{pC}(\rho_p)$ le long d'un chemin iso- μ_n . En revanche, si G appartient au bord $\rho_n = 0$, l'équilibre ne correspond plus à des valeurs de μ_n égales : c'est alors un chemin à μ_p constant qu'il faut étudier, ce qui revient à se placer dans l'ensemble neutron-canonique.

La construction de l'équilibre pour gaz de neutrons en coexistence avec un liquide à deux fluides est illustré sur la figure 4.10. Les points d'équilibre sont situés sur un chemin iso- μ_n du plan des densités, et leur position est déterminée par une construction mono-tangente sur le potentiel proton-canonique $g_{pC}(\rho_p)$ pris le long de ce chemin. Le potentiel chimique $\mu_p(\rho_p)$ est également représenté, mettant en évidence le fait que l'on ne peut plus pratiquer la construction de Maxwell standard à cause de la valeur finie prise par μ_p sur le bord $\rho_p = 0$: les deux phases à l'équilibre n'ont alors pas la même valeur de μ_p .

Tous les chemins iso- μ_n conduisant au bord $\rho_p = 0$ correspondent à $\mu_n > 0$. Considérons en effet l'évolution $\mu_n(\rho_n)$ le long du bord $\rho_p = 0$. Les potentiels chimiques sont nuls pour le vide (les deux densités sont nulles, ainsi que le champ moyen), donc $\mu_n(0) = 0$. De plus, on sait que la matière de neutrons ne présente pas d'équilibre liquide-gaz, ce qui assure que $\mu_n(\rho_n)$ est une fonction monotone croissante. Ainsi, seuls les chemins iso- μ_n avec $\mu_n > 0$ sont à considérer. Par symétrie, les mêmes conclusions s'appliquent aux chemins iso- μ_p permettant d'étudier la zone 1 du côté riche en protons.



FIG. 4.9 – Région de coexistence à T = 0. Cette région est séparée en trois zones : 0, 1 et 2 correspondant à trois différents types d'équilibres liquide-gaz, dont les caractéristiques sont détaillées dans le texte. En haut : la courbe fermée donne la frontière de la coexistence dans le plan des densités. Les lignes droites relient les différents couples de phases en coexistence. En bas : ligne de coexistence correspondante dans le plan des potentiels chimiques.



FIG. 4.10 – Spécificité à T = 0: construction mono-tangente pour un potentiel chimique des neutrons fixé à $\mu_n = 5MeV$. En haut : chemin correspondant dans le plan des densités. Il atteint le bord $\rho_p = 0$ du plan des densités, pour une valeur finie de ρ_n Au centre : potentiel thermody-namique par unité de volume g_{pC} (introduit dans la partie 4.1.3). La région concave est corrigée par mélange de phases, ce qui correspond ici à une construction mono-tangente, indiquée par la ligne droite. En bas : courbe $\mu_p(\rho_p)$. La construction mono-tangente sur g_{pC} ne correspond pas à la construction de Maxwell habituelle, qui ne peut être pratiquée ici du fait de la valeur finie de μ_p sur le bord $\rho_p = 0$.
Les frontières entre les zones 0 et 1 sont données par les équilibres obtenus pour les deux chemins $\mu_q = 0$, à savoir : $\mu_n = 0$ pour la frontière entre le vide et le gaz de neutrons, et $\mu_p = 0$ entre le vide et le gaz de protons. Ces points frontières déterminent l'intervalle d'asymétrie $[(Z/A)^0_{<}, (Z/A)^0_{>}]$ pour lequel on se trouve dans la zone 0. La zone 0 regroupe les cas d'équilibres d'un liquide avec le vide. Les liquides concernés correspondent aux points tels que le plan tangent à la surface d'énergie passe par 0 au point du vide $(\rho_n, \rho_p) = (0, 0)$. Ce sont donc, de même que le vide, des points de pression nulle, puisqu'à T = 0 la pression est donnée par $P = \mathcal{H} - \mu_n \rho_n - \mu_p \rho_p$. Pour ce type de coexistence, les droites d'équilibre sont de la forme $\rho_p = k\rho_n$, où k est un coefficient de proportionnalité. Cela signifie que le rapport Z/A est constant le long de chacune de ces droites (étant donné par la relation Z/A = 1/(1 + k)).

Ainsi, un moyen simple de déterminer en pratique les points d'équilibre de la zone 0 est de se placer sur un chemin à Z/A constant et de repérer le point de pression nulle. Celui-ci correspond à un liquide en équilibre avec le vide, à condition que la valeur de Z/A considérée soit suffisamment proche de la symétrie pour se situer dans l'intervalle correspondant à la zone 0. Avec l'interaction de Skyrme Sly230a utilisée pour ce diagramme, on obtient $(Z/A)_{<}^{0} = 0.35$ (l'autre borne s'obtenant par symétrie neutron-proton).

Les limites de la zone 0 donnent l'intervalle d'asymétrie pour lequel un liquide auto-lié peut être défini. Ses bornes sont analogues aux « drip lines » associées aux noyaux finis. Cet intervalle délimite l'existence d'une matière homogène (regroupée en une seule phase). Dans ce cas, le point d'équilibre est un point de saturation, caractérisé par un minimum de l'énergie par particule $E/A(\rho)$ tracée pour le système de fraction protonique Z/A fixée. Cette propriété est liée à la particularité que présentent ces équilibres d'avoir lieu à Z/A constant. En effet, on peut alors réaliser la construction tangente directement sur $\mathcal{H}(\rho)$ tracé pour une droite à Z/A constant comme s'il s'agissait d'un système à un seul fluide. Avec cette représentation unidimensionnelle, la construction tangente donne pour le point d'équilibre ρ_0 la relation :

$$\mathcal{H}(\rho_0) = \rho_0 \frac{d\mathcal{H}}{d\rho}(\rho_0) \tag{4.23}$$

Le minimum de l'énergie par particule $E/A = \mathcal{H}/\rho$ doit quant à lui vérifier

$$\frac{d\mathcal{H}/\rho}{d\rho} = 0 = -\frac{\mathcal{H}}{\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{d\mathcal{H}}{d\rho}$$
(4.24)

et l'on voit que cette condition est équivalente à la relation (4.23) qui définit le point ρ_0 de la construction tangente.

Pour des asymétries plus importantes $(Z/A < (Z/A)^0_{<}$ du côté riche en neutrons), l'énergie est minimisée pour un équilibre avec un gaz de densité finie, et ne se fait plus sur une droite à Z/A constant. On se retrouve dans le cas des zones 1 et 2, qui nécessitent les constructions plus complexes exposées précédemment.

4.2.3 Dépendence en température

Le diagramme des phases complet de la matière nucléaire possède trois dimensions. Il peut être représenté par la superposition des diagrammes plans obtenus pour différentes valeurs de la température. C'est ce que montre la figure 4.11 pour l'espace des paramètres intensifs : les différentes lignes de coexistences représentées constituent la projection sur le plan (μ_n, μ_p) de la surface de coexistence qui forme le diagramme des phases dans l'espace (β, μ_n, μ_p) .

Étudions maintenant la dépendance en température de l'équilibre de phase dans le plan des densités. La figure 4.12 présente plusieurs courbes de coexistence isothermes tracées dans le plan $(Z/A, \rho)$, afin de souligner le rôle de l'isospin. L'invariance par échange neutrons-protons se traduisant par la symétrie des courbes par rapport à l'axe Z/A = 0.5, seule la partie riche en neutrons (Z/A < 0.5) sera discutée par la suite.

La région de coexistence la plus étendue correspond à la courbe de température nulle. Elle est d'ailleurs la seule à atteindre le bord Z/A = 0, correspondant à un gaz de neutrons (cette spécificité



FIG. 4.11 – Diagramme de phase en (μ_n, μ_p) pour différentes valeurs de T. Trait épais : T = 0. En traits pointillés : T = 4, 6, 8*MeV*. En traits pleins : T = 10, 10.5, 11, 11.5, 12, 12.5, 13, 13.5, 14*MeV*. Les points critiques sont marqués aux extrémités de chaque ligne de coexistence. Le point critique ultime correspondant à la matière symétrique pour $T_u = 14.54MeV$ est également indiqué.



FIG. 4.12 – Régions de coexistence dans le plan $(\rho, Z/A)$ obtenues pour differentes températures. La plus grande région, marquée par le trait épais, correspond à T = 0. En traits pointillés : T = 4, 6, 8MeV. En traits pleins : T = 10, 10.5, 11, 11.5, 12, 12.5, 13, 13.5, 14MeV. Pour chaque valeur de la température, les points critiques sont marqués. A la température critique $T_u = 14.54MeV$, la région de coexistence se termine par un point critique ultime (à Z/A = 0.5) qui est également indiqué. Les différents points critiques forment une ligne marquée par un trait gris épais. La ligne en points-tirets relie les points d'asymétrie maximale pour chaque région de coexistence.

est due à la singularité de la distribution de Fermi-Dirac à T = 0 qui vient d'être discutée). Quand une température finie est introduite, le diagramme associé concerne des valeurs non nulles de Z/A, ce qui signifie que l'équilibre a toujours lieu entre des phases contenant chacune les deux types de particules.

La région de coexistence décroît régulièrement avec la température : son extension en asymétrie se réduit, tandis que les densités des branches liquide et gaz se rapprochent. Ce rapprochement se fait à la fois par une augmentation globale de la densité pour la branche gaz, et par une diminution pour la branche liquide. Ainsi, tandis que la température augmente, chaque courbe de coexistence se situe à l'intérieur de la précédente. Lorsqu'on atteint la température critique T_u , la courbe de coexistence se réduit à un point de la matière symétrique, qui est le point critique ultime du diagramme des phases.

Les points critiques sont indiqués sur chacun des diagrammes isothermes : ils forment ensemble une ligne critique. Étant donnée la réduction de la région de coexistence avec la température, cette ligne correspond naturellement à une asymétrie décroissante entre T = 0 et $T = T_u$. Il est intéressant de constater que la densité critique diminue également au cours de cette évolution : elle est en cela entraînée par la baisse globale de la densité de la branche liquide, qui évolue plus rapidement que la densité du gaz.

La diminution en asymétrie et en densité des points critiques avec la température est en accord avec des études réalisées auparavant avec différentes interactions effectives [Mul95, Li98, Lee01, Ish03].

Nous nous sommes également intéressés à une autre ligne de points particuliers, qui est celle des points d'asymétrie maximale. Pour chaque température, on repère le point de la courbe de coexistence correspondant au rapport Z/A minimal, que l'on note $(Z/A)^{min}$ (toujours pour décrire la partie riche en neutrons). Ce point ne correspond pas au point critique (qui a une asymétrie $(Z/A)^c > (Z/A)^{min}$) : on trouve qu'il se situe toujours à une densité inférieure à la densité critique, c'est à dire sur la branche gaz. Considérant la ligne des points d'asymétrie maximale, on voit d'ailleurs que son évolution en densité est opposée à celle des points critiques, à savoir que la densité de ces points augmente avec la température. Les deux lignes se rejoignent nécessairement au point critique ultime (pour $T = T_u$), où la courbe de coexistence se réduit à un point.

Le fait que le point d'asymétrie maximale diffère du point critique se traduit par l'existence d'un phénomène appelé transition rétrograde [Hua63]. Ce phénomène a lieu dans la petite région d'asymétrie telle que $(Z/A)^{min} < Z/A < (Z/A)^c$. Considérons une transformation à Z/A constant compris dans cet intervalle. La région de coexistence est alors traversée. En partant des basses densités, l'on rencontre d'abord la branche « gaz » de la courbe de coexistence. La densité augmentant, il se forme une phase liquide telle que $(Z/A)^L > Z/A$, en équilibre avec un gaz tel que $(Z/A)^G < Z/A$. Au cours de l'évolution dans la région de coexistence, la proportion de liquide augmente, puis diminue. Elle s'annule à la sortie de la coexistence, où l'on retrouve comme en entrée une phase pure gazeuse (bien que sa densité soit plus élevée qu'au départ de la transformation).

Pour un système trop riche en neutrons $(Z/A < (Z/A)^{min})$, il ne peut y avoir aucune coexistence de phase.

Afin de mieux visualiser la dépendance en température du diagramme de phase, les figures 4.13 et 4.14 le présentent sous différents points de vue. Sur la figure 4.13 sont tracées différentes coupes à Z/A constant superposées dans le plan (T, ρ) . Chacune forme une arche, qui rassemble les points d'intersection des différentes courbe isothermes avec un plan tel que Z/A est fixé. La ligne des points critiques et celle des points d'asymétrie maximale sont également tracées, ce qui fait apparaître l'évolution de leur densité.

La figure 4.14 représente la dépendance en Z/A de la zone de coexistence. Pour chaque valeur de Z/A, on y lit deux températures particulières, l'une correspondant à la ligne des points critiques, et l'autre à la ligne des points d'asymétrie maximale. Dans le premier cas, il s'agit de la température critique associée au rapport Z/A considéré, $T^c(Z/A)$: à savoir la température pour laquelle le point critique a le rapport isotopique $(Z/A)^c = Z/A$. Dans le second cas, on a la température maximale $T^{max}(Z/A)$ pour laquelle un point d'asymétrie Z/A peut être impliqué dans une coexistence de phase. Ces deux courbes vérifient nécessairement la relation $T^c(Z/A) < T^{max}(Z/A)$. On voit qu'elles présentent toutes deux une allure assez plate (faible dépendance en Z/A) aux alentours de



FIG. 4.13 – Coupes de la région de coexistence en fonction de la densité totale pour différentes valeurs de Z/A, régulièrement espacées entre 0.05 et 0.5 par pas de 0.05. Ligne grise épaisse : ligne des points critiques. Ligne en points-tirets : ligne d'asymétrie maximale.

la matière symétrique. Les températures chutent l'une après l'autre pour des asymétries élevées : dans cet intervalle, la différence entre T^c et T^{max} peut atteindre plusieurs MeV. C'est une autre façon d'envisager la condensation rétrograde, signifiant que l'on peut avoir un équilibre liquide-gaz à une température sur-critique par rapport à la valeur d'asymétrie du gaz.

4.3 Comportement critique

Nous nous intéressons maintenant au comportement de la transition liquide-gaz de la matière nucléaire à l'approche des points critiques.

Un point critique correspond à un cas limite de coexistence dans lequel la différence entre les deux phases disparaît : autrement dit, la différence entre les valeurs des paramètres d'ordre s'annule. Une étude du comportement critique d'une transition consiste à caractériser par une loi de puissance l'évolution de cette distance à l'approche d'un point critique.

Dans le cas d'un système à un seul fluide, tel que la matière symétrique, la coexistence liquidegaz forme une ligne dans l'espace à deux dimensions des paramètres intensifs (β, μ) . Cette ligne présente un unique point critique, dont on s'approche à partir de la zone de coexistence en augmentant la température (ou, de façon équivalente, en abaissant le potentiel chimique). Prenant en compte le degré de liberté d'isospin, la matière nucléaire est un système à deux fluides : son étude nécessite une dimension supplémentaire. Ainsi, la région de coexistence forme une surface dans l'espace à trois dimensions des paramètres intensifs β, μ_n, μ_p , qui est bordée par une ligne critique (*cf* figure 4.16). On peut alors envisager deux types de comportements critiques, correspondant aux deux directions permettant de s'approcher de la ligne critique depuis un point de la coexistence : en augmentant la température, ou en faisant varier l'un des potentiels chimiques (μ_n et μ_p jouant des rôles équivalents du fait de la symétrie par échange neutron-proton). C'est ce que nous nous proposons d'étudier ici.



FIG. 4.14 – Température critique correspondant à chaque valeur de Z/A, donnée par le trait gris épais. La courbe de température maximale pour laquelle un point de Z/A donné peut appartenir à la région de coexistence est également indiquée, par la ligne en points-tirets.

4.3.1 Lois de puissance et exposants critiques

Prenons le cas d'une transition de phase dépendant du paramètre intensif λ . Pour chaque point d'équilibre correspondant à une valeur donnée de λ , on peut définir dans l'espace des observables la distance δ qui sépare les deux phases, obtenant ainsi une relation $\delta(\lambda)$. Si la transition présente un point critique repéré par λ_c , on a par définition $\delta(\lambda_c) = 0$.

La forme de la courbe $\delta(\lambda)$ à l'approche du point critique, c'est à dire la façon dont s'annule la distance entre les phases, définit un comportement critique. De façon générale, un tel comportement est décrit par une loi de puissance, qui s'exprime comme :

$$\delta \propto |\lambda_c - \lambda|^{1/\beta_\lambda} \tag{4.25}$$

à savoir une relation linéaire en représentation logarithmique

$$\ln(\delta) = \ln(|\lambda_c - \lambda|)/\beta_{\lambda} + constante$$
(4.26)

où β_{λ} est un exposant critique, dont la valeur définit l'appartenance de la transition de phase à une certaine classe d'universalité [Leb87, Pel02]. (La notation β est traditionnelle pour un exposant critique décrivant l'évolution de la distance entre les phases à l'approche d'un point critique. Grâce à la présence de l'indice, nous pourrons distinguer l'exposant critique du paramètre de Lagrange β associé à la température).

Une telle loi de puissance est illustrée par la figure 4.15 où la transition liquide-gaz de la matière nucléaire symétrique est étudiée en fonction de la température.

Considérons maintenant le cas de la matière nucléaire avec le degré de liberté d'isospin. La région de coexistence forme un feuillet de l'espace des variables intensives (β, μ_n, μ_p) . Cette surface est bordée par une ligne de points critiques. Chacun de ces points peut être approché en longeant la surface de coexistence suivant une infinité de directions. A chaque direction est associé un exposant



FIG. 4.15 – Illustration du comportement critique dans le cas de la matière nucléaire symétrique (la température critique est alors $T_c = T_u$, correspondant au point critique ultime pour la matière à deux fluides). La distance entre les phases δ est la différence de densité entre le gaz de densité ρ_a et le liquide de densité ρ_b . L'évolution de δ avec $T_c - T$ est donnée en trait épais. En haut : représentation linéaire. En bas : représentation logarithmique. A l'approche du point critique, cette évolution obéit à une loi de puissance d'exposant critique 2, représentée en trait pointillé.

critique caractérisant l'annulation du paramètre d'ordre. Deux directions indépendantes peuvent être spécifiées : elles permettent *a priori* de définir deux exposants critiques indépendants. Nous considérerons deux types de directions : $\beta = constante$ et $\mu_q = constante$. Dans ce dernier cas, l'indice q signifie une combinaison linéaire quelconque de μ_n et μ_p : nous étudierons ici le potentiel chimique isovecteur $\mu_3 = \mu_n - \mu_p$. Une image qualitative de la surface de coexistence est donnée par la figure 4.16, où l'on a représenté différents chemins à β ou μ_3 constant.



FIG. 4.16 – Image qualitative du feuillet de coexistence dans l'espace des paramètres intensifs $(T, \mu, \mu_3), \mu$ et μ_3 étant les potentiels chimiques isoscalaire et isovecteur. Quatre points de la ligne critique sont marqués (en plus du point critique ultime correspondant à la plus haute température du feuillet). Pour chacun de ces quatre points, deux chemins de coexistence sont tracés : l'un isotherme, l'autre à μ_3 constant. Un chemin isotherme (β constant) présente un comportement critique auquel on associe l'exposant β_{β} . Pour un chemin à μ_3 constant, on associe au comportement critique l'exposant β_{μ_3} .

Pour un équilibre entre un gaz A et un liquide B, la distance entre les phases (dans le plan des densités) est donnée par $\delta = \sqrt{(\rho_n^B - \rho_n^A)^2 + (\rho_p^B - \rho_p^A)^2}$. Pour des chemins isothermes, correspondant à β constant, le comportement critique obéit à la loi de puissance d'exposant critique β_{β} :

$$\delta_{\beta}(\mu_q) \propto \left|\mu_q^c - \mu_q\right|^{1/\beta_{\beta}} \tag{4.27}$$

où μ_q^c la valeur critique du potentiel chimique μ_q pour la température considérée². Pour des chemins à μ_q constant, la loi de puissance s'exprime avec l'exposant critique β_{μ_q} :

$$\delta_{\mu_a}(\beta) \propto (\beta^c - \beta)^{1/\beta_{\mu_q}} \tag{4.28}$$

où β^c correspond à la température critique pour la valeur de μ_q considérée.

²La ligne de coexistence à β fixé définit une relation entre μ_n et μ_p : $\mu_n^t(\beta, \mu_p)$. Sur une distance infinitésimale, cette ligne peut être approximée par une droite. Ainsi, à l'approche du point critique, on a $(\mu_p - \mu_p^c) \propto (\mu_n - \mu_n^c)$. Par conséquent, l'exposant critique de la loi de puissance à β constant est inchangé lorsque différentes variables μ_q sont employées, et l'on a toujours $\delta_\beta(\mu_q) \propto \left|\mu_q^c - \mu_q\right|^{1/\beta_\beta}$.

4.3.2 Comportement des données numériques

Notre étude se situe dans le cadre d'une approche de champ moyen. Dans ce contexte, la valeur attendue pour les exposants critiques gouvernant l'annulation du paramètre d'ordre est 2 [Sta71]. Ceci est un résultat générique qui découle des propriétés d'analyticité des fonctionnelles de densité obtenues en champ moyen. Du fait de cette analyticité, les fonctions thermodynamiques peuvent s'exprimer comme des développements de Taylor des observables. En effectuant un changement de variable plaçant un point critique au point 0 de l'espace des observables, à l'approche de ce point les ordres supérieurs du développement deviennent négligeables. La construction de la coexistence de phase peut finalement s'effectuer sur des polynômes pour lesquels seul l'ordre le plus bas présentant les propriétés requises est conservé.

Considérons, en toute généralité, un système à N observables $\{a_k\}$ associées à autant de paramètres intensifs $\{\lambda_k\}$. Pour un chemin tel que les paramètres $\{\lambda_{k>1}\}$ sont fixés, un éventuel équilibre de phase s'obtient par construction de Maxwell sur la courbe $\lambda_1(a_1)$. La construction s'effectue si cette courbe présente une région d'inversion de pente. A l'approche du point critique, une courbe de cette forme finit par se réduire à un polynôme de degré 3. Avec le changement de variable approprié, la courbe $\lambda_1(a_1)$ s'exprime alors comme une fonction impaire de la forme $y(x) = cx + dx^3 = x(c + dx^2)$, où les coefficients c et d dépendent du chemin considéré, c'est à dire de la valeur des paramètres intensifs $\{\lambda_{k>1}\}$. Si c et d sont de signe opposé, cette fonction présente un renversement de pente se prêtant à la construction de Maxwell. Comme on a affaire à une fonction impaire, les points correspondant à cette construction sont donnés par l'intersection de y(x) avec l'axe des abscisses de part et d'autre du point x = 0, c'est à dire en $x = \pm \sqrt{|c/d|}$. La distance entre les deux phases vaut donc $\delta = 2\sqrt{|c/d|}$. Si l'on fait varier la valeur d'un des paramètres $\lambda_{k>1}$ qui définissent le chemin considéré, le rapport c/d évolue de façon analytique. Pour un déplacement infinitésimal du chemin, cette évolution est linéaire. Sachant que la distance δ s'annule pour le chemin correspondant à la valeur critique λ_k^c , on a la relation : $c/d \propto (\lambda_k^c - \lambda_k)$. Ainsi, à l'approche du point critique, la distance entre les phases suit la loi de puissance $\delta \propto |\lambda_k^c - \lambda_k|^{1/2}$, pour laquelle l'exposant critique vaut 2.

Par conséquent, une étude au-delà du champ moyen (par exemple une simulation numérique de type gaz sur réseau) serait nécessaire pour mettre en évidence une éventuelle différence entre les exposants critiques β_{β} et $\beta_{\mu_{\alpha}}$.

Concernant notre approche, la connaissance du comportement critique en champ moyen constitue un test des résultats numériques obtenus pour la coexistence de phase. Deux méthodes différentes ont été employées pour ajuster les données numériques par des lois de puissance de la forme $\delta \propto \left|\lambda_q^c - \lambda_q\right|^{1/\beta_{\lambda}}$. Pour la première, on supposait λ_c inconnu et un fit à deux paramètres $(\lambda_c \text{ et } \beta_{\lambda})$ devait être effectué. La position du point critique était alors donnée par l'annulation de δ suivant la loi de puissance obtenue. Cependant, pour un fit à deux paramètres, la méthode des moindres carrés peut dans ce cas aboutir à une grande plage de résultats si ces paramètres sont fortement corrélés : or nous avons constaté que c'est ici le cas. En effet, la surface correspondant à l'écart quadratique obtenu dans le plan $(\lambda_c, \beta_{\lambda})$ présente un vallée étendue et non un minimum bien localisé. Bien que compatible avec un exposant critique 2, le résultat restait essentiellement indéterminé. Dans un second temps, le point critique a été déterminé par une méthode indépendante (exposée dans la partie 4.1.4) et le fit ne portait alors plus que sur la valeur de l'exposant critique β_{λ} .

Les résultats obtenus s'accordent avec la valeur d'exposant critique 2 attendue en champ moyen. C'est ce qui est montré sur les figures 4.17 et 4.18 présentant les comportements critiques correspondant respectivement à des valeurs fixées de β et de μ_n .

Remarquons pour finir que la connaissance du comportement critique en champ moyen fournit une méthode supplémentaire pour la détermination des points critiques. Il suffit en effet d'appliquer la démarche inverse à celle qui vient d'être présentée, c'est à dire de fitter les données numériques de façon à déterminer le paramètre λ_c , pour une valeur de β_{λ} fixée à 2.



FIG. 4.17 – Traits pleins avec points : évolution à température fixée de $\mu_3 - \mu_{3c}$ en fonction de δ (distance séparant les deux phases à l'équilibre : voir texte) pour différentes valeurs de la température : T = 10, 10.5, 11, 11.5, 12, 12.5, 13, 13.5, 14 MeV. A l'approche des points critiques correspondants, les relations entre ($\mu_3 - \mu_3^c$) et δ obéissent à des lois de puissance avec un exposant critique $\beta_\beta = 2$. Ces lois de puissances forment les droites tracées en points-tirets.



FIG. 4.18 – Points : évolution de $T - T_c$ en function de δ (distance séparant les phases) à l'approche des points critiques pour différentes valeurs de μ_n fixées. Les points noirs sont espacés d'un pas $\Delta T = 0.02 MeV$, et les cercles d'un pas $\Delta T = 0.1 MeV$. Les valeurs de μ_n choisies sont les valeurs critiques obtenues pour différentes températures (correspondant alors à T_c pour le chemin considéré) : $\mu_n = \mu_q^{<}(T_u), \, \mu_q^{<}(T = 12 MeV), \, \mu_q^{<}(T = 10 MeV)$. Les droites en traits pleins donnent les lois de puissances d'exposant $\beta_{\mu} = 2$ correspondantes.

4.4 Ordre de la transition

Le diagramme d'équilibre liquide-gaz de la matière nucléaire est maintenant établi, et nous avons décrit en détail son comportement. Dans cette partie, nous abordons la question de l'ordre de la transition de phase. Il en ressortira en particulier que la matière nucléaire présente une transition de phase du premier ordre, mise à part la ligne des points critiques du second ordre que nous venons de discuter. Cela concerne également la matière nucléaire asymétrique, malgré que dans ce cas une transformation thermodynamique à Z/A constant présente un caractère continu.

4.4.1 Singularités de la fonction de partition

La définition de l'ordre d'une transition de phase s'appuie sur les singularités présentées par la fonction de partition d'un système étudié dans l'espace de ses paramètres intensifs, ou plus exactement le logarithme de cette fonction (cf partie 2.3). Dans le cas de la matière nucléaire, il s'agit donc d'étudier $\ln Z(\beta, \mu_n, \mu_p)$, à savoir la fonction de partition grand-canonique. Nous avons vu qu'elle est donnée par la pression du système, au travers de la relation $P = \ln Z/(\beta V)$. Ceci nous permet d'établir un lien immédiat entre une construction de Gibbs et une transition du premier ordre.

Considérons en effet l'enveloppe concave de l'entropie représentée dans l'espace des observables, $s(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_n)$. Si s présente une convexité, cette anomalie de courbure est corrigée par la construction d'une surface réglée. Chacune des droites de cette surface relie deux points de même plan tangent : c'est à dire qu'ils ont la même position dans l'espace des paramètres intensifs. En fixant β et μ_n , cette position est repérée par le point de croisement du diagramme $P - \mu_p$ paramétrisé en densité. Ainsi, si l'on s'intéresse à la représentation de P en fonction des potentiels chimiques, l'on voit que l'anomalie de courbure de l'entropie se traduit, pour β fixé, par une région du plan (μ_n, μ_p) pour laquelle P est pluri-valuée. C'est ce qui apparaît sur la figure 4.19, où la surface de pression est représentée en fonction des potentiels chimiques isoscalaire ($\mu = \mu_n + \mu_p$) et isovecteur $(\mu_3 = \mu_n - \mu_p)$. Ce choix de variable permet de mettre à profit la symétrie neutron-proton (qui se traduit ici par une symétrie par rapport à l'axe $\mu_3 = 0$) pour ne représenter que la partie du plan correspondant aux valeurs positives de μ_3 . Il s'agit de la partie riche en neutrons. Ainsi, la surface de pression peut être vue en coupe au niveau de la matière symétrique ($\mu_3 = 0$), ce qui permet de rendre apparent les croisements des courbes paramétrisées qui la composent. Pour certaines valeurs de (μ, μ_3) , la pression prend trois valeurs, correspondant à différents points de l'espace des observables conjuguées (ρ, ρ_3) : c'est la région de transition de phase. Une autre représentation de cette surface de pression est donnée par la partie gauche de la figure 4.3, où sont tracées plusieurs courbes paramétrisées $P(\mu_p)$, correspondant à différentes valeurs de μ_n . Pour les valeurs de μ_n comprises dans l'intervalle de transition, ces courbes présentent un croisement; de part et d'autre de cet intervalle, elles sont monotones.

Revenons un instant à l'espace des observables. Lorsque l'entropie est remplacée par son enveloppe convexe, tous les points d'un segment joignant deux phases à l'équilibre appartiennent au même plan tangent, et vérifient les conditions d'équilibre de Gibbs énoncées pour les deux phases considérées. Tout ce segment de l'espace des observables se trouve donc concentré en un seul point de l'espace des paramètres intensifs, qui est le point de croisement. La construction de l'enveloppe concave de *s* revient donc pour *P* à ramener au point de croisement toutes les solutions correspondant à une valeur des observables intermédiaire entre deux phases à l'équilibre. Ainsi, la pression du système équilibré devient une surface monovaluée, présentant un pli qui est l'ensemble des points de croisements. Cette surface est tracée sur la figure 4.20 dans le plan (μ_n, μ_p), pour T = 10 MeV. Elle donne une représentation de la fonction de partition grand-canonique ln $Z(\beta, \mu_n, \mu_p)$ pour le plan à température constante.

Il apparaît donc clairement qu'une coexistence de phase équivaut à un pli de la fonction de partition dans l'espace des paramètres intensifs, ce qui définit une transition de phase du premier ordre. La définition d'Ehrenfest associe en effet un premier ordre à une discontinuité parmi les dérivées premières de la fonction de partition intensive, c'est à dire une rupture de pente (pli) de la surface correspondante [Hua63, Bal82].



FIG. 4.19 – Pression en fonction des potentiels isoscalaire ($\mu = \mu_n + \mu_p$) et isovecteur ($\mu_3 = \mu_n - \mu_p$), pour un système uniforme à T = 6MeV.



FIG. 4.20 – Pression P du système à l'équilibre, équivalente à la fonction de partition grandcanonique par $P = \ln Z/(\beta V)$. Elle exprimée dans le plan (μ_n, μ_p) pour une température fixée T = 10 MeV. La surface de pression résulte de la construction de Gibbs, qui est obtenue en pratique par constructions de Maxwell dans l'ensemble proton-canonique pour un grand nombre de valeurs de μ_n . Le pli résultant de cette construction correspond à la ligne de coexistence, qui se termine par deux points critiques. Le chemin tracé correspond à une transformation à fraction protonique constante Z/A = 0.3, qui est discutée dans la partie 4.4.2.

Pour la matière nucléaire, nous venons d'obtenir la surface de $\ln Z(\beta, \mu_n, \mu_p)$ à β fixé, avec une rupture de pente le long de la ligne de coexistence $\mu_p^t(\mu_n)$. Afin de mieux mettre en évidence cette discontinuité, étudions maintenant la pente de cette surface dans la direction μ_n , qui est égale à la densité ρ_n . En effet, la fonction de partition grand-canonique est telle que $\partial \ln Z/\partial(\beta\mu_q) = \rho_q$, ce qui revient à la relation $\partial P/\partial \mu_q = \rho_q$. La figure 4.21 représente la pente en μ_n de la surface de la figure 4.20, à savoir la surface $\rho_n(\mu_n, \mu_p)$ à T = 10 MeV. Le passage de la ligne de coexistence se traduit par un saut de la valeur de ρ_n . Les valeurs prises de part et d'autre d'un point de cette ligne donnent les densités de neutrons respectives des deux phases en coexistence : liquide (haute densité) et gaz (basse densité). On peut apprécier sur cette figure l'évolution du saut de densité le long de la ligne de coexistence. La distance entre les deux valeurs s'annule à chacune de ses extrémités, qui sont les points critiques du diagramme de phase.



FIG. 4.21 – Dérivée première de la fonction de partition grand-canonique $\rho_n = \partial P / \partial \mu_n$ en fonction de μ_n et μ_p à une temperature T = 10 MeV. Le chemin Z/A = 0.3 est également indiqué.

Considérant les trois dimensions de l'espace des paramètres intensifs, on ne peut plus représenter ln Z par une surface graphique. En revanche, on peut visualiser la surface de coexistence formée par l'ensemble des lignes $\mu_p^t(\mu_n)$ obtenues pour différentes températures $T < T_u$ (cf figure 4.11). Il s'agit d'une surface de l'espace des paramètres intensifs (β, μ_n, μ_p) . En chaque point de cette surface de coexistence, à l'exception de son bord, la fonction de partition grand-canonique présente une rupture de dérivée première (transition de phase du premier ordre).

Intéressons-nous maintenant au bord de la surface de coexistence, qui est la ligne des points critiques. Nous avons vu, au moment de réaliser la construction de Gibbs, que les points critiques correspondent à une disparition de la partie convexe de l'entropie. Plus précisément, on trouve un point critique sur un chemin à β et μ_p constants dans le cas limite où le potentiel neutroncanonique $g_{nC}(\rho_n)$ présente courbure minimale nulle. Le point de courbure nulle définit alors le point critique. Il équivant à un point de pente nulle pour la courbe $dg_{nC}/d\rho_n = \mu_n(\rho_n)$, soit, en inversant la représentation, une tangente verticale de $\rho_n(\mu_n)$. Revenons-en alors à la surface $\rho_n(\mu_n, \mu_p)$. Les points critiques sont situés aux extrémités de la ligne de coexistence, où la distance entre les deux phases s'annule : autrement dit, la discontinuité de la dérivée première disparaît. Ce ne sont donc pas des points de transition du premier ordre. En revanche, la surface $\rho_n(\mu_n, \mu_p)$ présente en chacun de ces deux points une tangente verticale, ce qui correspond pour $\ln Z$ à une divergence de la dérivée seconde. Les points critiques sont donc des points de transition du second ordre. Il s'agit d'un résultat général pour toute approche de champ moyen : l'annulation du paramètre d'ordre, gouvernée par un exposant critique $\beta_{\lambda} = 2$, correspond à la terminaison d'une ligne de coexistence du premier ordre en un point critique du second ordre.

En résumé, le diagramme de phase liquide-gaz de la matière nucléaire dans l'espace des paramètres intensifs (β, μ_n, μ_p) présente une surface de coexistence marquant une transition d'ordre 1, bordée par une ligne de points critiques pour lesquels la transition est d'ordre 2.

4.4.2 Transformation à Z/A constant

Nous venons de mettre en évidence le fait que la matière nucléaire présente une transition de phase d'ordre 1, qui ne se limite pas au cas de la matière symétrique. Pourtant, il a été montré que pour des systèmes nucléaires de fraction protonique fixée (pour $Z/A \neq 0.5$), une transformation thermodynamique donne une évolution continue des différentes observables ³. En particulier, la densité est une fonction continue de la pression, qui ne présente alors pas le plateau auquel on a l'habitude d'associer une transition du premier ordre. Ainsi, une telle évolution a pu être interprétée comme une transition continue [Mul95, Das03, Qia03, Sil04, Sri02, Car98]. Cette conclusion résulte en fait d'une confusion entre les notions de « transformation continue » et de « transition continue ». La différence entre ces deux notions était déjà exposée dans la partie 2.4.2. Nous allons maintenant décrire comment la transition d'ordre 1 de la matière nucléaire se traduit par une transformation continue lorsque la conservation de Z/A est imposée.

Soulignons pour commencer le fait que la fraction protonique Z/A est un paramètre d'ordre de la transition. C'est d'ailleurs ce qui entraîne le phénomène de distillation de l'isospin décrit lors de l'analyse de la région de coexistence. Une façon de le mettre en évidence consiste à représenter Z/A en fonction des variables intensives. La figure 4.22 représente la surface $Z/A(\mu_n, \mu_p)$ pour T =10MeV. Cette surface se déduit des surfaces $\rho_q(\mu_n, \mu_p)$ (cf figure 4.21) correspondant aux pentes en μ_q de la surface de pression (cf figure 4.20) : elle est simplement donnée par $Z/A = \rho_p/(\rho_n + \rho_p)$. Le résultat montre que Z/A présente une discontinuité le long de la ligne de transition, autrement dit il s'agit d'un paramètre d'ordre de la transition. Deux phases en coexistence prennent donc des valeurs de Z/A distinctes, sauf bien sûr dans le cas d'un système de matière symétrique.

Une transformation à Z/A constant correspond à une coupe horizontale de cette surface. Un exemple en est donné par le chemin Z/A = 0.3 tracé en gris. Il apparaît ainsi clairement qu'un système de fraction protonique donnée ne peut pas traverser la ligne de coexistence en un point, mais est contraint de la suivre sur tout un intervalle pour passer d'une région haute à une région basse densité. Le cas de la matière symétrique est une exception : on a Z/A = 0.5 tout au long de l'axe $\mu_n = \mu_p$. C'est le seul cas où la fraction protonique n'est pas un paramètre d'ordre, ce qui permet à la matière symétrique de se comporter comme un fluide simple.

Concernant la matière asymétrique, on peut voir que, pour un point de la ligne de coexistence, la phase liquide se trouve toujours plus proche de la symétrie (Z/A = 0.5) que la phase gaz. Ceci reflète la différence de comportement de la surface Z/A de part et d'autre de la ligne de coexistence : tandis que l'on s'écarte de l'axe $\mu_n = \mu_p$, Z/A présente une évolution plus rapide du côté des basses densités.

La discontinuité de Z/A le long de la ligne de transition est représentée de façon plus quantitative sur la figure 4.23, qui en donne la projection sur le plan $(\mu_n, Z/A)$. La transformation Z/A = 0.3 est donnée par une droite horizontale, qui traverse la zone de coexistence entre deux points notés A et B définissant un intervalle fini de valeurs de μ_n . Le point A correspond à une phase gaz en équilibre avec un liquide B' plus symétrique, et le point B à une phase liquide en équilibre avec un gaz plus asymétrique. Le rapport Z/A de chacune des deux phases décroît tandis que le système évolue de A à B. L'asymétrie de la branche liquide se rapproche peu à peu de celle du système global, pour la rejoindre à la sortie de la coexistence en B.

³Il faut noter que les transformations à Z/A fixé correspondent à la situation expérimentale des collisions d'ions lourds, où les nombres de protons et de neutrons obéissent à deux lois de conservation indépendantes.



FIG. $4.22 - Z/A = \rho_p/(\rho_n + \rho_p)$ en fonction de μ_n et μ_p pour une temperature fixée T = 10 MeV. Le chemin à Z/A = 0.3 est indiqué.

Une transformation (isotherme) à Z/A constant correspond, ainsi que le montre la figure 4.23, à un chemin dans le plan des potentiels chimiques. La figure 4.7 donne le diagramme des phases en représentation (μ_n, μ_p) pour T = 10 MeV. Le chemin à Z/A = 0.3 y est tracé : il suit la ligne de coexistence entre les deux points A et B. L'évolution le long de cet intervalle se traduit par différents équilibres de phase. Entre A et B, le système est composé de deux phases dont les proportions et compositions respectives évoluent de façon à permettre le franchissement de la coexistence à Z/A constant.

Observons maintenant comment se déroule une transformation à Z/A constant dans le plan des densités, toujours en suivant l'exemple d'un système de composition Z/A = 0.3. Cette transformation est représentée sur la figure 4.6, dans le plan (ρ_n, ρ_p) et de façon équivalente en représentation $(\rho, Z/A)$. En partant de la région à basse densité, le système atteint la ligne de coexistence au point A, qui appartient à la branche gaz. Ce point est en équilibre avec le point liquide situé en B', de composition plus symétrique. Cependant, lorsque le système global se trouve au point A, il est encore entièrement constitué de gaz : pour ce premier point de coexistence la proportion de liquide est nulle. Le système évolue ensuite à l'intérieur de la coexistence, où il croise différents chemins iso- μ_n : la position des points liquide et gaz en coexistence évolue en conséquence. Tandis que la densité globale du système augmente, la proportion de liquide s'accroît. Dans le même temps, les compositions des deux phases en coexistence $(Z/A)^L$ et $(Z/A)^G$ se modifient, la composition du liquide s'approchant de celle du système global (décroissance de Z/A) et le gaz devenant toujours plus asymétrique. Le système atteint finalement la branche liquide de la courbe de coexistence au point B, qui est en équilibre avec le point A' de la branche gaz. En ce dernier point de coexistence, la phase gazeuse disparaît : tout le système s'est converti en liquide. En poursuivant la transformation, on sort de la région de transition de phase. Le système est désormais homogène.

Ces différents points de vue décrivant la transformation à Z/A constant ont en commun de souligner l'évolution graduelle du système le long de la coexistence. Il s'agit là d'un comportement générique lorsqu'une loi de conservation est imposée à un paramètre d'ordre [Cho02, Gul03b]. Si le système atteint la coexistence, le seul moyen d'évoluer en respectant cette contrainte est de suivre



FIG. 4.23 – Projection de la région de coexistence sur le plan $(Z/A, \mu_n)$. Les points noirs marquent les points critiques, et les étoiles les points d'asymétrie maximale. Le chemin à Z/A = 0.3 est indiqué.

la ligne de coexistence, jusqu'à ce que la loi de conservation soit à nouveau compatible avec une phase homogène.

Une telle évolution a pour effet de masquer la discontinuité de l'équation d'état qui est associée à une transition du premier ordre. Ceci est illustré par la figure 4.24, qui montre l'évolution de μ_n et P en fonction de la densité totale ρ pour une transformation à Z/A = 0.3. Les traits pleins sont obtenus après construction de Gibbs. Ces fontions ne présentant pas de plateau dans la région de coexistence, la transformation ressemble à une transition continue. Cependant, la région de coexistence correspond par construction à une transition de phase d'ordre 1, c'est à dire une région où la fonction de partition grand-canonique présente une rupture de pente. Il y a donc bien une transition du premier ordre : la discontinuité qui lui est associée concerne chacune des coexistences de phases que connaît le système au cours de son évolution. La proportion entre les deux phases varie quant à elle de façon continue : c'est pourquoi les observables décrivant le système dans son ensemble ne présentent aucun saut, mais seulement des ruptures de pentes marquant l'entrée et la sortie de la zone de coexistence, ce qui ne correspond aucunement à une transition continue.

Un tel comportement est générique : ainsi que nous l'avions exposé dans le chapître 2, un système en transition de phase du premier ordre présente une évolution continue lorsqu'une contrainte de conservation est imposée à l'un des paramètres d'ordre de la transition.

Ainsi, le comportement de transformations spécifiques ne doit pas être confondu avec les propriétés thermodynamiques intrinsèques de l'équation d'état. Le degré de liberté lié à l'isospin ne modifie pas l'ordre de la transition liquide-gaz pour la matière nucléaire asymétrique. Tant que les points critiques, clairement identifiés dans le diagramme des phases, ne sont pas atteints, cette transition est du premier ordre au même titre que pour la matière symétrique. Le comportement différent présenté par la matière asymétrique tient au fait que Z/A devient un paramètre d'ordre de la transition, ce qui rend plus complexe le passage par la coexistence pour un système de fraction protonique fixée.



FIG. 4.24 – Transformation de la matière nucléaire à fraction isotopique constante Z/A = 0.3à T = 10 MeV. En haut : $\mu_n(\rho)$. En bas : $P(\rho)$. Traits pointillés : solution pour un système homogène. Traits pleins : construction de Gibbs. Les points A et B marquent les frontières de la région de coexistence.

Chapitre 5

Séparation de phase par décomposition spinodale

La construction de Gibbs employée pour obtenir le diagramme de phase de la matière nucléaire (*cf* chapître 4) donne la description de l'équilibre d'un système. Cet équilibre est atteint si l'espace des phases compatible avec les contraintes est entièrement exploré : l'entropie correspondante est alors maximisée. Si la surface d'entropie du système homogène présente une région convexe, ce qui constitue une anomalie de courbure, la maximisation a lieu par mélange de phase de façon à remplacer cette surface par son enveloppe concave, qui donne l'entropie du système à l'équilibre.

Prenons maintenant le cas d'une transition de phase au cours d'une réaction rapide, dans laquelle un système homogène se trouve brusquement placé en condition d'instabilité : par exemple, l'expansion rapide d'un milieu dense et uniforme ou le refroidissement soudain d'un alliage binaire. Dans une telle situation, deux phases peuvent être formées et isolées l'une de l'autre avant que l'équilibre ne soit atteint, c'est à dire qu'elles cessent d'échanger de la matière avant que la distribution de configurations correspondant à une entropie maximale ne soit atteinte. Les caractéristiques des phases formées dépendent alors de la dynamique conduisant une instabilité du système initial à se développer jusqu'à entraîner la décomposition du système. Ce mode de séparation de phase hors équilibre est ce que l'on appelle la décomposition spinodale [Cho04, Wen98, ColM05]. Les explosions de supernovae et les collisions d'ions lourds sont des phénomènes pouvant impliquer une transition liquide-gaz de la matière nucléaire suivant un tel mécanisme. Une des questions concernant l'interprétation de la multifragmentation en termes de transition de phase porte sur la réalisation de l'équilibre thermodynamique au cours d'une collision d'ions lourds. La décomposition spinodale offre un cadre théorique pour l'étude de la transition liquide-gaz au cours d'une telle collision dans le cas où cet équilibre n'est pas atteint.

Les caractéristiques d'un système ayant subi une décomposition spinodale ne sont pas entièrement déterminées par les propriétés du diagramme de phase. Un traitement complet demande de suivre la dynamique d'amplification des fluctuations au cours du temps. Différentes méthodes sont proposées dans la littérature pour la réalisation d'une telle étude [Cho04, Gua97, Bar05, ColM05]. Dans le cadre de cette thèse, nous nous sommes intéressés à la détermination des conditions de cette décomposition. Nous allons présenter ici une étude de la région spinodale et des propriétés d'instabilité dans un cadre thermodynamique, en nous appuyant sur des critères liés à la topologie de la surface d'énergie libre (nous évoquerons dans les perspectives la prise en compte d'effets dynamiques dans une approche RPA). Il est possible dans ce cadre d'obtenir des prédictions sur les propriétés du système final, en faisant l'hypothèse que l'instabilité amplifiée conserve la mémoire de l'instant initial de son développement. Cette hypothèse signifie que la dynamique de séparation des phases est dominée par l'amplification d'un mode instable particulier prenant naissance dans un système homogène de température et densité déterminées. Il s'agit d'une approximation raisonnable si la dynamique d'évolution des fluctuations (que l'on sait être exponentielle en temps [Cho04]) est suffisamment rapide. Pour le cas d'un système se séparant en deux phases avant d'avoir pu équilibrer aucun degré de liberté, la décomposition spinodale devrait être étudiée dans l'espace $(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p)$. L'équilibre thermique peut cependant être supposé réalisé dès le départ de la réaction, car il se fait dans l'espace des impulsions. L'agitation thermique se répartit uniformément en un temps très bref devant le temps de réaction, ce qui permet de définir une température pour l'ensemble du système homogène instable qui constitue le point de départ de la transition. Nous pouvons ainsi étudier l'instabilité du système en considérant son énergie libre $f = -Ts_c$ (où s_c est l'entropie contrainte par unité de volume, liée à l'entropie par $s_c = s - \beta \mathcal{H}$).

L'énergie libre du système homogène forme dans le plan des densités une surface $f^h(\rho_n, \rho_p)$. La construction de Gibbs sur cette surface revient à réaliser, en plus de l'équilibre thermique, les équilibres mécanique et chimique qui donnent à chacune des phases une densité et une composition déterminées. Cet équilibre a lieu cette fois-ci dans l'espace des positions. Il comporte un réarrangement complet du système pour accéder aux partitions d'entropie maximale, qui nécessitent pour se mettre en place des mouvements macroscopiques de matière. Ces déplacements s'effectuent sur des temps pouvant être très supérieurs au temps caractéristique de l'interaction nucléaire. Si cet équilibre n'est pas atteint, la séparation de phase s'effectue par décomposition spinodale : elle est alors gouvernée par les propriétés de l'instabilité locale, données par la courbure de la surface $f^h(\rho_n, \rho_p)$.

Dans ce chapître, nous présentons le mécanisme de décomposition spinodale pour la matière nucléaire étudiée en champ moyen. Les résultats obtenus sont comparés avec les prédictions pour un système équilibré. Trois paramétrisations différentes ont été employées pour l'interaction effective de Skyrme (*cf* partie 3.1.2). La force Sly230a [Cha97] est utilisée comme référence. Elle est comparé au cas d'une autre interaction réaliste, SGII [Ngu81a], et à celui d'une paramétrisation plus simple, SIII [Bei75]. Ceci nous a permis de vérifier la robustesse des caractères observés.

Avant d'exposer les résultats obtenus, nous allons consacrer une première partie à la définition de la région spinodale, ainsi qu'à l'étude de cette région au moyen d'une matrice de courbure. Afin d'appliquer ces notions à l'étude de la matière nucléaire, le calcul de la matrice de courbure de $f^h(\rho_n, \rho_p)$ sera également détaillé.

5.1 Définition de la région spinodale

La région spinodale contient l'ensemble des points pour lesquels l'entropie comporte une anomalie de courbure (c'est à dire une « intrusion convexe », ainsi que l'on dénotera une région dont la convexité est inversée par rapport à la condition de stabilité). Pour un espace des observables à plusieurs dimensions, l'entropie forme une surface dont les propriétés peuvent être étudiées suivant une infinité de directions différentes. Un point donné de cette surface présente une convexité dès lors que l'on peut trouver une direction suivant laquelle la courbure est positive. Ceci peut être déterminé en étudiant la matrice de courbure, dont les modes propres donnent les valeurs extrêmales de la courbure en un point ainsi que les directions dans lesquelles elles sont obtenues. C'est ce qui sera présenté au cours cette partie.

Avant cela, commençons par situer la région spinodale par rapport à la région de coexistence qui a été établie dans le chapître 4.

5.1.1 Spinodale et coexistence

Nous employons les termes de « courbe de coexistence » et « courbe spinodale » pour désigner les frontières respectives de chacune de ces régions. La courbe de coexistence est formée par les deux branches, liquide et gaz, auxquelles appartiennent les différents couples de phases en coexistence. La courbe spinodale relie l'ensemble des points pour lesquels la courbure maximale de l'entropie est nulle, englobant la partie de l'espace où se trouve une direction de courbure anormale.

Par construction, la région spinodale se trouve comprise dans la région de coexistence. La distinction entre ces deux régions est familière en thermodynamique. Elle s'illustre particulièrement bien sur la construction de Maxwell (cf figure 5.1) : les deux points d'équilibre (donnés par la

loi des aires égales), sont situés de part et d'autre de la région spinodale (intervalle sur lequel la pente est renversée). Cette distinction peut s'exprimer par la notion d'instabilité locale ou globale. Ainsi, la région spinodale contient les points pour lesquels l'état homogène présente une instabilité locale, alors que la région de coexistence contient aussi des états homogènes métastables, c'est à dire localement stables mais globalement instables. Le terme d'instabilité locale signifie qu'il suffit d'une infime fluctuation de l'état homogène pour entraîner une augmentation de l'entropie. Cette fluctuation est alors amplifiée pour donner lieu à une séparation de phase.



FIG. 5.1 – Illustration de la relation entre coexistence et région spinodale (instabilité locale), pour le cas à une dimension. x est l'observable extensive paramètre d'ordre de la transition. S(x) (en bas) représente l'entropie et $\lambda(x)$ (en haut) sa dérivée. (λ est aussi le paramètre intensif associé à x.) L'intrusion convexe dans S(x) est corrigée par construction de Maxwell, définissant une région de coexistence qui encadre la région d'instabilité locale.

Afin de relier la notion d'instabilité qui vient d'être énoncée à la définition de la région spinodale donnée plus haut, il convient d'apporter une précision concernant les fluctuations considérées. Seule la notion de fluctuation thermodynamique est exploitable dans la présente approche, par opposition aux fluctuations de taille finie dont les effets seront présentés ultérieurement (cela fera l'objet du chapître 6). Dans le cadre de notre étude, nous disposons en effet de l'expression de l'entropie pour un système infini et homogène, s^h , formant une surface de l'espace des observables. Nous pouvons en déduire par interpolation linéaire l'entropie d'un système composé de deux phases, à condition que chacune constitue un système infini et homogène. C'est ainsi que l'équilibre de phase a pu être défini par la construction de Gibbs. Cette même approche peut maintenant être utilisée pour décrire l'effet de fluctuations thermodynamiques. De telles fluctuations consistent en une décomposition d'un système homogène en deux régions dont les positions dans l'espace des observables diffèrent de façon infinitésimale. L'entropie résultante s'obtient alors par interpolation linéaire entre les deux points voisins correspondants de la surface s^h .

La figure 5.1 illustre la variation de l'entropie due à une fluctuation thermodynamique. On voit ainsi que l'instabilité locale d'un système homogène équivaut à une convexité de l'entropie au point considéré, c'est à dire une anomalie de la courbure locale. C'est le cas, par définition, des points de la région spinodale. Pour un point de la région métastable, l'entropie est concave, ce qui rend l'état homogène localement stable. En revanche, du fait de l'existence d'une convexité dans la surface d'entropie globale, la configuration d'entropie maximale au point considéré est un équilibre de phase. L'état homogène est donc globalement instable, mais de grandes fluctuations sont nécessaires pour initier une transition.

Observons pour finir le cas des points critiques, définis par la jonction des branches liquide et gaz de la courbe de coexistence (points où la distinction entre les deux phases à l'équilibre disparaît). En ces points particuliers, la tangente à la courbe de coexistence définit une direction de courbure nulle de l'entropie : ils appartiennent donc également à la région spinodale. Comme celle-ci est incluse dans la région de coexistence, il en résulte deux propriétés :

- les points critiques sont communs à la courbe de coexistence et à la courbe spinodale;
- les deux courbes sont tangentes au niveau des points critiques.

La réciproque de ce raisonnement permet une autre définition des points critiques, en tant que points communs aux deux courbes. En effet, une interpolation linéaire de l'entropie entre un point de la courbe spinodale et un quelconque autre point est toujours inférieure à l'enveloppe concave de la surface, ainsi qu'on peut le voir sur le cas à une dimension de la figure 5.1. Par conséquent, seuls les points critiques sont communs à la courbe de coexistence et à la courbe spinodale. On a donc deux définitions équivalentes des points critiques :

- Points de jonction des branches de la courbe de coexistence;
- Points communs aux frontières de la coexistence et de la spinodale.

Remarquons que ces deux définitions fournissent deux méthodes numériques différentes pour la détermination des points critiques. La méthode décrite dans la partie 4.1.4 fait usage de la seconde définition. Une autre méthode de détermination est possible en utilisant la première définition : elle met en jeu un ajustage par loi de puissance des équilibres de phases obtenus lorsque les deux branches se rapprochent (cf partie 4.3).

5.1.2 Matrice de courbure

La détermination de la région spinodale consiste à repérer les points pour lesquels il existe une direction de convexité de l'entropie. Les informations requises pour une telle étude sont contenues dans la matrice de courbure de l'entropie. C'est ce que nous allons voir dans cette partie, qui introduit dans un contexte général la notion de matrice de courbure.

Prenons le cas d'un système à N observables. Son état est repérée par une position $\vec{x} = (x_1, ..., x_N)$ dans l'espace à N dimensions des variables extensives. Considérons dans cet espace la direction définie par le vecteur normé $\vec{u} = (u_1, ..., u_N)$. Le long de cette direction, pour une variation $d\vec{x} = \vec{u}dx$ de la position du système, chacune des observables x_k varie de $dx_k = u_k dx$. Ainsi, considérant une fonction de l'espace des observables $y(x_1, ..., x_N)$, la dérivée et la courbure de cette fonction suivant la direction \vec{u} sont données par :

$$\frac{dy}{dx} = \sum_{i} \frac{\partial y}{\partial x_i} u_i \tag{5.1}$$

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \sum_{ij} \frac{\partial^2 y}{\partial x_j \partial x_i} u_i u_j \tag{5.2}$$

Les différentes dérivées secondes partielles forment les éléments de la matrice de courbure C, à savoir $C_{ij} = \partial^2 y / \partial x_j \partial x_i$. En notant X la représentation de la direction \vec{u} en vecteur colonne et \tilde{X} sa transposée

$$X = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} \quad \tilde{X} = \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_N \end{pmatrix}$$

La courbure suivant cette direction s'exprime sous forme matricielle comme

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \tilde{X}CX\tag{5.3}$$

Plaçons-nous dans la base propre de la matrice C. Celle-ci étant symétrique réelle, ses N vecteurs propres sont orthogonaux. Ces vecteurs propres définissent un ensemble d'observables $\{x'_k\}$ correspondant à leurs directions respectives, et chaque valeur propre est donnée par $C'_k = d^2 y/d(x'_k)^2$. On voit alors que la courbure de la fonction y dans une direction quelconque $\vec{u} = (u'_1, ..., u'_N)$ s'exprime comme une combinaison linéaire des différentes valeurs propres :

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \sum_k C'_k (u'_k)^2 \tag{5.4}$$

Ainsi, en notant les valeurs propres extrêmales $C_{<}$ (pour la plus petite) et $C_{>}$ (pour la plus grande), on voit que pour toute direction \vec{u} considérée la courbure de y est encadrée par ces valeurs

$$C_{<} \le \frac{d^2 y}{dx^2} \le C_{>} \tag{5.5}$$

les égalités n'étant réalisées que pour les directions propres respectives $\vec{u}_{<}$ et $\vec{u}_{>}$ (ou, en cas de dégénérescence des valeurs propres extrêmales, pour des directions appartenant aux sous-espaces respectifs $\mathcal{E}_{<}$ et $\mathcal{E}_{>}$).

Ainsi, la courbure minimale (resp. maximale) de la fonction $y(x_1, ..., x_N)$ de l'espace des observables est donnée par la valeur propre $C_{<}$ (resp. $C_{>}$) de sa matrice de courbure, et s'obtient dans la direction du vecteur propre associé. Ceci permet de déterminer l'appartenance d'un point à la région spinodale. Celle-ci est définie par une anomalie de courbure du potentiel thermodynamique y (intrusion convexe ou concave). Il suffit alors de vérifier que l'une des valeurs propres extrêmales possède le signe anormal, à savoir $C_{>} > 0$ pour une intrusion convexe (cas de l'entropie), et $C_{<} < 0$ pour une intrusion concave (cas de l'énergie libre).

5.1.3 Direction d'instabilité

La matrice de courbure nous permettra de définir et d'étudier la direction d'instabilité, qui est la direction de séparation de phase associée au mécanisme de décomposition spinodale.

Considérons la surface d'énergie libre exprimée pour un système homogène, f^h . En chacun de ses points, on définit la matrice de courbure de cette surface, dont la valeur propre minimale est $C_{<}$. Nous venons de voir que la région spinodale correspond aux points tels que $C_{<} < 0$, pour lesquels le système est localement instable. Cela signifie qu'une infime fluctuation thermodynamique peut permettre au système de réduire son énergie libre. C'est en fait le cas si cette fluctuation s'effectue dans une direction de l'espace des observables suivant laquelle, au point considéré, l'énergie libre est concave.

En un point de la surface, les différentes directions faisant apparaître une instabilité locale sont comprises dans un cône que l'on appelle « cône d'instabilité ». L'ouverture de ce cône dépend des valeurs propres de la matrice de courbure. Elle est caractérisée par un angle que l'on peut exprimer par la proportion de l'espace qu'il recouvre, notée Ω_{inst} . Cette quantité est comprise entre 0 (pour une ouverture nulle) et 1 (pour une ouverture recouvrant toutes les directions de l'espace). L'ouverture Ω_{inst} s'annule à la frontière de la région spinodale. A l'intérieure de cette région, elle prend une valeur finie. S'il existait des points tels que $C_> < 0$, on aurait en ces points $\Omega_{inst} = 1$, c'est à dire une instabilité locale dans toutes les directions de l'espace des observables. Lorsque l'on a $C_{<}$ et $C_{>}$ de signe opposé, comme c'est le cas dans la région spinodale de la matière nucléaire, on a $0 < \Omega_{inst} < 1$, cette ouverture reflétant le poids relatif des valeurs propres stable et instable de la matrice de courbure.

Ainsi, de façon générale, l'instabilité locale d'un état homogène peut être révélée par différentes compositions de fluctuations thermodynamiques. Il suffit que la fluctuation considérée suive une direction de l'espace des phases appartenant au cône d'instabilité.

Parmi ces différentes directions possibles pour initier une transition de phase, le mécanisme de décomposition spinodale privilégie celle qui correspond à l'anomalie de courbure maximale [Cho04]. C'est ce qui définit la direction d'instabilité, qui est alors donnée par le vecteur propre \vec{u}_{\leq} associé à la valeur propre minimale C_{\leq} de l'énergie libre.

5.2 Spinodale de la matière nucléaire

Appliquons maintenant le formalisme de la matrice de courbure au cas de la matière nucléaire. Il s'agit d'étudier les propriétés locales de la surface d'énergie libre obtenue dans le plan des densités de neutrons et protons (ρ_n, ρ_p) , pour une température donnée. On pourra alors en déduire la région de ce plan pour laquelle un système homogène est susceptible de se séparer en deux phases par décomposition spinodale, ainsi que la direction de séparation de phase associée à ce mécanisme.

5.2.1 Matrice de courbure de l'énergie libre

Pour un système de matière nucléaire homogène, la densité d'énergie libre $f^h(\rho_n, \rho_p)$ a pour matrice de courbure :

$$C_{MN}^{h} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^{2} f}{\partial \rho_{p}^{2}} & \frac{\partial^{2} f}{\partial \rho_{p} \partial \rho_{n}} \frac{\partial \rho_{p}}{\partial \rho_{p}} \\ \frac{\partial^{2} f}{\partial \rho_{p} \partial \rho_{n}} & \frac{\partial^{2} f}{\partial \rho_{p}^{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial \mu_{n}}{\partial \rho_{n}} & \frac{\partial \mu_{n}}{\partial \rho_{p}} \\ \frac{\partial \mu_{p}}{\partial \rho_{n}} & \frac{\partial \mu_{p}}{\partial \rho_{p}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} c_{nn} & c_{np} \\ c_{pn} & c_{pp} \end{pmatrix}$$
(5.6)

où l'égalité des dérivées secondes croisées $\partial^2 f / \partial \rho_n \partial \rho_p = \partial^2 f / \partial \rho_p \partial \rho_n$ implique la symétrie $c_{pn} = c_{np}$. Il en résulte des valeurs propres réelles et des vecteurs propres orthogonaux. Ceci est une propriété des matrices de courbure en général.

Les valeurs propres c_i sont les solutions de l'équation

$$(c_{nn} - c_i)(c_{pp} - c_i) - c_{np}^2 = 0$$
(5.7)

soit une équation du second degré dont le discriminant Δ est positif :

$$\Delta = (c_{nn} + c_{pp})^2 - 4(c_{nn}c_{pp} - c_{np}^2) = (c_{nn} - c_{pp})^2 + 4c_{np}^2$$
(5.8)

ce qui garantit l'existence de deux valeurs propres réelles données par

$$c_{<,>} = \frac{c_{nn} + c_{pp}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{c_{nn} - c_{pp}}{2}\right)^2 + c_{np}^2}$$
(5.9)

Chaque valeur propre c_i est associée à un vecteur propre \vec{u}_i dont la direction est caractérisée par le rapport de variation entre les deux densités :

$$\kappa_i = \left(\frac{\delta\rho_n}{\delta\rho_p}\right)_i = \frac{c_{np}}{c_i - c_{nn}} = \frac{c_i - c_{pp}}{c_{np}} \tag{5.10}$$

avec i = <,>. La symétrie de la matrice donne à ces vecteurs propres la propriété d'être orthogonaux ¹.

Les considérations que nous avons énoncées jusqu'à présent à propos de C_{MN}^h sont générales pour toute matrice de courbure d'une surface analytique. S'agissant du cas de la matière nucléaire, quelques remarques peuvent être ajoutées.

Tout d'abord, la plus grande valeur propre $c_>$ est toujours positive. En effet, l'énergie de symétrie est positive, et elle correspond à la courbure de la surface d'énergie dans la direction ρ_3 . Il en résulte que seule la courbure minimale $c_<$ est susceptible d'être négative. Dans ce cas, les directions de courbure négative sont comprises dans un cône d'instabilité dont nous pouvons exprimer l'ouverture en fonction des valeurs $c_<$ et $c_>$.

Considérons une direction \vec{u} formant un angle α avec la direction d'instabilité $\vec{u}_{<}$, soit $\vec{u} = \vec{u}_{>} \cos \alpha + \vec{u}_{<} \sin \alpha$. La courbure dans cette direction est donnée par

$$c_u = c_> \cos^2 \alpha + c_< \sin^2 \alpha. \tag{5.14}$$

Une direction de courbure nulle est donc donnée par un angle α_0 tel que :

$$\tan \alpha_0 = \pm \sqrt{-\frac{c_<}{c_>}} \tag{5.15}$$

soient deux directions symétriques par rapport à la direction d'instabilité, à condition que les valeurs propres extrêmales soient de signe opposé. Les limites de la définition de cet angle s'atteignent pour l'annulation d'une des deux valeurs propres : $\alpha_0 \rightarrow 0$ pour $c_{<} \rightarrow 0$ (frontière de la région spinodale), et $\alpha_0 \rightarrow \pi/2$ pour $c_{>} \rightarrow 0$, le cône d'instabilité recouvrant tout l'espace si les deux valeurs propres sont négatives (ce dernier cas ne se produit pas pour la matière nucléaire, comme nous l'avons discuté plus haut).

Dans le cas $c_{<}c_{>} < 0$ (région spinodale), l'ouverture du cône s'exprime comme la fraction de l'espace qu'il recouvre :

$$\Omega_{inst} = \frac{2\alpha_0}{\pi} = \frac{2\arctan(\sqrt{-c_})}{\pi}$$
(5.16)

On voit que cette ouverture reflète le poids relatif des valeurs propres de la courbure. Ainsi, pour le cas où $c_{>} \gg |c_{<}|$, on a $\Omega_{inst} \ll 1$, soit un cône d'instabilité très focalisé autour de la direction d'instabilité $\vec{u}_{<}$.

Une autre remarque concernant la spécificité de la matrice de courbure de la matière nucléaire est son comportement à l'approche des bords du plan des densités. L'annulation de la densité d'une des espèces ρ_q signifie que la dérivée seconde de l'énergie libre $\partial \mu_q / \partial \rho_q$ devient infinie. Ainsi, pour la matière de neutrons, la direction de courbure minimale $\vec{u}_{<}$ est suivant l'axe des neutrons. Sa représentation par le rapport $\delta \rho_n / \delta \rho_p$ conduit à une divergence. Par le raisonnement symétrique, on voit que ce rapport s'annule pour les points de l'axe des protons.

Une telle divergence pour la représentation des modes propres peut être évitée par un changement de variable. Ainsi, il est utile de passer dans le repère isoscalaire-isovecteur, dont les axes sont suivant les observables $\rho = \rho_n + \rho_p$ (densité isoscalaire) et $\rho_3 = \rho_n - \rho_p$ (densité isovecteur). Ce repère a l'avantage de correspondre à la symétrie du problème, l'inversion neutron-proton étant un renversement de l'axe ρ_3 . De plus, le caractère essentiellement isoscalaire de la transition de

$$\frac{c_{np}}{c_{<} - c_{nn}} = \frac{c_{nn} - c_{>}}{c_{np}}$$
(5.11)

Étant données les relations suivantes entre les deux valeurs propres

$$c_{<}c_{>} = c_{nn}c_{pp} - c_{pn}c_{np} \tag{5.12}$$

$$c_{>} + c_{<} = c_{nn} + c_{pp} \tag{5.13}$$

¹Il est simple de le vérifier dans le cas d'une matrice à deux dimensions, pour laquelle on rétablit la distinction entre les deux éléments c_{np} et c_{pn} . La condition d'annulation du produit scalaire $\vec{u}_{<} \cdot \vec{u}_{>}$ est $\kappa_{<} = -1/\kappa_{>}$, qui s'écrit

la condition (5.11) est vérifiée à condition d'avoir $c_{np} = c_{pn}$. Les vecteurs propres d'une matrice de courbure sont donc orthogonaux.

phase liquide-gaz de la matière nucléaire est connu ² [MarJ03, Bar05], à savoir que les phases formées se distinguent en majeure partie par leur densité totale ρ . C'est un aspect que nous avons pu voir ressortir lors de l'étude du diagramme des phases effectuée dans le chapître 4.

Il est donc approprié de représenter la direction d'instabilité par le rapport $\mathcal{K} = \delta \rho_3 / \delta \rho$, exprimant son écart à la direction isoscalaire. (Inversement, la direction de courbure maximale étant proche de l'axe isovecteur, une représentation adaptée en serait le rapport $\delta \rho / \delta \rho_3$). L'écart à la direction isoscalaire est relié au rapport $\kappa = \delta \rho_n / \delta \rho_p$ par :

$$\mathcal{K} = \frac{\delta\rho_3}{\delta\rho} = \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}.\tag{5.17}$$

Par la suite, la direction d'instabilité sera exprimée par le rapport $(\delta \rho_3/\delta \rho)_{<}$ et notée \mathcal{K}_{ds} (« ds » signifiant « décomposition spinodale »).

La valeur de $\kappa_{<}$ étant donnée par la relation (5.10), on obtient \mathcal{K}_{ds} en fonction des éléments de la matrice de courbure dans le plan des densités neutrons-protons :

$$\mathcal{K}_{ds} = \left(\frac{\delta\rho_3}{\delta\rho}\right)_{<} = \frac{c_{np} + c_{nn} - c_{<}}{c_{np} - c_{nn} + c_{<}} \tag{5.18}$$

Les quantités auxquelles nous nous intéressons pour l'étude de la décomposition spinodale sont maintenant définies. Dans la suite de cette partie, nous allons présenter comment elles peuvent être calculées, avant de donner une première représentation de la région spinodale de la matière nucléaire.

5.2.2 Calcul de la courbure

En chaque point du plan (ρ_n, ρ_p) , la pente de f^h dans la direction ρ_i est donnée par la valeur que prend la surface du potentiel chimique $\mu_i(\rho_n, \rho_p)$ en ce point. C'est ainsi que l'on obtient l'expression de la matrice de courbure de $f^h(\rho_n, \rho_p)$, donnée par la relation (5.6), en fonction des dérivées premières des potentiels chimiques, notées $\{\partial \mu_i/\partial \rho_j\}$.

Nous allons maintenant présenter le calcul de ces dérivées. Nous avons vu dans le chapître 3 comment les potentiels chimiques peuvent être déterminés, pour une température donnée, en chaque point du plan (ρ_n, ρ_p) . En résumé, le potentiel chimique μ_i associé à l'espèce i = n, p s'exprime comme $\mu_i = \mu'_i + U_i$, où μ'_i est tel que la distribution de Fermi-Dirac s'écrit $n_i(p) = 1/[1 + exp(p^2/2m_i^* - \mu'_i)]$, et U_i est le potentiel de champ moyen auquel sont soumises les particules de type i.

Il est important de remarquer que la dérivée partielle $\{\partial \mu_i / \partial \rho_j\}$ utilisée dans l'expression de la matrice de courbure C_{NM}^h est à prendre au sens de pente de la surface $\mu_i(\rho_n, \rho_p)$ dans la direction ρ_j . Cette précision est apportée car l'expression de μ_i , rappelée plus haut, met en jeu le potentiel de champ moyen qui dérive de la fonctionnelle d'énergie \mathcal{H} qui dépend explicitement des densités de particules et d'énergie cinétique. On a ainsi $U_i = \partial \mathcal{H} / \partial \rho_i(\rho_n, \rho_p, \tau_n, \tau_p)$. Cependant, pour une température donnée, ces quatre variables ne sont pas indépendantes. Chaque densité cinétique τ_i est déterminée en chaque point du plan (ρ_n, ρ_p) par l'intermédiaire de μ'_i suivant une relation auto-cohérente. Ainsi, la variation du potentiel chimique μ_i dans le plan des densités s'exprime par :

$$\frac{\partial \mu_i}{\partial \rho_j} = \frac{\delta \mu'_i}{\delta \rho_j} + \frac{\delta U_i}{\delta \rho_j} = \frac{\delta \mu'_i}{\delta \rho_j} + \frac{\partial U_i}{\partial \rho_j} + \sum_k \frac{\partial U_i}{\partial \tau_k} \frac{\delta \tau_k}{\delta \rho_j}$$
(5.19)

où l'on connaît les dérivées partielles de U_i comme fonctions des densité ρ_k et τ_k (*cf* chapître 3). Nous allons maintentant voir comment exprimer les contributions $\delta \mu'_i / \delta \rho_j$ et $\delta \tau_k / \delta \rho_j$ suivant que l'on traite le problème à température nulle ou finie.

²Tenant compte du caractère isoscalaire de la transition, nous pouvons remarquer que la relation $|c_{<}| \ll c_{>}$ évoquée plus haut peut être reliée à une relation entre incompressibilité et énergie de symétrie, $|\frac{\partial^2 E}{\partial \rho^2}| \ll \frac{\partial^2 E}{\partial \rho^2}$.

Calcul à température nulle

A température nulle, les intégrales de Fermi donnant ρ_i et τ_i se résolvent analytiquement en fonction de μ'_i , conduisant aux expressions :

$$\mu_i' = (3\pi^2 \rho_i)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_i^*} = (3\pi^2 \rho_i)^{2/3} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau_i}(\rho_n, \rho_p)$$
(5.20)

$$\tau_i = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \rho_i^{5/3} \tag{5.21}$$

qui sont alors de simples fonctions des densités ρ_n et ρ_p . Dans l'expression de μ'_i , le terme de masse effective donné par $\partial \mathcal{H}/\partial \tau_i$ ne dépend que des densités $\{\rho_k\}$ car la dépendance en $\{\tau_k\}$ de la fonctionnelle \mathcal{H} est linéaire. On en déduit :

$$\frac{\delta\mu_i'}{\delta\rho_j} = (3\pi^2\rho_i)^{2/3} \left(\frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial\rho_j\partial\tau_i} + \frac{2\delta_{ij}}{3\rho_i}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\tau_i}\right)$$
(5.22)

$$\frac{\delta\tau_k}{\delta\rho_j} = (3\pi^2\rho_k)^{2/3}\delta_{jk} \tag{5.23}$$

On obtient ainsi les dérivées $\partial \mu_i / \partial \rho_j$, soit la matrice de courbure de la densité l'énergie libre f à T = 0.

A titre de remarque, nous pouvons vérifier qu'une dérivation équivalente est obtenue en partant de l'idée qu'à température nulle, f n'est rien d'autre que la densité d'énergie \mathcal{H} . La pente de la surface $\mathcal{H}(\rho_n, \rho_p)$ dans la direction ρ_i est en effet donnée par

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \rho_i} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \rho_i} + \sum_k \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau_k} \frac{\delta \tau_k}{\delta \rho_i}$$
(5.24)

Des équations (5.20) et (5.21), on déduit les relations suivantes pour T = 0:

$$\mu_i' = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau_i} \frac{\delta \tau_i}{\delta \rho_i} \tag{5.25}$$

$$\frac{\delta \tau_i}{\delta \rho_{j \neq i}} = 0 \tag{5.26}$$

ce qui permet de reconnaître la pente exprimée par l'équation (5.24) comme le potentiel chimique μ_i .

Calcul à température finie

A température finie, la relation self-consistante existant entre densités et potentiels chimiques demeure sous une forme intégrale, que nous rappelons ici :

$$\rho_k = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_k^*}{\beta\hbar^2}\right)^{3/2} \mathcal{I}_1(\mu_k')$$
(5.27)

$$\tau_k = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_k^*}{\beta\hbar^2}\right)^{5/2} \mathcal{I}_2(\mu_k')$$
(5.28)

où \mathcal{I}_1 et \mathcal{I}_2 sont des intégrales de Fermi définies par

$$\mathcal{I}_{1}(\mu) = \int \frac{x^{1/2} dx}{1 + exp(x - \beta\mu)} \quad et \quad \mathcal{I}_{2}(\mu) = \int \frac{x^{3/2} dx}{1 + exp(x - \beta\mu)} \quad , \tag{5.29}$$

qui ne dépendent que de la valeur $\beta\mu$ fixée. Leur variation avec μ s'exprime en fonction de deux intégrales notées \mathcal{J}_1 et \mathcal{J}_2 , telles que

$$\frac{d\mathcal{I}_1}{d\mu} = \frac{\beta}{2}\mathcal{J}_1 \quad \frac{d\mathcal{I}_2}{d\mu} = \frac{\beta}{2}\mathcal{J}_2.$$
(5.30)

Ces nouvelles intérgales ont pour expression

$$\mathcal{J}_{1}(\mu) = \int \frac{x^{1/2} dx}{1 + \cosh(x - \beta\mu)} \quad et \quad \mathcal{J}_{2}(\mu) = \int \frac{x^{3/2} dx}{1 + \cosh(x - \beta\mu)}$$
(5.31)

Remarquons qu'il existe une relation directe entre \mathcal{J}_2 et \mathcal{I}_1 . L'intégration par parties de \mathcal{I}_1 montre en effet que

$$\mathcal{J}_2 = 3\mathcal{I}_1 \tag{5.32}$$

ce qui permettra d'obtenir les expressions recherchées en fonction de seulement trois intégrales, $\mathcal{I}_1, \mathcal{I}_2$ et \mathcal{J}_1 .

Dans le but d'alléger les notations, nous noterons par la suite \mathcal{I}_{1k} pour désigner $\mathcal{I}_1(\mu'_k)$, de même pour \mathcal{J}_{1k} et \mathcal{I}_{2k} . Dans le même but, nous posons pour exprimer le terme de masse effective apparaissant dans les équations (5.27) et (5.28) la quantité

$$W_k(\rho_n, \rho_p) = \frac{\beta \hbar^2}{2m_k^*} = \beta \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau_k}$$
(5.33)

Pour obtenir les quantités qui nous intéressent, à savoir les contributions $\delta \mu'_i / \delta \rho_j$ et $\delta \tau_k / \delta \rho_j$ de l'équation (5.19), il est utile de réexprimer les équations (5.27) et (5.28) sous la forme suivante :

$$\mathcal{I}_{1k} = 2\pi^2 \rho_k W_k^{3/2} \tag{5.34}$$

$$\tau_k = \frac{\rho_k}{W_k} \frac{\mathcal{I}_{2k}}{\mathcal{I}_{1k}} \tag{5.35}$$

L'équation (5.34) montre que la variation de \mathcal{I}_{1k} avec la densité ρ_i est donnée par

$$\frac{\delta \mathcal{I}_{1k}}{\delta \rho_j} = \mathcal{I}_{1k} \left(\frac{\delta_{jk}}{\rho_k} + \frac{3}{2W_k} \frac{\partial W_k}{\partial \rho_j} \right).$$
(5.36)

On en déduit la première des quantités recherchées :

$$\frac{\delta\mu'_i}{\delta\rho_j} = \left(\frac{d\mathcal{I}_{1i}}{d\mu'_i}\right)^{-1} \frac{\delta\mathcal{I}_{1i}}{\delta\rho_j} = \frac{2\mathcal{I}_{1i}}{\beta\mathcal{J}_{1i}} \left(\frac{\delta_{ij}}{\rho_i} + \frac{3}{2W_i}\frac{\partial W_i}{\partial\rho_j}\right).$$
(5.37)

Afin d'obtenir la variation de τ_k avec ρ_j exprimons déjà la variation du rapport $\mathcal{I}_{2k}/\mathcal{I}_{1k}$:

$$\frac{d}{d\mu_k'} \left(\frac{\mathcal{I}_{2k}}{\mathcal{I}_{1k}}\right) = \frac{\beta}{2} \left(\frac{\mathcal{J}_{2k}}{\mathcal{I}_{1k}} - \frac{\mathcal{I}_{2k}\mathcal{J}_{1k}}{\mathcal{I}_{1k}^2}\right) = \frac{\beta}{2} \left(3 - \frac{\mathcal{I}_{2k}\mathcal{J}_{1k}}{\mathcal{I}_{1k}^2}\right)$$
(5.38)

$$\frac{\delta}{\delta\rho_j} \left(\frac{\mathcal{I}_{2k}}{\mathcal{I}_{1k}}\right) = \frac{d}{d\mu'_k} \left(\frac{\mathcal{I}_{2k}}{\mathcal{I}_{1k}}\right) \frac{\delta\mu'_k}{\delta\rho_j} = \left(\frac{3\mathcal{I}_{1k}}{\mathcal{J}_{1k}} - \frac{\mathcal{I}_{2k}}{\mathcal{I}_{1k}}\right) \left(\frac{\delta_{jk}}{\rho_k} + \frac{3}{2W_k}\frac{\partial W_k}{\partial\rho_j}\right)$$
(5.39)

En utilisant le résultat (5.39) dans la dérivation de l'équation (5.35), on obtient finalement la seconde quantité recherchée :

$$\frac{\delta \tau_k}{\delta \rho_j} = \frac{3\mathcal{I}_{1k}}{\mathcal{J}_{1k}} \frac{\delta_{jk}}{W_k} + \frac{\rho_k}{W_k^2} \frac{\partial W_k}{\partial \rho_j} \left(\frac{9\mathcal{I}_{1k}}{2\mathcal{J}_{1k}} - \frac{5\mathcal{I}_{2k}}{2\mathcal{I}_{1k}}\right)$$
(5.40)

Il nous est maintenant possible de calculer les dérivées $\partial \mu_i / \partial \rho_j$ telles qu'elles sont définies par l'équation (5.19), donnant les dérivées secondes de la surface densité d'énergie libre $f^h(\rho_n, \rho_p)$. En résumé, ce calcul fait intervenir les quantités $\delta \mu'_i / \delta \rho_j$ et $\delta \tau_k / \delta \rho_j$, que l'on vient d'obtenir d'une part à température nulle (équations (5.22) et (5.23)) et d'autre part à température finie (équations (5.37) et (5.40)). Dans ce dernier cas, les dérivées de μ_i mettent en jeu une nouvelle intégrale, $\mathcal{J}_1(\mu'_k)$ (équation (5.31)), qu'il faut calculer numériquement pour chaque point (ρ_n, ρ_p) avec k = n, p. Ayant ainsi montré comment se calculent les éléments de la matrice de courbure de f^h dans le plan (ρ_n, ρ_p) , nous allons présenter dans la suite de ce chapître les résultats apportés par son étude.

5.3 Coexistence de phase *versus* décomposition spinodale

La matrice de courbure de l'énergie libre $f^h(\rho_n, \rho_p)$ contient les propriétés de l'instabilité locale à la naissance de la séparation de phase. En chaque point du plan des densités, pour une température donnée, elle donne ainsi accès à trois informations caractérisant une éventuelle décomposition spinodale. Chacune fera par la suite l'objet d'une partie. Tout d'abord, l'appartenance d'un point à la région spinodale dépend du signe de la valeur propre minimale $c_{<}$. S'il est négatif, le système homogène correspondant peut connaître une décomposition spinodale. Si un tel mécanisme se produit, la séparation de phase est caractérisée par deux autres informations : le vecteur propre $\vec{u}_{<}$ donne la direction de séparation de phase, et la courbure dans la direction $\vec{u}_{>}$ est reliée aux fluctuations de la composition des phases.

5.3.1 Représentation de la région d'instabilité

Commençons par situer la région spinodale obtenue par l'étude du signe de la courbure minimale $c_{<}(\rho_n, \rho_p)$ par rapport à la région de coexistence qui avait été construite dans le chapître 4. La figure 4.2 de ce chapître illustrait la construction de l'équilibre par l'enveloppe concave de la surface d'entropie contrainte $s_c = -\beta f^h$, pour une température de 10MeV. Ici, la figure 5.2 reprend cette image en projection sur le plan (ρ_n, ρ_p) en ajoutant la courbe spinodale, qui encercle la région de convexité de s_c . Rappelons que cette convexité peut être suggérée par des lignes de niveaux grâce à une correction de pente sur la surface, $s_c \rightarrow s_c - \beta \mu_{ts}\rho$, qui ne modifie pas les propriétés de courbure auxquelles nous nous intéressons.



FIG. 5.2 – Régions de transition dans le plan des densités pour T = 10 MeV. Les lignes de niveaux (fines) rappellent l'intrusion convexe dans la surface d'entropie contrainte s_c . Les courbes fermées épaisses sont les frontières respectives de la région de coexistence (courbe extérieure) et de la région spinodale (courbe intérieure). Les deux courbes sont tangentes aux points critiques.

L'influence du choix de la paramétrisation de Skyrme employée pour modéliser l'interaction nucléaire est illustrée par la figure 5.3 où les courbes de coexistence et spinodale sont tracées pour trois forces différentes, Sly230a, SGII et SIII. Nous pouvons voir que les régions obtenues sont quasiment identiques en forme et en extension pour les deux interactions réalistes (Sly230a et SGII), tandis que SIII présente un comportement atypique lorsque l'on s'écarte de la matière symétrique, comme il pouvait être attendu d'une paramétrisation non construite pour décrire la dépendance en isospin. L'allure de ces courbes est donnée d'une part dans le plan (ρ_n, ρ_p), et d'autre part en représentation ($\rho, Z/A$) où sont mises en relief les dépendances en densité totale et en asymétrie. On voit que le résultat obtenu avec SIII se distingue essentiellement par une très faible dépendance en asymétrie de l'extension en densité de ces régions. Alors que pour Sly230a et SGII la densité aux frontières des deux régions diminue rapidement du côté liquide lorsque Z/As'écarte de sa valeur symétrique 0.5, elle reste quasiment contante pour SIII : on observe même une légère augmentation de la densité à la frontière spinodale. Ceci avait été observé dans la référence [MarJ03].



FIG. 5.3 – Courbes de coexistence et spinodale à T = 10 MeV pour trois paramétrisations de Skyrme. A gauche : dans le plan (ρ_n, ρ_p) . A droite : avec le changement de variable $(\rho = \rho_n + \rho_p, Z/A = \rho_p/\rho)$.

La dépendance en température de la région spinodale est donnée par la figure 5.4, où sont tracées en représentation $(\rho, Z/A)$ les courbes spinodales obtenues pour plusieurs températures fixées entre T = 0 et $T = T_u$ (température critique ultime, marquant la disparition de l'instabilité au point critique de la matière symétrique). Cette figure fait écho à son homologue pour la région de coexistence représentée au chapître 4 (figure 4.12).

Une comparaison entre les deux diagrammes est donnée par la partie droite de la figure 5.4 pour un nombre réduit de températures, T = 0, 4 et 10 MeV. Rappelons que la courbe de coexistence à T = 0 présente une région de singularité, à savoir que les bords du plans participent à certains équilibres (on a alors des points à Z/A = 0 ou 1, ainsi que des points de densité nulle). La courbe spinodale en revanche n'atteint jamais les bords, bien qu'elle atteigne du côté gaz des densités tellement faibles qu'elles ne se distinguent pas des axes du graphique présenté. En effet, la disparition de l'une des espèces se traduit par une courbure infinie dans la direction correspondante. Ceci est vrai aussi bien à température nulle qu'à température finie. A température finie, on a $\mu_q \to -\infty$ pour $\rho_q \to 0$, impliquant une dérivée infinie de μ_q dans la direction ρ_q . A température nulle, on voit par l'équation (5.22) que la dérivée $\partial \mu_q / \partial \rho_q$ fait intervenir la quantité $+\rho_q^{-1/3}$, soit encore une fois une divergence positive pour $\rho_q \rightarrow 0$. Le minimum de courbure en un point du bord s'obtient par conséquent suivant l'axe de l'espèce restante, ce qui nous ramène au cas d'un fluide pur : la non-saturation d'un tel fluide signifie que l'énergie libre est convexe dans cette direction. Ceci implique que la courbure minimale sur les bords du plan des densités est positive.

La comparaison entre les courbes de coexistence et spinodale à T = 0 fait apparaître du côté liquide une importante région de métastabilité aux environs de la matière symétrique. Comme les courbes de coexistence et spinodale doivent se rejoindre pour une certaine asymétrie (celle des points critiques), ceci implique une allure différente de la dépendance en Z/A pour les deux types de courbes. Ainsi, on voit que cette dépendance est beaucoup plus importante pour la courbe de coexistence : la courbe spinodale évoluant dans le même sens mais plus lentement. La même observation vaut pour la dépendance en température, les deux courbes devant se réduire ensemble en un point critique ultime pour la température T_u . Considérant le côté gaz, on voit que les courbes sont toutes deux faiblement dépendantes en asymétrie. L'existence d'un maximum d'asymétrie à densité sous-critique est plus visible pour la courbe de coexistence, mais il se produit également pour la spinodale. Les maxima des deux courbes forment deux lignes tracées sur la partie gauche de la figure. A partir du point critique ultime de densité ρ_u où les deux lignes se confondent avec celle des points critiques, toutes deux se déplacent vers les basses densités. Leur comportement se distingue pour les températures plus élevées où les maxima de la spinodale s'alignent sur l'axe de densité ρ_u , la courbe spinodale adoptant alors une forme quasiment ellipsoïdale centrée sur le point critique ultime.



FIG. 5.4 – Dépendance en température de la région spinodale représentée dans le plan ($\rho = \rho_n + \rho_p, Z/A = \rho_p/\rho$), avec la paramétrisation Sly230a. A gauche : courbes spinodales. Trait épais : T = 0. Pointillés : T = 4, 6, 8*MeV*. Traits fins : T = 10, 10.5, 11, 11.5, 12, 12.5, 13, 13.5, 14*MeV*. Trois lignes particulières sont tracées sur ce diagramme. La ligne des points critiques (points noirs) est commune à la spinodale et à la coexistence. Le trait plein (sans points) marque la ligne de Z/A maximal pour la région spinodale. Le trait en pointillés rappelle la ligne de Z/A maximal pour la région de coexistence, qui avait été obtenue a partir du diagramme d'équilibre. A droite : comparaison avec la région de coexistence pour trois de ces températures.

Maintenant que la région d'instabilité spinodale est localisée, intéressons-nous à la représentation de l'instabilité spinodale en termes d'ouverture du cône d'instabilité Ω_{inst} . Pour un point du plan (ρ_n, ρ_p) , ce cône recouvre l'ensemble des directions instables, symétriquement réparties de part et d'autre de la direction de courbure minimale $\vec{u}_{<}$. Une représentation en est donnée par la figure 5.5 pour trois températures différentes, en un même point. Ce point étant choisi sur l'axe de matière symétrique, l'axe de symétrie du cône correspond ici à à l'axe isoscalaire. Nous étudierons dans la partie suivante la dépendance en asymétrie de la direction d'instabilité sur laquelle est centrée le cône. Pour l'instant, nous considérons seulement son ouverture Ω_{inst} , définie comme la fraction d'espace recouvert par l'angle correspondant.



FIG. 5.5 – Représentation du cône d'instabilité en un point de matière symétrique de densité $\rho = 0.05 fm^{-3}$. Trois températures sont considérées. Les courbes fermées donnent les régions spinodales correspondantes. Les directions isoscalaire (ρ) et isovecteur (ρ_3) du plan sont indiquées.

L'étude de l'ouverture d'instabilité Ω_{inst} est présentée sur les figures 5.6 et 5.7, qui présentent différents aspects de la dépendance de Ω_{inst} (densité, asymétrie, température et interaction effective). La première série (figure 5.6) est réalisée pour trois températures différentes (T = 0, 4, 10 MeV), avec une même paramétrisation (Sly230a). Sur la partie du haut, une représentation de Ω_{inst} en lignes de niveaux en donne une image globale dans l'ensemble du plan (ρ_n, ρ_p). La ligne de niveau 0 coïncide par définition avec la courbe spinodale. Les valeurs les plus élevées sont obtenues à température nulle. Elles se rencontrent dans la partie de faible densité de la région spinodale (ce trait étant d'autant plus marqué que la température est basse). Au centre et en bas de la figure, des coupes de la surface $\Omega_{inst}(\rho_n, \rho_p)$ sont données le long de trois axes de densité totale constante, exposant la dépendance en asymétrie. Les profils obtenus forment des arches, avec une évolution lente aux alentours de la symétrie et une chute quasi-verticale aux frontières de la région spinodale suivant un comportement qui s'adoucit avec l'augmentation de la température.

La seconde série d'études de Ω_{inst} (figure 5.7) compare les résultats obtenus avec différentes paramétrisations de Skyrme. La partie du haut donne la représentation globale en lignes de niveaux pour T = 4MeV. La différence de forme que présentent ces lignes tracées avec SIII ne fait que répercuter la différence déjà observée pour la courbe spinodale. Pour ce qui est des valeurs atteintes par Ω_{inst} , peu de différence est observée. Il en est de même pour les profils en densités présentés sur la partie centrale pour trois températures différentes. Afin d'explorer la dépendance en température et en asymétrie, la partie du bas montre l'évolution du maximum d'ouverture Ω_{max} recontré le long d'un axe de fraction protonique Z/A constante en fonction de la température. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs de Z/A. Leur intersection avec l'axe horizontal donne la température pour laquelle Z/A est l'asymétrie maximale de la courbe spinodale. Dans le cas Z/A = 0.5, il s'agit de la température critique T_u . Cette température est plus élevée pour SIII (17.96MeV contre 14.54MeV pour Sly230a et 14.46MeV pour SGII). A une contraction près de l'échelle des températures pour le cas SIII, les courbes obtenues présentent la même allure pour les trois forces.

Ces résultats permettent de constater l'étroitesse relative du cône d'instabilité, reflétant selon l'équation 5.16 la valeur du rapport $|c_{<}/c_{>}|$: le fait d'observer des valeurs de Ω_{inst} inférieures à 0.5 (soit un cône focalisé sur la direction d'instabilité) signifie que ce rapport est toujours inférieur



FIG. 5.6 – Ouverture du cône d'instabilité Ω_{inst} sur l'ensemble de la région spinodale, pour trois températures, avec la paramétrisation Sly230a. En haut : région de coexistence et spinodale, avec Ω_{inst} donnée en lignes de niveaux. Les valeurs des niveaux sont régulièrement espacées de 0.05. Au centre et en bas : dépendance en asymétrie pour trois axes à densité totale ρ fixée. L'asymétrie est exprimée d'une part avec $\rho_3 = \rho_n - \rho_p$, d'autre part avec $Z/A = \rho_p/\rho$.

à 1.

Si l'ouverture des cônes d'instabilité nous a ici donné un moyen de représenter la région d'instabilité locale du système de façon plus approfondie que par sa seule frontière (région spinodale), c'est à la seule direction de courbure minimale (correspondant à l'axe de symétrie du cône) que nous allons nous intéresser dans la partie suivante pour l'étude de la direction de séparation de phase.

5.3.2 Direction de séparation de phase

Nous avions remarqué en étudiant la coexistence de phase dans le chapître 4 que deux phases à l'équilibre n'ont pas la même fraction isotopique Z/A, à l'exception du cas d'un système de matière nucléaire symétrique. Ce phénomène est appelé « distillation de l'isospin » [Mul95]. Il a beacoup été étudié ces dernières années en raison de son observation dans les données des expériences de multifragmentation [Xu85, Bar05, Tsa01a, Ono03]. Les collisions d'ions lourds mettent en effet en jeu des systèmes asymétriques tels que Z/A < 0.5, pour lesquels on observe la formation d'un gaz encore plus riche en neutrons que le système global formé dans la collision. Dans ce contexte, il est particulièrement intéressant de considérer l'influence du mécanisme de transition sur la direction de séparation des deux phases dans le plan (ρ_n, ρ_p) , cette direction donnant à terme la composition du liquide et du gaz qui en résultent. L'étude de la distillation d'isospin dans la multifragmentation met en jeu les effets coulombiens et la statistique des systèmes de taille finie, qui sortent du cadre de cette étude. Cependant, l'étude de la matière infinie permet de faire apparaître des comportements typiques liés à l'interaction nucléaire, qui sont importants à prendre en compte pour l'interprétation des observations expérimentales. Nous verrons d'ailleurs dans le chapître 6, où sont introduits des effets coulombiens et de taille finie, que les résultats obtenus ici peuvent être repris intégralement dans le cadre d'une étude plus complexe.

Ainsi, nous allons pour l'instant étudier la direction de séparation de phase thermodynamique donnée par l'étude de la surface d'énergie libre $f^h(\rho_n, \rho_p)$ décrivant la matière nucléaire infinie et homogène pour une température donnée. En particulier, nous nous intéressons à l'influence de la réalisation de l'équilibre sur le phénomène de distillation de l'isospin. Si l'équilibre est atteint, un système de densités et température données (ρ_n, ρ_p, T) est séparé en deux phases correspondant à deux points fixés du plan des densités : ils sont déterminés par la construction de Gibbs sur la surface f^h . Le segment joignant ces deux points donne une direction du plan que nous appellerons « direction d'équilibre ». Si la séparation de phase s'effectue par décomposition spinodale, nous pouvons faire l'hypothèse qu'elle suit la direction donnée par le vecteur propre \vec{u}_{\leq} de la matrice de courbure de f^h , assimilée au mode instable dominant : cette direction est dite « direction d'instabilité ».

Remarquons ici que, d'une façon générale, la direction de séparation de phase (\vec{u}_{sep}) est associée à une observable (ρ_{sep}) dont la valeur distingue les deux phases résultantes. Cette observable peut être identifiée avec le paramètre d'ordre de la transition.

Une autre remarque concerne la direction d'équilibre. De même que la direction d'instabilité, la direction d'équilibre peut être définie comme vecteur propre d'une matrice de courbure : il s'agit dans ce cas de la courbure de la surface convexifiée $f^{eq}(\rho_n, \rho_p)$ obtenue par la construction de Gibbs. En analogie avec le cas de la surface f^h , nous appellerons C_{MN}^{eq} la matrice de courbure associée à f^{eq} ; ses modes propres seront notés $(c_{eq<}, \vec{u}_{eq<})$ et $(c_{eq>}, \vec{u}_{eq>})$. La construction de l'enveloppe convexe impose une courbure minimale positive ou nulle en chaque point. Dans la région de coexistence, f^{eq} est une surface réglée formée de segments de droites joignant des couples de phases à l'équilibre. La direction de chaque segment de droite est ce que nous avions défini plus haut comme la direction d'équilibre. Il s'agit pour f^{eq} d'une direction de courbure nulle : elle coïncide nécessairement avec la direction de courbure minimale, étant donnée l'élimination de toute intrusion concave par construction de f^{eq} . La direction d'équilibre est donc donnée par le vecteur propre $\vec{u}_{eq<}$.

La comparaison entre direction d'équilibre et d'instabilité est illustrée sur la figure 5.8 pour un point du plan des densités, à une température de 10MeV. Ce point est situé dans la région d'instabilité, et correspond à un système riche en neutrons (Z/A = 0.3). Il en résulte à l'équilibre



FIG. 5.7 – Ouverture du cône d'instabilité pour trois paramétrisations de Skyrme. En haut : région de coexistence et spinodale à T = 4MeV, avec Ω_{inst} donné en lignes de niveaux. Les valeurs des niveaux sont régulièrement espacées de 0.05. Au centre : profil en densité de Ω_{inst} le long de l'axe de la matière symétrique, pour trois températures différentes. En bas : dépendance en température du maximum de Ω_{inst} , pour différentes valeurs de Z/A. En trait plein : Z/A = 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1. En pointillés : Z/A = 0.08, 0.06, 0.04, 0.02.
une décomposition de phase faisant apparaître une distillation d'isospin, avec un liquide et un gaz situés de part et d'autre de la droite à Z/A constant (Z/A = 0.3). La direction d'équilibre se situe entre la droite à Z/A constant et la direction isoscalaire, parallèle à l'axe des ρ (c'est à dire ρ_3 constant). Ceci correspond à la formation d'un gaz plus asymétrique que le liquide, ainsi qu'il était déjà observé lors de l'étude de la coexistence de phase. Cette caractéristique résulte de la minimisation de l'énergie de symétrie dans la partie dense.

Considérons maintenant le cas de la décomposition spinodale. Contrairement à la situation précédente, seule la direction de séparation de phase peut être obtenue par l'étude de la surface d'énergie libre f^h à laquelle nous avons accès. Cette surface, décrivant un système homogène, contient l'information sur l'instabilité à l'instant initial de la formation des phases. Leur évolution ultérieure hors équilibre nécessite une description dynamique qui n'est pas traitée ici. Il a été montré que la direction de séparation est déterminée par l'instabilité initiale [Cho04, Wen98], en revanche la composition finale des phases dépend des densités atteintes par chacune d'entre elles à l'instant où elles cessent d'échanger toute matière (instant dit « de freeze-out » dans la terminologie de la multifragmentation [GroD97, Par05, Pia05, Tab06]), ce qui donne toute une gamme de possibilités le long de la direction instable. Par conséquent, nous la représentons simplement par le vecteur propre $\vec{u}_{<}$ de la matrice de courbure de f^h au point considéré. Il apparaît pour notre illustration que la direction obtenue est à nouveau intermédiaire entre les deux axes particuliers, Z/A constant et isoscalaire. Cette fois-ci, l'écartement par rapport à l'axe Z/A constant est encore plus marqué, ce qui signifie que la distillation d'isospin est plus importante pour une décomposition spinodale que pour une transition de phase à l'équilibre.

Nous pouvons maintenant nous demander comment évolue cette tendance lorsque l'on considère différents points de la région spinodale. Les figures 5.9 à 5.12 nous permettent d'étudier cette question.

Dans un premier temps, nous utilisons la force Sly230a en considérant trois températures différentes (T = 0, 4, 10 MeV). La figure 5.9 donne une représentation globale des directions dans le plan des densités. Différentes directions d'équilibre sont données par des segments reliant une sélection de couples de phases en coexistence. Les directions d'instabilité sont quant à elles visua-lisées suivant un mode de représentation analogue à celui des lignes de champ, faisant apparaître ce que l'on pourrait appeler des « lignes d'instabilité ». Partant d'un point donné, chacune de ces lignes se construit par itération en suivant la direction d'instabilité locale jusqu'à un point voisin. La direction d'instabilité est ainsi donnée en chaque point d'une telle ligne par sa tangente. La vision globale donnée par ces figures permet de constater que les directions de séparation de phase, à l'équilibre comme en décomposition spinodale, restent toutes deux proches de la direction isoscalaire sur l'ensemble de la région instable.

Afin de permettre une comparaison quantitative, les directions sont par la suite représentées par le rapport associé $\mathcal{K} = \delta \rho_3 / \delta \rho$, explicité par l'équation (5.17), qui donne l'écart par rapport à la direction isoscalaire. Cette quantité peut en principe varier entre zéro (cas d'une transition purement isoscalaire) et l'infini (cas d'une transition purement isovecteur). Le second cas correspondrait à une séparation entre entre neutrons et protons à densité constante, ce qui n'est pas un cas physique. Comme nous venons de l'observer, en pratique \mathcal{K} est toujours un petit nombre (compris entre -1 et 1), qu'il donne la direction d'équilibre (\mathcal{K}_{eq}) ou de décomposition spinodale (\mathcal{K}_{ds}).

Ceci se comprend en considérant que l'interaction nucléaire est plus attractive dans le canal d'interaction proton-neutron que neutron-neutron ou proton-proton. Cette propriété se déduit de la valeur élevée de l'énergie de symétrie, que le principe de Pauli ne suffit pas à reproduire. Rappelons que, pour un système constitué de différents types de fermions, le principe d'exclusion de Pauli implique un terme d'énergie de symétrie positif, indépendamment de l'interaction entre constituants : en effet, une asymétrie entre les différents niveaux de Fermi se traduit par une augmentation de l'énergie cinétique du système. Dans le cas de la matière nucléaire cependant, il est connu que le terme dû au principe d'exclusion ne contribue que pour la moitié environ de l'énergie de symétrie. La valeur totale de cette énergie ne peut être reproduite qu'en prenant en compte la plus grande attractivité du canal neutron-proton de l'interaction nucléaire. On sait d'ailleurs que la matière neutronique est non-liée, ce qui équivaut à une énergie libre convexe en



FIG. 5.8 – Directions de séparation de phase, à T = 10 MeV pour la paramétrisation Sly230a. Courbes fermées : coexistence et spinodale. Les directions sont comparées en un point tel que $\rho = \rho_c$ (densité des points critiques) et Z/A = 0.3. La direction de séparation de phase à l'équilibre est donnée par le segment épais rejoignant deux points en coexistence. La direction d'instabilité locale est indiquée par la double flèche. La directions de rapport Z/A constant (trait plein) et la direction isoscalaire (pointillés) sont données.



FIG. 5.9 – Directions de séparation de phase représentées dans l'ensemble du plan des densités, pour trois températures avec la paramétrisation Sly230a. Courbes fermées : coexistence et spinodale, avec points critiques. Segments de droites : différents équilibres de phase. Lignes : lignes d'instabilité, dont la tangente en chaque point donne la direction d'instabilité (poursuivies en pointillés en dehors de la spinodale).

 ρ_n pour $\rho_p = 0$. En fait, toutes les interactions réalistes donnent une courbure c_{nn} positive pour l'ensemble du plan (ρ_n, ρ_p) [MarJ03] (la symétrie par échange neutron-proton implique que l'on a de même $c_{pp} > 0$).

Dans un modèle physique réaliste, une phase liée présentant un mélange des deux fluides doit donc être privilégiée. En particulier une direction de séparation de phase de type isovecteur est exclue. Le caractère isoscalaire de la transition et de l'instabilité est aujourd'hui unanimement reconnu [Bar05, Cho04], cependant le sujet a longtemps été débattu dans la littérature. Le plan des densités étant à deux dimensions, l'existence de deux spinodales (mécanique et chimique) avait été envisagée [Mul95, Li97, Bar02] : l'unicité de l'instabilité est aujourd'hui démontrée [MarJ03].

La figure 5.10 donne l'évolution des rapports $\mathcal{K} = \delta \rho_3 / \delta \rho$ obtenus le long de l'axe joignant les points critiques, en fonction de l'asymétrie donnée par ρ_3 / ρ . Dans cette représentation la direction de Z/A constant (donnée par $\mathcal{K}_{Z/A}$) évolue linéairement, de par la relation

$$\mathcal{K}_{Z/A} = (\delta\rho_3/\delta\rho)_{Z/A=cte} = \rho_3/\rho. \tag{5.41}$$

Les directions de séparation de phase \mathcal{K}_{eq} et \mathcal{K}_{ds} vérifient quant à elles certaines contraintes. Tout d'abord, l'invariance par échange neutron-proton de l'interaction de Skyrme assure que les graphes obtenus sont antisymétriques par rapport à l'origine $\rho_3/\rho = 0$. Elle impose également que toutes les directions deviennent purement isoscalaires dans le cas de la matière symétrique, autrement dit les trois courbes passent par l'origine du repère ($\rho_3/\rho, \mathcal{K}$) = (0,0).

Une autre contrainte, portant sur \mathcal{K}_{ds} , vient du comportement de la matrice de courbure aux bords du plan des densités. L'axe de densité totale constante ρ est limité par les deux bords du plan tels que $\rho_3 = \pm \rho$. En chacune de ces bornes, la direction de courbure minimale est donnée par l'axe de l'espèce restante (la courbure dans la direction orthogonale à cet axe devenant alors infinie, ainsi qu'il a été discuté dans la partie 5.3.1). Cela signifie que la valeur de \mathcal{K}_{ds} y rejoint celle de $\mathcal{K}_{Z/A}$, à savoir ± 1 . Les bords du plan se situent au-delà de la région spinodale dans laquelle le rapport \mathcal{K}_{ds} prend la signification de direction d'instabilité. Cependant, la contrainte énoncée se répercute sur l'allure attendue dans la région qui nous intéresse. Pour cette raison, la représentation de \mathcal{K}_{ds} est prolongée jusqu'aux bords du plan.

Finalement, considérant l'axe de densité critique $\rho = \rho_c$, l'on sait que les directions d'équilibre et d'instabilité doivent se rejoindre aux points critiques. En effet, nous avons vu qu'en ces points les courbes de coexistence et spinodale sont tangentes. La direction d'équilibre y est tangente à courbe de coexistence et correspond à une direction de courbure nulle, soit la direction de courbure minimale pour un point de la spinodale.

Tenant compte des différentes contraintes relevées, ainsi que de la relation $0 < \mathcal{K}_{ds} < \mathcal{K}_{eq} < \mathcal{K}_{Z/A}$ observée sur la figure 5.8, nous pouvons nous attendre à l'évolution qui est effectivement observée sur la figure 5.10, à savoir :

- des directions de séparation de phase de type isoscalaire ($|\mathcal{K}| < 1$)
- la formation d'une phase liquide plus symétrique que la phase gazeuse ($\mathcal{K} < \mathcal{K}_{Z/A}$ pour $\rho_3 > 0$ et inversement)
- l'accentuation de la distillation d'isospin pour le mécanisme de décomposition spinodale $(\mathcal{K}_{ds} < \mathcal{K}_{eq} \text{ pour } \rho_3 > 0 \text{ et inversement})$
- le passage par un maximum de la différence $|\mathcal{K}_{eq} \mathcal{K}_{ds}|$ pour une valeur d'asymétrie intermédaire entre le point de matière symétrique et chaque point critique.



FIG. 5.10 – Directions de séparation de phase, pour trois températures avec la paramétrisation Sly230a : évolution du rapport $\mathcal{K} = \delta \rho_3 / \delta \rho$ associé aux différentes directions le long de l'axe des points critiques, en fonction de l'asymétrie du système ρ_3/ρ . Ligne droite : direction de Z/Aconstant. Courbe pleine : direction d'instabilité, poursuivie en pointillés en dehors de la spinodale jusqu'aux bords du plan des densités. Courbe de tirets : direction d'équilibre.

Une seconde série d'étude des différentes directions est donnée par la figure 5.11. Cette foisci, la température est fixée à T = 4MeV et les résultats sont obtenus pour différentes forces de Skyrme. La partie du haut reprend la représentation des directions dans le plan des densités qui a été utilisée pour la figure 5.9. Les parties du centre et du bas donnent l'évolution des rapports \mathcal{K} le long de droites de densité totale ρ constante. Les droites choisies ne passent pas par les points critiques : la forme des courbes obtenues présente alors une contrainte de moins, à savoir que \mathcal{K}_{eq} et \mathcal{K}_{ds} n'ont a priori pas de raison de se rejoindre en un point particulier (hormis à l'origine).

Pour la partie du centre, une valeur sous-critique $\rho = 0.05 fm^{-3}$ est fixée pour l'étude des trois forces. On observe alors un croisement des valeurs \mathcal{K}_{eq} et \mathcal{K}_{ds} peu avant la sortie de la région d'instabilité. Dans ce petit domaine, l'équilibre de phase conduit à une distillation d'isospin plus importante que la direction spinodale.

Pour la partie du bas, nous nous intéressons au cas d'une densité sur-critique. Une valeur de $\rho = 0.09 fm^{-3}$ est fixée pour Slya et SGII, de façon à traverser la région spinodale. Pour SIII, la densité critique est plus élevée : le cas sur-critique est étudié avec $\rho = 0.12 fm^{-3}$. Cet axe ne traverse pas la région spinodale, qui de façon atypique est quasiment inexistante au delà de l'axe des points critiques. L'allure des courbes obtenues avec SIII est à mettre en relation avec la représentation des directions dans le plan des densités, donnée sur la partie haute de la figure : une autre particularité de ce cas est le fait que les lignes de courbure minimale se confondent quasiment

avec les segments d'équilibres à partir de la densité critique. Pour le cas des forces réalistes, nous observons que dans le cas d'une densité fixée sur-critique la région de coexistence prend fin avant que les directions \mathcal{K}_{eq} et \mathcal{K}_{ds} n'aient pu se croiser : soit une distillation de l'isospin toujours plus importante en décomposition spinodale.

Une autre façon de représenter la tendance observée sur les figures 5.9, 5.10 et 5.11 est de considérer la quantité $\Delta \mathcal{K} = \mathcal{K}_{eq} - \mathcal{K}_{ds}$ dans le plan des densités, où elle peut être définie pour l'ensemble de la région de coexistence. Une telle représentation est donnée en lignes de niveaux sur la figure 5.12, pour Sly230a et une température de 4MeV. Nous commentons ici la moitié riche en neutrons du plan, dont l'autre moitié se déduit par symétrie. Deux lignes de niveau 0 apparaissent, l'une correspondant naturellement à l'axe de la matière symétrique, et la seconde, peu visible dans cette échelle de résolution, longeant de près et de l'intérieur la frontière spinodale sous-critique pour disparaître en rencontrant le point critique. Les autres lignes correspondent à des niveaux positifs, ce qui montre la dominance de la région telle que $\Delta \mathcal{K} > 0$. L'allure de ces lignes montre que pour chaque densité totale fixée le maximum se rencontre non loin de l'axe Z/A = 0.23. Pour l'ensemble du plan, $\Delta \mathcal{K}(\rho_n, \rho_p)$ présente un maximum à densité sous-critique.

Ainsi nous avons pu, en nous basant sur les propriétés de la surface d'énergie libre d'un système homogène, déterminer d'une part la position des phase à l'équilibre (construction de Gibbs) et d'autre part la direction de séparation associée à la décomposition spinodale (vecteur propre de la matrice de courbure). La comparaison entre les directions d'équilibre et d'instabilité fait apparaître qu'elles sont proches, présentant la même dominance isoscalaire qui tend à les écarter toutes deux de la direction de Z/A constant pour un système asymétrique. Il en résulte dans les deux cas un phénomène de distillation de l'isospin, aboutissant à une phase dense plus symétrique. Pour la plus grande partie de la région instable, on observe (en termes de direction de séparation) l'accentuation de ce phénomène pour une décomposition spinodale, en comparaison avec l'équilibre.

5.3.3 Fluctuations d'isospin

Dans les parties précédentes, nous avons vu comment la matrice de courbure de la surface $f^h(\rho_n, \rho_p)$ permet de définir la région d'instabilité spinodale, la courbure minimale et la direction d'instabilité en chaque point de cette région. Nous avons également remarqué que la direction d'équilibre est donnée par le vecteur propre $\vec{u}_{eq<}$ de la matrice de courbure de la surface convexifiée f^{eq} . En tout cela, seul a été considéré le mode propre de courbure minimale. Nous allons maintenant nous intéresser à l'information portée par l'autre mode propre, correspondant à la courbure maximale : $(c_>, \vec{u}_>)$. Afin de distinguer le cas d'un système homogène ou en équilibre de phase, nous appellerons respectivement $(c_{h<}, \vec{u}_{h<}; c_{h>}, \vec{u}_{h>})$ et $(c_{eq<}, \vec{u}_{eq<}; c_{eq>}, \vec{u}_{eq>})$ les modes propres des matrices de courbures de f^h et f^{eq} .

Le mode propre de courbure maximale pour la surface d'énergie libre prend une signification physique en termes de fluctuations de la composition des phases, dès lors que l'on se place dans un ensemble grand-canonique. Nous avons en effet établi dans la partie 2.1.3 que la distribution de probabilité associée à un ensemble d'observables densités $\{x_k = X_k/V\}$ dont la valeur moyenne est contrôlée par leurs paramètres intensifs associés $\{\lambda_k\}$ s'exprime comme

$$P_{\{\lambda_k\}}(\{x_k\}) \propto e^{V\left(s(\{x_k\}) - \sum_k \lambda_k x_k\right)}$$
(5.42)

avec $s({x_k}) = S({X_k})/V$, S étant l'entropie du système.

Dans le cas d'un système infini, cette distribution est caractérisée par une valeur unique

$$P_{\{\lambda_k\}}(\{x_k\}) \propto \prod_k \delta(x_k - x_k^0)$$
(5.43)

où les valeurs x_k^0 correspondent au maximum de la fonction $s(\{x_k\}) - \sum_k \lambda_k x_k$. Ceci donne une relation univoque entre l'ensemble de variables intensives et les observables qui leur sont associées. Considérant en revanche un système de taille finie V, pour un ensemble intensif les observables n'ont pas une valeur fixée mais sont distribuées selon la relation (5.42). Pour la suite, afin d'étudier les effets de fluctuations nous supposerons un système de volume fini, mais suffisamment grand



FIG. 5.11 – Directions de séparation de phase, pour T = 4MeV avec trois paramétrisations de Skyrme. En haut : équilibres de phase et lignes d'instabilité. Au centre et en bas : évolution du rapport $\mathcal{K} = \delta \rho_3 / \delta \rho$ associé aux différentes directions le long d'axes de densité totale fixée. Direction de Z/A constant $\mathcal{K}_{Z/A}$: ligne droite. Direction d'instabilité \mathcal{K}_{ds} : courbe pleine prolongée en pointillés au-dela de la région spinodale, les points marquant la frontière spinodale. Direction d'équilibre \mathcal{K}_{eq} : courbe de tirets, les points marquant la frontière de la région de coexistence. Au centre : évolution le long d'un axe de densité sous-critique. En bas : évolution le long d'un axe de densité sur-critique.



FIG. 5.12 – Comparaison de la direction de séparation de phase à l'équilibre et en décomposition spinodale. La différence $\Delta \mathcal{K} = \mathcal{K}_{eq} - \mathcal{K}_{sd}$ est représentée en lignes de niveaux dans le plan des densités. Les niveaux correspondants sont régulièrement espacées de 0.05. Les courbes de coexistence et spinodale sont également tracées, avec les points critiques.

pour pouvoir être décrit suivant certaines approximations de la limite thermodynamique. Ainsi, la contribution de l'interface entre les phases est toujours négligée, conservant la propriété d'additivité des fonctions thermodynamique et donc la validité de la construction de Gibbs. Les distributions d'observables ne sont quant à elles plus des distributions de Dirac, mais pour un grand système peuvent être approximées par des distributions gaussiennes. En effet, dans ce cas la distribution de probabilité est très piquée autour du maximum situé au point ($\{x_k^0\}$). Cela signifie que la partie non-négligeable de la distribution concerne le proche voisinage de ce point, permettant de remplacer la fonction contenue dans l'exponentielle par son développement limité au second ordre autour de ce point :

$$s(\lbrace x_k \rbrace) - \sum_k \lambda_k x_k \simeq \left[s(\lbrace x_k^0 \rbrace) - \sum_k \lambda_k x_k^0 \right] + \sum_{ij} \frac{(x_i - x_i^0)(x_j - x_j^0)}{2} \left(\frac{\partial^2 s}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{\lbrace x_k^0 \rbrace}$$
(5.44)

où l'on voit apparaître les éléments de la matrice de courbure de s. Ces éléments sont réexprimés en utilisant la notation σ_{ij} telle que :

$$\frac{1}{\sigma_{ij}^2} = -\left(\frac{\partial^2 S}{\partial X_i \partial X_j}\right)_{\{X_k^0\}} = -V\left(\frac{\partial^2 s}{\partial x_i \partial x_j}\right)_{\{x_k^0\}}$$
(5.45)

Dans l'approximation du développement (5.44) au second ordre, la distribution (5.42) s'écrit :

$$P_{\{\lambda_k\}}(\{x_k\}) \propto e^{-\sum_{ij} \frac{(x_i - x_i^0)(x_j - x_j^0)}{2\sigma_{ij}^2}}$$
(5.46)

Les quantités σ_{ij} sont les éléments de la matrice variance-covariance Σ , qui correspond ici à l'inverse de la matrice de courbure de l'entropie. Afin d'exprimer la relation (5.46) sous forme matricielle, introduisons le vecteur **x** tel que :

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 - x_1^0 \\ \vdots \\ x_n - x_n^0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \tilde{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} x_1 - x_1^0, & \cdots, & x_n - x_n^0 \end{pmatrix}$$
(5.47)

La distribution de probabilité (5.46) s'écrit alors :

$$P_{\{\lambda_k\}}(\{x_k\}) \propto e^{-\frac{\mathbf{x}\Sigma^{-1}\mathbf{x}}{2}}$$
(5.48)

Il est toujours possible de décomposer \mathbf{x} sur la base propre de Σ . Supposons pour simplifier que les directions associées aux différentes observables $\{x_k\}$ correspondent à cette base propre. La distribution de probabilité que nous étudions s'exprime alors comme un produit de gaussiennes :

$$P_{\{\lambda_k\}}(\{x_k\}) \propto \prod_i e^{-\frac{\left(x_i - x_i^0\right)^2}{2\sigma_i^2}}$$
(5.49)

Chaque quantité σ_i correspond à la variance de la distribution en x_i , dont l'écart quadratique moyen est donné par $\sigma_i^2 = \langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2$. Suivant l'argument du développement de Taylor (5.44), elle s'identifie avec l'inverse de la courbure de $s(\{x_k\})$ dans la direction x_i :

$$1/\sigma_i^2 = -Vc_i$$
avec $c_i = \frac{\partial^2 s}{\partial x_i^2}$
(5.50)

Ceci établit la relation entre courbure de l'entropie et fluctuations.

Tournons-nous maintenant vers l'étude de la matière nucléaire. Dans l'ensemble grand-canonique, les observables $(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p)$ forment des distributions associées à une valeur donnnée des paramètres intensifs (β, μ_n, μ_p) . Nous nous intéressons à la distribution en (ρ_n, ρ_p) . Celle-ci s'obtient par intégration sur \mathcal{H} de la distribution $P_{\beta,\mu_n,\mu_p}(\mathcal{H}, \rho_n, \rho_p)$: pour une distribution gaussienne en \mathcal{H} , ceci revient (à un facteur près) à prendre la valeur la plus probable de \mathcal{H} . L'étude de la distribution en (ρ_n, ρ_p) se rapporte alors à l'étude de la surface d'énergie libre $f(\rho_n, \rho_p)$, selon

$$P_{\beta,\mu_n,\mu_p}(\rho_n,\rho_p) \propto e^{-\beta V (f(\rho_n,\rho_p) - (\mu_n \rho_n + \mu_p \rho_p))}$$
(5.51)

Dans le cadre d'une approximation gaussienne, la largeur de cette distribution fait donc intervenir la matrice de courbure de l'énergie libre $f(\rho_n, \rho_p)$. Les vecteurs propres orthogonaux $\vec{u}_{<}$ et $\vec{u}_{>}$ de cette matrice forment une base du plan des densités. Par rapport à la base (\vec{u}_n, \vec{u}_p) correspondant aux axes ρ_n et ρ_p , la base propre est tournée d'un angle θ tel que :

$$\vec{u}_{<} = \vec{u}_{n} \cos \theta + \vec{u}_{p} \sin \theta$$

$$\vec{u}_{>} = \vec{u}_{n} \sin \theta - \vec{u}_{p} \cos \theta$$
(5.52)

Elle définit les observables propres $\rho_{<}$ et $\rho_{>}$, selon :

$$\rho_{<} = \rho_{n} \cos \theta + \rho_{p} \sin \theta$$

$$\rho_{>} = \rho_{n} \sin \theta - \rho_{p} \cos \theta$$
(5.53)

A chacune de ces densités est associé un potentiel chimique qui est la dérivée de l'énergie libre dans la direction correspondante :

$$\mu_{<} = \partial f / \partial \rho_{<} = \mu_{n} \cos \theta + \mu_{p} \sin \theta$$

$$\mu_{>} = \partial f / \partial \rho_{>} = \mu_{n} \sin \theta - \mu_{p} \cos \theta$$
(5.54)

La distribution de probabilité (5.51) se réexprime en fonction des observables propres par :

$$P_{\beta,\mu_{<},\mu_{>}}(\rho_{<},\rho_{>}) \propto e^{-\beta V(f(\rho_{<},\rho_{>}) - (\mu_{<}\rho_{<} + \mu_{>}\rho_{>}))}$$
(5.55)

Appelons $(\rho_{<}^{0}, \rho_{>}^{0})$ le point pour lequel la fonction $f(\rho_{<}, \rho_{>}) - (\mu_{<}\rho_{<} + \mu_{>}\rho_{>})$ est de variation nulle. En dehors de la région de transition de phase, $(\rho_{<}^{0}, \rho_{>}^{0})$ correspond à un minimum de cette fonction, car les deux valeurs propres $c_{<}$ et $c_{>}$ de la matrice de courbure de f sont strictement positives. Il s'agit donc d'un maximum de la distribution de probabilite (5.55)), que l'on peut dans ce cas exprimer sous la forme gaussienne :

$$P_{\beta,\mu_{<},\mu_{>}}(\rho_{<},\rho_{>}) \propto e^{-\beta V \left[c_{<} \frac{\left(\rho_{<}-\rho_{<}^{0}\right)^{2}}{2} + c_{>} \frac{\left(\rho_{>}-\rho_{>}^{0}\right)^{2}}{2}\right]}$$
(5.56)

Considérons maintenant la région de transition de phase. Dans cette région, la courbure maximale $c_>$ reste positive, mais on a $c_< \leq 0$. Dans ce cas, le point extremum $(\rho_<^0, \rho_>^0)$ correspond toujours à un maximum de la distribution de probabilité (5.55) dans la direction $\vec{u}_>$, mais il s'agit maintenant d'un minimum dans la direction $\vec{u}_<$. Par conséquent, cette distribution ne peut s'exprimer comme (5.56), car elle n'a pas une forme gaussienne en ce qui concerne l'observable $\rho_<$.

En revanche, si l'on s'intéresse seulement à la distribution de l'observable $\rho_>$, une expression gaussienne se retrouve. Considérons en effet la distribution exacte (5.55) le long d'une droite $\rho_< = constante$. La contribution $\mu_< \rho_<$ le long de cette droite est constante : par conséquent la distribution en $\rho_>$ correspondante est proportionnelle à exp $[-\beta V(f(\rho_<, \rho_>) - \mu_> \rho_>)]$, qui présente un maximum en un point $\rho_>^0(\rho_<)$. Ainsi, la distribution en $\rho_>$ à $\rho_<$ fixé prend toujours la forme gaussienne :

$$P_{\rho_{<},\beta,\mu_{>}}(\rho_{>}) \propto e^{-\beta V c_{>} \frac{\left(\rho_{>}-\rho_{>}^{0}(\rho_{<})\right)^{2}}{2}}$$
 (5.57)

où la fluctuation de l'observable $\rho_{>}$ s'exprime par la courbure $c_{>}$.

Dans le cas d'une transition de phase, nous faisons la distinction entre deux types de fluctuations :

- la fluctuation du paramètre d'ordre ρ_{\leq} , qui est liée à la séparation de phase;
- la fluctuation de $\rho_>$: cette observable étant orthogonale au paramètre d'ordre, la fluctuation associée est découplée de la séparation de phase. Elle porte ainsi sur la composition globale du système, qui se répercute sur chacune des phases formées.

Par la suite, nous appellerons $\rho_>$ « observable de composition », et la fluctuation associée « fluctuation de composition ».

De par le caractère essentiellement isoscalaire de la transition de phase, nous savons que la direction $\vec{u}_{>}$ doit être proche de la direction isovecteur. La fluctuation de composition concerne donc essentiellement le contenu en isospin du système. Cependant, pour la matière asymétrique, les vecteurs propres ($\vec{u}_{<}, \vec{u}_{>}$) subissent une légère rotation par rapport à la base isoscalaire-isovecteur que l'on note (\vec{u}_{s}, \vec{u}_{3}). Cette rotation définit un angle α tel que :

$$\vec{u}_{<} = \vec{u}_{s} \cos \alpha + \vec{u}_{3} \sin \alpha$$

$$\vec{u}_{>} = -\vec{u}_{s} \sin \alpha + \vec{u}_{3} \cos \alpha$$
 (5.58)

Ainsi, pour $\alpha \neq 0$, la fluctuation de composition des phases n'est pas purement une fluctuation d'isospin, mais comporte une composante isoscalaire.

Les deux repères propres $(\vec{u}_{h<}, \vec{u}_{h>})$ et $(\vec{u}_{eq<}, \vec{u}_{eq>})$ définis pour un point du plan des densités sont illustrés sur la figure 5.13. Cette figure est à mettre en relation avec l'étude des directions de séparation à l'équilibre qui était détaillée dans la partie précédente (voir par exemple la figure 5.8) : on observe généralement une direction de séparation de phase plus proche de la direction isoscalaire dans le cas de la décomposition spinodale, soit, réciproquement, une observable de composition plus isovectorielle que pour le cas de l'équilibre.

Voyons maintenant comment s'expriment la composante en isospin $\sigma_{>|3}$ et la composante isoscalaire $\sigma_{>|s}$ de la fluctuation de composition $\sigma_>$. Dans l'approximation gaussienne (5.57) de la distribution en $\rho_>$, la fluctuation de composition est liée à la courbure maximale $c_>$ de l'énergie libre selon :

$$\frac{1}{\sigma_{>}^{2}} = \beta V c_{>} \tag{5.59}$$

La composante $\sigma_{>|3}$ ($\sigma_{>|s}$) de cette fluctuation s'obtient en considérant la projection de la distribution (5.57) sur la direction \vec{u}_3 (\vec{u}_s). La distribution projetée présente au point maximum une



FIG. 5.13 – Représentation schématique des directions de séparation de phase et de fluctuation de la composition. A gauche : courbe de coexistence en représentation (ρ, ρ_3) pour la partie riche en neutrons. Au centre : repères propres des matrices de courbures des surfaces d'énergie libre f^h (système homogène) et f^{eq} (système en équilibre de phase). La direction de courbure minimale $\vec{u}_{<}$ définit l'observable paramètre d'ordre $\rho_{<}$. La direction de courbure maximale $\vec{u}_{>}$ définit l'observable de composition $\rho_{>}$. A droite : à l' équilibre, pour chacune des phases, la direction de fluctuation est donnée par \vec{u}_{coP} (P = L ou G), suivant la tangente à la courbe de coexistence.

courbure que l'on note $c_{>|3}$ $(c_{>|s})$. Les courbures $c_{>|3}$ et $c_{>|s}$ ont pour expressions :

$$c_{>|3} = c_{>}/\cos^{2}\alpha$$

$$c_{>|s} = c_{>}/\sin^{2}\alpha$$
(5.60)

La projection de la distribution en $\rho_>$ est illustrée par la figure 5.14. L'effet géométrique d'une projection est d'accentuer la courbure, et donc de réduire la valeur de la fluctuation associée : ce qui est une autre façon de voir que la fluctuation de composition résulte de deux contributions, à savoir sa composante isovecteur $\sigma_{>|3}^2 = 1/(\beta V c_{>|3})$ et en densité isoscalaire $\sigma_{>|s}^2 = 1/(\beta V c_{>|s})$. Ces deux composantes s'expriment simplement comme

$$\sigma_{>|3} = \sigma_{>} \cos \alpha$$

$$\sigma_{>|s} = \sigma_{>} \sin \alpha$$
(5.61)

Les faibles valeurs de α obtenues en pratique signifient que la fluctuation de composition est dominée par sa composante en isospin.

Nous allons maintenant présenter les fluctuations de composition obtenues pour un système de matière nucléaire en transition liquide-gaz, en cherchant à nouveau à comparer le cas d'un équilibre de phase avec celui d'une décomposition spinodale.

Dans le cas d'une décomposition spinodale, nous avons vu qu'il est raisonnable de faire l'hypothèse que les propriétés du système homogène à l'instant initial de la séparation permettent de faire des prédictions concernant les propriétés des phases formées à l'issue du processus. Ainsi, nous considérerons ici que la fluctuation de composition de chaque phase formée à partir d'un système homogène de densités (ρ_n, ρ_p) est liée à la courbure maximale $c_{h>}$ de la matrice C_{MN}^h au point considéré. La validité de cette approximation est appuyée par les résultats d'une étude dynamique de l'évolution des fluctuations [ColM05] : en l'absence de fluctuations initiales, les fluctuations d'isospin sont essentiellement dues à la propagation dans le temps de la composante isovecteur de



FIG. 5.14 – Projection de la distribution $P_{\mu_>}(\rho_>)$ sur l'axe isovecteur ρ_3 . Les observables $(\rho_<, \rho_>)$ sont définies par le repère propre de la matrice de courbure de l'énergie libre. La densité $\rho_<$ est l'observable paramètre d'ordre de la transition. L'observable de composition est définie comme étant orthogonale à $\rho_<$, ce qui correspond à la densité $\rho_>$. La fluctuation de composition d'un système en transition est donnée par la distribution $P_{\mu_>}(\rho_>)$. Elle comporte deux composantes, isoscalaire et isovecteur. La fluctuation de composition en isospin correspond à la composante isovecteur, soit la fluctuation associée à la distribution $P_{\mu_>}(\rho_>)$ projetée sur l'axe ρ_3 .

la direction instable. Cela signifie que la dynamique en elle-même ne crée pas de fluctuations dans la direction stable.

Dans le cas d'un système à l'équilibre, la fluctuation de composition dépend de la courbure de la surface réglée obtenue par construction de Gibbs : $c_{eq>}$, qui se calcule dans la direction $\vec{u}_{eq>}$ orthogonale à chaque droite constituant la surface réglée.

Le calcul de $c_{eq>}$ fait appel à une nouvelle démarche numérique, dans laquelle sont utilisés les différents couples de phases en équilibre obtenus. Le principe en est illustré par le haut de la figure 5.15. Dans le plan (ρ_n, ρ_p) , chaque équilibre de phase se traduit par une droite de forme $\rho_p = a\rho_n + b$, dont les coefficients a et b évoluent continuement d'un équilibre à l'autre. Chacune de ces droites donne une direction $\vec{u}_{eq<}$ à laquelle s'associe le paramètre d'ordre $\rho_{eq<}$. On en déduit la direction orthogonale $\vec{u}_{eq>}$ définissant l'observable de composition $\rho_{eq>}$.

Pour un point $(\rho_n^0, \rho_p^0) = ((\rho_{eq<})^0, (\rho_{eq>})^0)$ appartenant à une droite d'équilibre donnée, la pente de l'énergie libre dans la direction $\vec{u}_{eq>}$ est donnée par le potentiel chimique $\mu_{eq>}$ qui est constant pour l'ensemble de cette droite, par construction (la surface réglée mettant en relation les couples de point de f^h ayant un même plan tangent).

Considérons l'équilibre voisin, tel que $\mu_{eq>} \rightarrow \mu_{eq>} + \delta \mu_{eq>}$. Dans le plan des densités, partant du point (ρ_n^0, ρ_p^0) dans la direction $\vec{u}_{eq>}$ la droite correspondant à cet équilibre voisin est croisée au point $((\rho_{eq<})^0, (\rho_{eq>})^0 + \delta \rho_{eq>})$, tandis que le potentiel chimique $\mu_{eq>}$ varie de $\delta \mu_{eq>}$. On obtient ainsi la valeur propre maximale de la matrice de courbure de f^{eq} au point (ρ_n^0, ρ_p^0) par $c_{eq>} = \delta \mu_{eq>}/\delta \rho_{eq>}$.

Remarquons que la courbure obtenue présente une évolution analytique simple le long de chaque droite d'équilibre, ainsi qu'il est illustré sur le bas de la figure 5.15. Choisissons un point $((\rho_{eq} <)^0, (\rho_{eq} >)^0)$ appartenant à une droite d'équilibre. La courbure en ce point est calculée à l'aide d'une droite d'équilibre voisine, formant un angle ϕ avec la première. Dans un déplacement $\Delta \rho_{eq} <$ du point suivant sa direction d'équilibre, la distance à la droite voisine varie linéairement, avec un coefficient de proportionnalité $k = \tan \phi$.

Ainsi, on obtient la relation :

$$\frac{1}{c_{eq>}} \left((\rho_{eq<})^0 + \Delta \rho_{eq<} \right) = \frac{1}{c_{eq>}} ((\rho_{eq<})^0) + k' \Delta \rho_{eq<}$$
(5.62)

soit une relation linéaire, avec le coefficient $k' = \tan \phi / \delta \mu_{eq>}$.

Nous sommes ainsi en mesure de calculer la courbure $c_{eq>}$ en chaque point de la surface réglée. Dans le cas de la décomposition spinodale, toujours selon l'hypothèse de l'amplification du mode instable dominant prenant naissance dans un système homogène, chacune des phases formées présente la même fluctuation de composition : elle est déterminée par la fluctuation du système homogène initial. Il n'en va pas de même pour un système à l'équilibre. En effet, dans ce cas la courbure $c_{eq>}$ dont nous venons de présenter le calcul est prise en un point de la surface f^{eq} obtenue par mélange de phases : la fluctuation de composition correspondante concerne le système global, mais cette fois-ci elle se traduit différemment pour les deux phases.

Considérons en effet un système global dont la composition fluctue de $\delta \rho_{eq>}$. S'agissant d'un système à l'équilibre, cette fluctuation se traduit par un déplacement de l'équilibre de phase. Au cours de ce déplacement, le liquide et le gaz partent de leurs positions moyennes en L et G et chaque phase suit son côté de la courbe de coexistence. Ceci correspond pour chacune à une fluctuation de composition dans la direction tangente à cette courbe, notée \vec{u}_{coL} côté liquide et \vec{u}_{coG} côté gaz. Ces directions sont illustrées sur la figure 5.13. Elles définissent les observables de composition ρ_{coL} et ρ_{coG} dans lesquelles s'expriment les fluctuations de chaque phase.

Le comportement de la fluctuation d'un système à l'équilibre est donné sur la figure 5.16 pour l'interaction de Skyrme Sly230a. Deux températures sont considérées, T = 4 et 10MeV, et l'on étudie dans chaque cas un système dont la densité globale est celle des points critiques correspondants. L'ensemble de la région de coexistence est étudié en fonction du potentiel chimique isovecteur $\mu_3 = \mu_n - \mu_p$. Pour chaque valeur de μ_3 comprise entre les deux points critiques, sont définis un liquide et un gaz en coexistence. Leurs fluctuations à l'équilibre se font en suivant la ligne de coexistence. Pour chaque phase, la courbure de l'énergie libre est étudiée suivant la direction correspondante \vec{u}_{coP} (P = L, G). Dans le voisinage immédiat de la matière symétrique, ces directions



FIG. 5.15 – Obtention de la courbure de la surface réglée à partir de deux droites d'équilibre projetées sur le plan des densités (voir texte). Pour chaque droite, les potentiels chimiques sont constants. En haut : calcul de la courbure dans la direction ρ_q^{eq} en un point donné. En bas : connaissant la courbure en un point, une relation linéaire permet de l'obtenir pour l'ensemble de la droite d'équilibre.

sont proches de l'axe isovecteur, et la fluctuation correspondante est essentiellement une fluctuation d'isospin. Cependant, étant donnée l'allure caractéristique de la courbe de coexistence, \vec{u}_{coP} s'écarte considérablement de \vec{u}_3 tandis que l'asymétrie augmente. L'évolution de cet écartement s'illustre par le coefficient de projection cos α représenté sur la dernière ligne de la figure. Dans le cas du gaz, ce coefficient chute rapidement aux petites asymétries, mais cette évolution est ensuite fortement ralentie et cos α reste supérieur à la valeur atteinte aux points critiques (soit environ 0.5). Dans le cas du liquide au contraire, la direction reste essentiellement isovecteur pour une large plage d'asymétrie, mais le coefficient de projection chute ensuite rapidement jusqu'à atteindre 0. En ce point particulier, la fluctuation de composition du liquide est purement isoscalaire, c'est à dire que l'observable de composition ρ_{coL} est la densité ρ . La courbe de coexistence étant fermée, le passage par un tel point était nécessaire pour l'une des deux phases : pour toutes les courbes obtenues, c'est la branche liquide qui est concernée. La représentation de la figure donne la valeur absolue de cos α , qui remonte donc après le point d'annulation pour rejoindre la courbe du gaz au point critique. Entre le point d'annulation et le point critique, une augmentation de ρ_3 pour le système global se traduit par une diminution de ρ_3 pour la partie liquide.

Cette évolution se reflète dans la relation entre la courbure dans la direction \vec{u}_{coP} et sa projection sur l'axe \vec{u}_3 , qui sont représentées sur la colonne gauche de la figure pour T = 10 MeV (dans le cas T = 4MeV, le même type d'allure est obtenu mais le pic du gaz écrase l'échelle). Les courbures inverses correspondantes sont données dans les colonnes centre et droite, pour T = 4MeV et T = 10MeV. Dans le cadre de l'approximation gaussienne, les courbures inverses sont reliées aux fluctuations selon $\beta V \sigma_{coP}^2 = 1/c_{coP}$ et pour la partie en isospin $\beta V \sigma_{(coP)|3}^2 = 1/c_{(coP)|3}$. Le passage par 0 de la projection sur \vec{u}_3 dans le cas de la branche liquide se traduit par une divergence de $c_{(coL)|3}$ en ce point, équivalant à l'annulation de la composante en isospin de la fluctuation (celle ci devenant alors purement isoscalaire).

Il est à noter que l'approximation gaussienne pour les distributions suivant la ligne de coexistence n'est valide qu'à l'écart des points critiques. En ces points, les directions \vec{u}_{coL} et \vec{u}_{coG} se rejoignent en une direction de courbure nulle. L'affaiblissement de la courbure suivant \vec{u}_{coP} à l'approche des points critiques se traduit par une divergence de $1/c_{coP}$ qui n'est pas liée au comportement de la fluctuation mais à la perte de validité de l'approximation gaussienne.

Il n'en va pas de même si l'on considère la fluctuation en $\rho_{eq>}$ du système global, qui correspond à la direction de courbure maximale. Toujours sur la même figure, on a représenté le cas d'un système global pris sur l'axe des points critiques, soit $\rho = \rho_c$. La courbure $c_{eq>}$ correspondante reste très positive, et quasiment constante, pour toute la région de coexistence. Quant à la direction $\vec{u}_{eq>}$, elle reste essentiellement isovecteur : la baisse du coefficient de projection avec l'asymétrie est régulière mais faible. Aux points critiques, la direction de fluctuation globale est orthogonale à la direction de fluctuation des phases. Au contraire, au point de matière symétrique ($\mu_3 = 0$) toutes les fluctuations sont purement isovecteur. L'inverse de la courbure pour le système global correspond alors, suivant la relation (5.62), à une interpolation linéaire entre celle des deux phases.

La comparaison entre la colonne du centre (T = 10 MeV) et celle de droite (T = 4 MeV)montre que la température n'a qu'une faible influence sur les caractéristiques des fluctuations, hormis dans le cas de la partie gaz dont la courbure à proximité de la matière symétrique devient très importante à faible température, se traduisant par une forte réduction de la fluctuation.

Le cas que nous venons de discuter est celui d'une séparation de phase entièrement déterminée par les conditions d'équilibre de Gibbs. Considérons maintenant une situation hors équilibre. Dans ce cas, les fluctuations dans le plan (ρ_n, ρ_p) augmentent avec le temps à partir de l'instabilité initiale jusqu'à provoquer la décomposition du système. Les fluctuations d'isospin devraient alors être calculées comme une variable dynamique donnée par la projection sur l'axe isovecteur de la fluctuation à deux dimensions variant dans le temps. Cette approche est réalisée dans des codes numériques [Bar05, Liu04], ainsi que dans des modèles analytiques simplifiés où l'évolution dans le temps des modes instables est suivie sous l'influence d'un champ moyen stochastique en approximation linéaire [ColM05]. Dans cette dernière approche, les conditions initiales sont données par l'équilibre statistique des observables non liées à l'instabilité (c'est à dire découplées du paramètre d'ordre, telle que ce que nous avons appelé l'observable de composition $\rho_>$). La fluctuation



FIG. 5.16 – Courbure de l'énergie libre f^{eq} et fluctuations de composition pour un système en équilibre de phase, en fonction du potentiel chimique isovecteur μ_3 commun aux deux phases et au système global. Trait épais : phase liquide. Trait fin : phase gaz. Pointillé : système global de densité $\rho = \rho_c$ (axe des points critiques). Les points critiques sont marqués. Colonne de gauche : courbures pour T=10 MeV. En haut à gauche : courbures obtenues dans les différentes directions de composition. Dans le cas du système global, il s'agit de la direction $\vec{u}_{eq>}$. Pour chacune des phases, cette direction est donnée par la tangente à la courbe de coexistence, soit \vec{u}_{coL} pour le liquide et \vec{u}_{coG} pour le gaz. Les observables de composition associées à ces directions sur l'axe isovecteur des distributions en $\rho_{eq>}$ (pour le système global) ρ_{coL} (pour le liquide) et ρ_{coG} (pour le gaz). Colonnes du centre et de droite : inverses des coubures précédentes, respectivement pour T = 10 MeV. En bas : écartement de chaque direction considérée à l'axe isovecteur, exprimé par la valeur absolue de $cos(\alpha)$, où $\alpha = (\vec{u}_{eq>}, \vec{u}_3)$ ou $(\vec{u}_{coP}, \vec{u}_3)$ selon chacun des cas.

initiale de ces observables est négligée. Les prédictions obtenues quant aux fluctuations d'isospin sont conformes aux résultats des simulations numériques des références [Bar05] et [Liu04]. Cependant, nous allons maintenant voir que les fluctuations d'isospin dans le cas d'une décomposition spinodale sont comparables aux fluctuations d'isospin à l'équilibre, qui sont connues et prises en compte dans les codes statistiques [Rad06]. Un tel résultat est dû au fait que la construction de Gibbs modifie peu la coubure de la surface d'énergie libre dans la direction isovecteur. Ceci indique que les fluctuations d'isospin obtenues dans les simulations de décomposition spinodale sont probablement sous-estimées.

Considérons le cas d'une transition de phase hors équilibre. Suivant le même principe que pour la direction de sépartion discutée dans la partie précédente, nous pouvons ici faire l'hypothèse que la fluctuation de composition hors équilibre est principalement déterminée par l'instant initial de la séparation de phase. En cet instant, le système est homogène : il est représenté par un point de la surface d'énergie libre f^h . Le mode instable dominant amplifié ultérieurement au cours de la séparation de phase correspond à une fluctuation dans la direction $\vec{u}_{h<}$. La courbure inverse dans la direction orthogonale $\vec{u}_{h>}$ se traduit par une fluctuation de l'observable de composition associée $\rho_{h>}$.

Une représentation de la fluctuation de composition d'un système homogène est donnée par la figure 5.17 pour un système de densité totale $\rho = 0.05 fm^{-3}$, en fonction de l'asymétrie exprimée par la densité isovecteur ρ_3 . Trois paramétrisations de Skyrme sont considérées, pour une température de 4MeV. Pour chaque point, la courbure de l'énergie libre f^h est calculée dans la direction $\vec{u}_{h>}$. La comparaison est faite avec le cas d'un système en équilibre de phase pris au même point, pour lequel la courbure de f^{eq} est calculée suivant $\vec{u}_{eq>}$. Pour un tel système, la courbure de la partie liquide correspondante dans la direction \vec{u}_{coL} est également étudiée.

En haut de la figure, les graphes représentent l'inverse de chacune de ces courbures, liées dans le cadre de l'approximation gaussienne à la fluctuation de l'observable de composition correspondante. La partie du centre donne l'inverse de la projection sur \vec{u}_3 de cette courbure, soit la composante en isospin $\sigma_{>|3}$ de la fluctuation de composition. Le coefficient de projection cos α est également représenté. Il permet de quantifier la part de la composante en isospin suivant la relation (5.61). Remarquons que la quantité cos α est liée à la distillation de l'isospin : il s'agit en effet d'une mesure de la direction de séparation des phases. Ce coefficient est d'autant plus proche de 1 que la séparation de phase suit une direction proche de celle de l'axe isoscalaire. On retrouve ainsi au bas de la figure 5.17 la tendance à suivre une direction de séparation plus isoscalaire en décomposition spinodale qu'à l'équilibre (soit une accentuation de la distillation d'isospin), ainsi qu'il a été observé dans la partie précédente.

On voit sur la figure 5.17 que la fluctuation de composition globale est comparable dans le cas d'un système à l'équilibre ou hors équilibre. Les tendances observées se retrouvent pour les trois paramétrisations. (La différence d'allure apparaissant pour SIII quant à la partie liquide tient à la forme de la branche liquide de la courbe de coexistence, qui suit l'axe isovecteur jusqu'à une très grande asymétrie : ainsi la chute du coefficient de projection n'est pas observée sur la partie de la région de coexistence traversée par l'axe $\rho = 0.05 fm^{-3}$.) La construction de l'enveloppe convexe de l'énergie libre ne modifie pas drastiquement la courbure dans la direction orthogonale à l'instabilité : en particulier, elle ne tend pas nécessairement à réduire cette courbure. Ainsi, pour un large intervalle autour de la matière symétrique, la fluctuation de composition $\sigma_{eq>}$ est plus faible que $\sigma_{h>}$. La courbure $1/c_{h>}$ diminuant régulièrement avec l'asymétrie, elle finit par croiser la courbe du système équilibré pour une grande valeur de ρ_3 .

Considérons maintenant la fluctuation de composition du liquide, également indiquée sur la figure 5.17. Cette phase pourrait être vu comme l'analogue pour un système de grande taille des fragments de masse intermédiaire formés dans une collision d'ions lourds, le gaz étant alors associé aux particules légères. La fluctuation observée est du même ordre de grandeur, mais supérieure à celle du système global à l'équilibre comme hors équilibre dans la région de matière symétrique. Remarquons que l'amplification de la fluctuation de la phase liquide en comparaison avec le système global à l'équilibre est due à la forme de la surface réglée donnée par la construction de Gibbs : en effet, la courbure de cette surface dans la direction isovecteur diminue vers les hautes densités. Lorsque l'on s'éloigne de la matière symétrique, la direction \vec{u}_{coL} s'écarte de la direction isovecteur,

ainsi que de la direction de courbure maximale $\vec{u}_{eq>}$. Tandis que l'on approche des points critiques, l'approximation gaussienne pour la composition de la phase liquide perd sa validité et la fluctuation de composition n'est plus reliée à la courbe obtenue. Le passage par 0 de la composante en isospin de la fluctuation reste toutefois acquis, résultant de la forme de la courbe de coexistence.

La composante en isospin des fluctuations dont il est question ici ne peut être directement reliée à la distribution isotopique des fragments observés dans les expériences de multifragmentation ou les simulations numériques de ce phénomène, du fait des lois de conservation à prendre en compte dans l'étude des petits systèmes. Elles induisent en effet dans ce cas des effets de taille finie affectant la forme des distributions obtenues dans une approche grand-canonique. Cependant, l'on peut s'attendre à ce que les tendances observées pour un grand système soient qualitativement indépendantes de l'introduction de tels effets. Par ailleurs, un traitement dynamique complet du problème serait nécessaire pour obtenir une prédiction quantitative de la largeur de distribution isotopique résultant d'une décomposition spinodale. A partir de l'hypothèse minimale qui est faite ici concernant le développement d'une fluctuation initiale suivant le mode d'instabilité dominant, il est toutefois possible d'estimer que cette largeur devrait être du même ordre de grandeur que celle qui est obtenue pour un système à l'équilibre. Un tel caractère devrait être pris en compte dans les simulations numériques de décomposition spinodale, de façon à obtenir des prédictions fiables concernant les fluctuations d'isospin.



FIG. 5.17 – Comparaison de la fluctuation de composition dans un équilibre de phase et une décomposition spinodale, pour trois paramétrisations de Skyrme à T = 4MeV. Les systèmes globaux sont considérés le long de l'axe $\rho = 0.05 fm^{-3}$ et représentés en fonction de la coordonnée ρ_3 commune au système homogène (trait fin) et à l'équilibre (pointillé). Les valeurs représentées sont également indiquées pour la partie liquide correspondant à chaque système à l'équilibre (trait épais). Les points donnent les frontières de la région de coexistence (dans le cas de l'équilibre) et de la région spinodale (dans le cas homogène). En haut : inverse de la courbure de l'énergie libre prise pour chaque cas dans la direction de fluctuation associée (respectivement $\vec{u}_{h>}$, $\vec{u}_{eq>}$, \vec{u}_{coL}) Au centre : inverse de la courbure de l'énergie libre prise dans chacune de ces directions et projetée sur l'axe isovecteur. En bas : écart de chaque direction considérée à l'axe isovecteur, exprimé par la valeur absolue de $cos(\alpha)$, où $\alpha = (\vec{u}_{h>}, \vec{u}_3)$, $(\vec{u}_{eq>}, \vec{u}_3)$, $(\vec{u}_{coL}, \vec{u}_3)$ selon chacun des cas.

Chapitre 6

Instabilités de taille finie dans la matière nucléaire

Nous venons d'étudier dans le chapître précédent la région spinodale thermodynamique de la matière nucléaire. Il s'agit de la région dans laquelle la matière homogène est instable par rapport à certaines fluctuations thermodynamiques. Une fluctuation de ce type consiste en une séparation du système en deux portions homogènes et infinies dont les valeurs d'observables sont voisines. Pour certaines directions de séparation, la fluctuation correspondante conduit à une réduction de l'énergie libre du système : cette fluctuation se trouve alors rapidement amplifiée jusqu'à ce que les deux portions soient des phases stables, cessant d'échanger de la matière.

Nous allons voir maintenant comment des effets de taille finie peuvent être introduits dans l'étude de l'instabilité de la matière nucléaire homogène. Il s'agit d'étudier la variation de l'énergie libre du système lorsqu'il passe d'un état homogène à un état où sa densité présente des oscillations de taille finie de faible amplitude [Bay71b, Pet95a]. Nous trouverons alors que le problème de l'instabilité thermodynamique qui nous occupait jusqu'à présent constitue une partie intégrante de cette nouvelle approche. Deux termes supplémentaires sont ici à prendre en compte dans l'énergétique du système. L'un d'eux est lié à la dépendance de la force nucléaire aux gradients de densité que l'on fait ainsi apparaître dans le milieu étudié. Le second est un terme d'énergie coulombienne, qui doit être pris en compte pour décrire la variation de l'énergie libre ainsi qu'il sera expliqué au cours de ce chapître.

Afin d'étudier la stabilité de la matière homogène, nous calculerons la variation de l'énergie libre due à une oscillation de densité en onde plane. Les différents termes obtenus s'expriment en fonction d'une nouvelle matrice de courbure, définie cette fois-ci dans l'espace des fluctuations de densité (et non dans l'espace des densités comme c'était le cas pour l'étude thermodynamique). Pour une oscillation de nombre d'onde k donné, l'étude de cette matrice permet de définir la région « k-spinodale » : il s'agit de la région pour laquelle la matière homogène est instable contre une oscillation de densité de nombre d'onde k. Le développement d'une telle instabilité provoque la décomposition de la matière en agrégats, assimilables à des gouttelettes immergées dans un gaz. En énonçant un critère de définition du mode le plus instable (à l'aide d'une approche hydrodynamique), nous pourrons déterminer pour un système homogène donné la taille et la composition dominante des agrégats formés à partir d'un état homogène instable.

Nous tenterons alors de faire le lien avec les observations expérimentales, en considérant que les effets coulombiens et de taille finie introduits ici dans l'étude de la matière nucléaire permettent d'avoir un aperçu de ce qu'il se passe dans le cas des noyaux. Les conséquences pour la mesure de l'énergie de symétrie à partir des distributions isotopiques obtenues en multifragmentation seront finalement évoquées.

6.1 Régions d'instabilité par rapport aux fluctuations de taille finie

Introduisons dans la matière homogène des fluctuations $\delta \rho_q(\vec{r})$ affectant les densités des différents types q de particules en présence. Pour la matière nucléaire, nous avons q=n, p. Dans le chapître suivant, nous étudierons la matière dans les étoiles denses, où les électrons e seront aussi à prendre en compte. Les différentes densités prennent la forme :

$$\rho_q(\vec{r}) = \rho_q^0 + \delta \rho_q(\vec{r}) \tag{6.1}$$

D'une façon générale, $\delta \rho_q(\vec{r})$ peut s'exprimer par la transformée de Fourier :

$$\delta \rho_q(\vec{r}) = \int d\vec{k} \, a_q(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{6.2}$$

avec la relation $a_q(\vec{k}) = a_q^*(-\vec{k})$ ($\delta \rho_q$ étant réel). On démontre facilement que la variation de l'énergie libre ne couple pas les différents vecteurs d'ondes (cf annexe A). C'est pourquoi nous étudierons dans ce chapître des oscillations de densité en ondes planes pour lesquelles on fixe un vecteur d'onde \vec{k} commun aux différentes espèces présentes :

$$\delta \rho_q(\vec{r}) = A_q e^{ik \cdot \vec{r}} + c.c. \tag{6.3}$$

Les fluctuations correspondantes sont de taille finie si le nombre d'onde $k = |\vec{k}|$ est non nul. Remarquons que le cas d'une fluctuation thermodynamique s'obtient à la limite $k \to 0$. Dans le cas d'un nombre d'onde fini, l'amplification éventuelle de la fluctuation correspondante aboutit à la formation d'agrégats dont la taille est caractérisée par la valeur de k (*cf* figure 6.1).



FIG. 6.1 – Représentation schématique de la formation d'agrégats par amplification d'une oscillation de densité prenant naissance dans un milieu homogène.

6.1.1 Courbure dans l'espace des fluctuations

Nous allons ici voir comment, partant d'un état de matière homogène, l'introduction des fluctuations (6.3) fait varier l'énergie libre du système. Une approche de Thomas-Fermi est suivie pour aborder cette question : c'est à dire que l'on suppose un système dont la densité varie suffisamment doucement dans l'espace pour qu'en chaque point la densité locale définisse une sphère de Fermi, de la même façon que s'il s'agissait de la densité d'un système infini. La validité de cette approche dépend de la valeur du nombre d'onde k de la fluctuation. C'est une approximation raisonnable pour l'étude qui nous intéresse dès lors que l'on a un nombre d'états $N \gg 1$ sur une distance $\Delta r \simeq \pi/k$. Il se trouve que l'énergétique est déjà bien reproduite pour des systèmes aussi petits que des noyaux, typiquement à partir du Calcium [Rin80]. Par ailleurs, le calcul RPA montre que l'approche de Thomas-Fermi donne des résultats valides si l'on considère des nombres d'ondes petits par rapport au moment de Fermi $k_F = 260 MeV/c$ [Ayi95, Cho04].

Introduisons maintenant les différents termes participant à la variation de l'énergie libre d'un système lorsqu'il passe d'une configuration homogène à une configuration avec oscillation des densités.

Terme de volume

Une première contribution est apportée par ce que nous appelons le terme de volume de l'énergie libre. Ce terme n'est rien d'autre que la densité d'énergie libre de la matière nucléaire infinie et homogène, $f^h(\{\rho_a\})$. En présence d'une oscillation de densité, dans l'approche de Thomas-Fermi, le terme de volume prend en chaque point de l'espace la valeur $f^h(\{\rho_q(\vec{r})\})$.

Pour l'ensemble du milieu, la contribution de ce terme est donnée par la moyenne sur l'espace de la valeur qu'il prend en chaque point. En référence au terme anglophone « bulk », le terme de volume de l'énergie libre portera la lettre b:

$$f^{b} = \frac{1}{V} \int f^{h} (\{\rho_{q}^{0} + \delta \rho_{q}(\vec{r})\}) d\vec{r}$$
(6.4)

Dans l'approximation des petites amplitudes, f^h peut être exprimée par un développement de Taylor au second ordre autour de $\{\rho_a^0\}$. Il en résulte l'expression :

$$f^{b} = f^{h}(\{\rho_{q}^{0}\})$$

$$+ \frac{1}{V} \sum_{i} \left(\frac{\partial f^{h}}{\partial \rho_{i}}\right)_{\{\rho_{q}^{0}\}} \int \delta \rho_{i}(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$+ \frac{1}{V} \sum_{ij} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} f^{h}}{\partial \rho_{j} \partial \rho_{i}}\right)_{\{\rho_{q}^{0}\}} \int \delta \rho_{i}(\vec{r}) \delta \rho_{j}(\vec{r}) d\vec{r}$$
(6.5)

La moyenne sur l'espace de chaque fluctuation de densité est nulle ($\langle \delta \rho_q \rangle_{\vec{r}} = 0$). La variation de f^b est donc nulle au premier ordre. En allant jusqu'au deuxième ordre, on fait intervenir la moyenne $\langle \delta \rho_i \delta \rho_i \rangle_{\vec{r}}$ qui, pour des oscillations en onde plane de la forme (6.3), vaut $A_i A_i^* + A_i^* A_i$. Ainsi, la variation d'énergie libre liée au terme de volume est donnée par :

$$\delta f^b = \sum_{i,j} \frac{A_i A_j^* + A_i^* A_j}{2} \left(\frac{\partial^2 f_h}{\partial \rho_i \partial \rho_j} \right)_{\{\rho_q^0\}} = \sum_{i,j} \frac{A_i A_j^* + A_i^* A_j}{2} \left(\frac{\partial \mu_j}{\partial \rho_i} \right)_{\{\rho_q^0\}}$$
(6.6)

où l'on a fait apparaître à nouveau les dérivées des potentiels chimiques, dont le calcul a été détaillé dans le chapître précédent.

Il est important de noter que, l'entropie dépendant uniquement de la densité [Vau96], sa variation δs due à l'oscillation introduite est entièrement contenue dans la variation du terme de volume :

$$T\delta s = \delta \mathcal{H}^b - \delta f^b \tag{6.7}$$

où \mathcal{H}^b est le terme de volume de la densité d'énergie.

Considérant la variation de l'énergie libre $\delta f = \delta \mathcal{H} - T \delta s$, la contribution des termes supplémentaires s'exprimera donc uniquement par la variation de la densité d'énergie

$$\delta \mathcal{H} = \delta \mathcal{H}^b + \delta \mathcal{E}^\nabla + \delta \mathcal{E}^c \tag{6.8}$$

où $\delta \mathcal{E}^{\nabla}$ et $\delta \mathcal{E}^{c}$ sont les variations de densité d'énergie dues, respectivement, au terme en gradients de l'interaction nucléaire et à l'interaction coulombienne. Soit, en résumé :

$$\delta f = \delta f^b + \delta \mathcal{E}^{\nabla} + \delta \mathcal{E}^c \tag{6.9}$$

Il est maintenant temps d'expliciter les deux termes supplémentaires.

Terme en gradient de densité de l'interaction nucléaire

L'interaction nucléaire effective est dépendante en chaque point des gradients de densités locaux. Lorsque le milieu n'est plus homogène, ceci se traduit par une contribution \mathcal{H}^{∇} à la densité d'énergie locale \mathcal{H} . Cette contribution s'exprime sous la forme :

$$\mathcal{H}^{\nabla} = C_{nn}^{\nabla} (\nabla \rho_n)^2 + C_{pp}^{\nabla} (\nabla \rho_p)^2 + 2C_{np}^{\nabla} \nabla \rho_n \cdot \nabla \rho_p \tag{6.10}$$

où les coefficients C_{ij}^∇ sont des combinaisons linéaires des paramètres de Skyrme introduits dans la littérature [Cha97] :

$$C_{nn}^{\nabla} = C_{pp}^{\nabla} = \frac{3}{16} \left[t_1 (1 - x_1) - t_2 (1 + x_2) \right] C_{np}^{\nabla} = C_{pn}^{\nabla} = \frac{1}{16} \left[3t_1 (2 + x_1) - t_2 (2 + x_2) \right]$$
(6.11)

Pour les différentes paramétrisations de Skyrme que nous avons employées, ils prennent les valeurs indiquées dans le tableau suivant :

	Sly230a	SGII	SIII
$C_{nn}^{\nabla} = C_{pp}^{\nabla} (MeV.fm^5)$	84.56	43.27	45.94
$C^{\nabla}_{np} = C^{\nabla}_{pn}(MeV.fm^5)$	70.82	66.36	80.00

Nous pouvons déjà remarquer que toutes ces valeurs sont positives. La présence des gradients de densité coûte donc de l'énergie au système, de par la forme de l'interaction nucléaire.

Considérant la moyenne sur l'espace, on obtient le terme contribuant à l'expression (6.9):

$$\delta \mathcal{E}^{\nabla} = \frac{1}{V} \int \mathcal{H}^{\nabla}(\vec{r}) d\vec{r} = \sum_{ij} C_{ij}^{\nabla} < \nabla \rho_i \nabla \rho_j >_{\vec{r}}$$
(6.12)

Pour les fluctuations de densités en onde plane données par (6.3), les gradients de densité valent :

$$\nabla \rho_q = iA_q \vec{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + c.c. \tag{6.13}$$

ce qui permet d'exprimer $\delta \mathcal{E}^{\nabla}$ par

$$\delta \mathcal{E}^{\nabla} = k^2 \sum_{i,j} \left(A_i A_j^* + A_i^* A_j \right) C_{ij}^{\nabla}$$
(6.14)

Terme d'interaction coulombienne

Introduisons maintenant la densité d'énergie coulombienne. Conformément au caractère semiclassique de l'approximation de Thomas-Fermi [Rin80], nous en considérerons seulement le terme direct.

Les différentes espèces q en présence impliquent une densité de charge ρ_c telle que :

$$\rho_c(\vec{r}) = \sum_i e_i \rho_i(\vec{r}) = \rho_c^0 + \delta \rho_c(\vec{r})$$

$$avec \quad e_i = q_i / \sqrt{4\pi\epsilon_0}$$
(6.15)

où q_i est la charge d'une particule de type i (à savoir, respectivement 0, q, -q pour n, p, e) et ϵ_0 la constante diélectrique du vide.

Il en résulte la densité d'énergie coulombienne

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{c} &= \frac{1}{2V} \int \int \frac{\rho_{c}(\vec{r}_{0})\rho_{c}(\vec{r}_{0}+\vec{r})}{|\vec{r}|} d\vec{r} d\vec{r}_{0} \\ &= \frac{(\rho_{c}^{0})^{2}}{2} \int \frac{d\vec{r}}{|\vec{r}|} + \frac{\rho_{c}^{0}}{V} \int \int \frac{\delta\rho_{c}(\vec{r}_{0})}{|\vec{r}|} d\vec{r} d\vec{r}_{0} + \frac{1}{2V} \int \int \frac{\delta\rho_{c}(\vec{r}_{0})\delta\rho_{c}(\vec{r}_{0}+\vec{r})}{|\vec{r}|} d\vec{r} d\vec{r}_{0} \end{aligned}$$
(6.16)

Pour un milieu infini dont la densité de charge n'est pas strictement nulle, le premier terme du développement de (6.16) est divergent. C'est pourquoi il n'est pas possible de traiter d'effets coulombiens dans le cadre de la matière nucléaire uniforme, à moins d'utiliser une interaction écrantée. Il se présente ici une situation différente : nous voulons considérer la variation d'énergie due aux fluctuations, par rapport au cas de la matière uniforme. Ainsi, ce premier terme (partie monopolaire de l'interaction coulombienne) n'entre pas en considération, étant éliminé dans la différence $\delta \mathcal{E}^c$.

Observons alors les deux termes suivants. La fluctuation de densité ayant une moyenne nulle sur l'espace, le second terme s'annule par symétrie. La variation d'énergie coulombienne est donc donnée par le dernier terme, soit :

$$\delta \mathcal{E}^c = \frac{1}{2V} \int \int \frac{\delta \rho_c(\vec{r}_0) \delta \rho_c(\vec{r}_0 + \vec{r})}{|\vec{r}|} d\vec{r} d\vec{r}_0$$
(6.17)

Dans le cas d'une oscillation en onde plane (6.3), la variation de la densité de charge s'écrit :

$$\delta \rho_c(\vec{r}) = A_c e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + c.c.$$

$$avec \quad A_c = \sum_i e_i A_i$$
(6.18)

La variation d'énergie coulombienne (6.17) prend alors la forme d'une transformée de Fourier qui peut être calculée en introduisant une longeur d'écrantage λ dans l'interaction coulombienne. La valeur finale $\delta \mathcal{E}^c$ s'obtient en faisant tendre λ vers 0 après intégration (*cf* annexe A). On trouve alors pour variation de l'énergie coulombienne :

$$\delta \mathcal{E}_c = |A_c|^2 \frac{4\pi}{k^2} \tag{6.19}$$

Expression de la matrice de courbure dans l'espace des fluctuations

En exprimant dans l'équation (6.9) les différents termes (6.6), (6.14) et (6.19) que nous avons obtenus, la variation de la densité d'énergie libre s'écrit :

$$\delta f = \sum_{ij} \frac{A_i A_j^* + A_i^* A_j}{2} \left[\left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \rho_j} \right)_{\{\rho_q^0\}} + 2C_{ij}^{\nabla} k^2 + \frac{4\pi e_i e_j}{k^2} \right]$$
(6.20)

Plaçons-nous dans l'espace des amplitudes d'oscillations, dont les vecteurs sont (pour N espèces dont les densités oscillent indépendamment) :

$$X = \begin{pmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} , \quad \widetilde{X} = \begin{pmatrix} A_1^* & \cdots & A_N^* \end{pmatrix}$$
(6.21)

Nous pouvons alors voir que l'équation (6.20) prend une forme matricielle

$$\delta f = X \mathcal{C}^f X \tag{6.22}$$

où \mathcal{C}^f est une matrice symétrique $N \times N$ dont les éléments correspondent aux dérivées secondes du développement de Taylor de f en $\{A_q\}$ (à un facteur 2 près). Il s'agit donc de la matrice de courbure de la densité d'énergie libre dans l'espace des amplitudes d'oscillation de densité, dit plus rapidement « espace des fluctuations » (d'où la notation \mathcal{C}^f). Les éléments de cette matrice sont :

$$\mathcal{C}_{ij}^f = \left(\frac{\partial\mu_i}{\partial\rho_j}\right)_{\{\rho_q^0\}} + 2C_{ij}^{\nabla}k^2 + \frac{4\pi e_i e_j}{k^2}$$
(6.23)

Compte tenu des propriétés de la matrice de courbure (réelle et symétrique), ses valeurs propres sont réelles. Il existe donc une base de vecteurs propres dont les composantes sont réelles (cette base étant définie à une phase près). On en déduit que les modes propres correspondent à des fluctuations telles que les densités des différentes espèces oscillent soit en phase, soit en opposition de phase.

Dans le cas de la matière nucléaire, on note C_{MN}^{f} la matrice de courbure dans l'espace des fluctuations. Compte tenu des différents termes exprimés, elle prend la forme :

$$\mathcal{C}_{MN}^{f} = \begin{pmatrix} \partial \mu_n / \partial \rho_n & \partial \mu_n / \partial \rho_p \\ \partial \mu_p / \partial \rho_n & \partial \mu_p / \partial \rho_p \end{pmatrix} + 2k^2 \begin{pmatrix} C_{nn}^{\nabla} & C_{np}^{\nabla} \\ C_{pn}^{\nabla} & C_{pp}^{\nabla} \end{pmatrix} + \frac{4\pi e^2}{k^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(6.24)

où l'on reconnaît que le premier terme a exactement la même expression que la matrice C_{MN}^h donnant la courbure de la surface d'énergie libre d'un système homogène $f^h(\rho_n, \rho_p)$.

6.1.2 Spinodales dépendantes de k

Nous venons d'établir que la matrice de courbure de l'énergie libre dans l'espace des fluctuations se compose de trois termes, dont un que nous connaissons déjà et deux qui sont introduits par l'effet des oscillations de densité et dépendent du nombre d'onde k:

- Le terme dû aux gradients de densité est proportionnel à k^2 . Il correspond à une énergie nucléaire de surface, qui est d'autant plus élevée que la densité varie rapidement. Ce terme favorise donc les systèmes homogènes, soit la formation de grands fragments.
- Le terme coulombien est inversement proportionnel à k^2 : c'est à dire, proportionnel à λ^2 , λ étant la longueur d'onde associée au mode. Une plus grande longueur d'onde correspond en effet à de plus larges régions portant le même signe de $\delta \rho_c$: il en résulte une interaction coulombienne plus importante. Ce terme favorise donc la formation de petits fragments.

Chacun de ces deux termes a pour effet de donner un coût positif en énergie à l'introduction d'une oscillation de densité dans le système homogène. Rendant une telle configuration énergétiquement moins favorable, on s'attend à ce qu'ils réduisent la région d'instabilité présente dans la matrice C_{NM}^h . C'est ce que nous allons maintenant observer.

Étudions d'abord, pour un point donné du plan des densités se trouvant dans la région d'instabilité thermodynamique, l'influence sur les modes propres de l'introduction des termes dépendants de k. Une telle étude est présentée sur la figure 6.2, pour le point de densité $\rho = 0.05 fm^{-3}$ et de fraction protonique Z/A = 0.3. Une température de 4MeV est fixée. Les résultats sont d'abord exposés pour l'interaction de Skyrme Sly230a, puis comparés aux cas des paramétrisations SGII et SIII, qui présentent les mêmes tendances. Pour chacun des cas sont représentés les deux caractéristiques du mode propre de courbure minimale, à savoir la valeur propre $c_{<}$ et la direction du vecteur propre $\vec{u}_{<}$ donnée par le rapport $\delta\rho_3/\delta\rho$, en fonction du nombre d'onde k. La valeur de k est ici exprimée en MeV/c (ce qui correspond à la dimension d'un moment), selon :

$$k(MeV/c) = \hbar c k(fm^{-1})/c$$
 (6.25)

L'étude se décompose en deux parties : dans un premier temps, l'on observe la dépendance en k en l'absence d'effet coulombien, c'est à dire en posant une densité de charge électrique nulle en tout point de l'espace ($\delta \rho_c = 0$). Ceci revient à considérer des protons non-chargés, de façon à isoler la partie d'origine nucléaire de la dépendance en k. Les effets coulombiens sont ensuite introduits, de façon à considérer l'ensemble de la matrice C^f , qui a été exprimée pour une densité de charge $\delta \rho_c = \delta \rho_p$. Déduction faite du cas précédent, on observe alors la part de l'interaction électrique dans la dépendance en k.

Considérons le premier cas, $\delta \rho_c = 0$. Pour la série de courbes correspondante, les valeurs en k = 0 sont celles associées au mode de courbure minimale dans le cas de la matière homogène : $(c_{<}^{h}, \vec{u}_{<}^{h})$. Lorsqu'il apparaît une oscillation de densité de longueur d'onde finie (k > 0), les effets du gradient de densité augmentent avec k de façon monotone. La courbure minimale $c_{<}$ croît jusqu'à franchir 0, pour une valeur de k que l'on trouve ici légèrement supérieure à 200 MeV/c. La direction du vecteur propre peut quant à elle être appréciée grâce au rapport $\delta \rho_3 / \delta \rho$ des composantes de ce vecteur. On voit qu'elle subit une faible variation, tendant à augmenter sa composante isovecteur : c'est à dire, à la rapprocher de la direction Z/A = constante.

Lorsque les effets coulombiens sont introduits, il en résulte un coût important en énergie pour réaliser des oscillations de ρ_p de grande longueur d'onde. A la limite $k \to 0$, il en résulte une immobilisation des protons : la valeur infinie du terme C_{pp}^f supprime le degré de liberté associé, et la direction de courbure minimale devient celle de l'axe des neutrons. Nous nous retrouvons alors dans le cas de la matière de neutron thermodynamique, avec $c_{\leq} = d\mu_n/d\rho_n$. Cette valeur étant toujours positive, l'instabilité est supprimée par les effets coulombiens à k = 0. Il en résulte une borne inférieure de l'intervalle instable de k, qui vient s'ajouter à la borne supérieure due à l'interaction nucléaire (ce qui implique le passage de $c_{\leq}(k)$ par un minimum). Cette borne supérieure n'est que très légèrement modifiée par l'introduction de la charge électrique : elle concerne un domaine de faible longueur d'onde où l'interaction coulombienne devient négligeable, comme le montre le rapprochement des courbes correspondant respectivement à $\delta\rho_c = 0$ et $\delta\rho_c = \delta\rho_p$.

Dans son domaine d'influence, l'interaction coulombienne modifie de façon notable la direction du vecteur propre $\vec{u}_{<}$. Les protons étant rendus moins mobiles, la composante isoscalaire de cette direction se trouve défavorisée dans la région riche en neutrons du plan des densités, à laquelle appartient le point donné en exemple sur la figure 6.2 (Z/A=0.3). Dans un certain domaine, cet effet peut annuler la distillation d'isospin.

La comparaison des différentes paramétrisations de Skyrme fait apparaître une sensibilité quant à l'intervalle de k concerné par l'instabilité. La distinction joue plus précisément sur la borne supérieure de cet intervalle : en effet, pour les faibles valeurs de k l'interaction nucléaire est peu affectée, et l'écart au cas thermodynamique est dominé par les effets coulombiens, qui sont indépendants de la force employée. Ainsi, nous pouvons remarquer que les paramétrisations Sly230a et SGII, qui présentent des instabilités thermodynamiques semblables, se distinguent ici nettement par l'extension du domaine instable : pour Sly230a, l'instabilité est plus fortement réduite, du fait des valeurs C_{ij}^{∇} qui sont plus importantes dans cette paramétrisation que pour SGII. La force SIII présente quant à elle le plus grand intervalle instable de k, malgré des valeurs de C_{ij}^{∇} intermédiaires : c'est le reflet de son instabilité thermodynamique plus importante que pour les deux autres forces.

Nous venons de voir qu'en un point (ρ_n, ρ_p) et pour une température donnée l'instabilité thermodynamique se trouve réduite à un certain intervalle de k. Réciproquement, pour chaque valeur de k, l'on peut déterminer le domaine du plan des densités tel que $c_{\leq}(k) \leq 0$. Ceci revient à définir de nouvelles régions spinodales, chacune étant associée à la valeurs de k considérée. De façon compacte, nous pouvons appeler les régions ainsi définies des k-spinodales. De telles régions sont représentées sur la figure 6.3. La spinodale thermodynamique ainsi que la courbe de coexistence de deux phases uniformes sont également tracées à titre de comparaison. Encore ici, les deux cas $\delta \rho_c = 0$ et $\delta \rho_c = \delta \rho_p$ sont étudiés. Cette figure permet d'observer l'évolution des deux familles correspondantes de k-spinodales pour des valeurs de k croissantes.

Les deux familles de courbes se conforment aux caractères apparaissant sur l'exemple de la figure 6.2. Lorsqu'on augment k, la k-spinodale à $\delta \rho_c = 0$ s'écarte de façon régulière de la spinodale thermodynamique, avec laquelle elle serait confondue pour k = 0. L'influence des effets coulombiens entraîne une forte réduction de la région d'instabilité pour les petits nombres d'onde, avant de s'affaiblir pour les plus grandes valeurs de k où l'on assiste au rapprochement des deux types de régions tracés. L'extension maximale de la région k-spinodale compte tenu de la charge électrique s'obtient pour une valeur intermédiaire du nombre d'onde.

La brisure de symétrie neutron-proton provoquée par l'introduction des effets coulombiens apparaît clairement sur la figure 6.3. Pour les k-spinodales de matière non-chargée, cette symétrie est conservée : le terme nucléaire dépendant des gradients de densités est en effet invariant par renversement de l'isospin, tout comme le terme de volume à partir duquel est définie la spinodale thermodynamique. L'interaction coulombienne en revanche s'applique uniquement aux protons. On déduit de l'allure des k-spinodales que l'interaction coulombienne réduit plus fortement l'instabilité dans la région riche en protons. Soulignons que ceci n'est pas dû à l'augmentation de l'énergie coulombienne avec la densité de protons, qui affecte seulement le terme monopolaire : nous avons vu que ce terme n'intervient pas dans la variation de l'énergie libre. L'influcence de l'interaction coulombienne sur l'allure des k-spinodales est indirecte. Pour expliquer la tendance observée, il faut prendre en compte les propriétés de courbure du terme de volume de l'énergie libre $f^h(\rho_n, \rho_p)$.



FIG. 6.2 – Dépendance en k (nombre d'onde) du mode de courbure minimale de l'énergie libre dans l'espace des fluctuations de densité. Une température et un point du plan des densités sont fixés. En haut : valeur propre minimale $c_{<}(k)$. En bas : direction du vecteur propre $\vec{u}_{<}(k)$ exprimé par le rapport $\delta \rho_3 / \delta \rho$ de la variation de densité occasionnée. La ligne horizontale donne la valeur correspondant à la direction de Z/A constant. La colonne de gauche concerne l'interaction de Skyrme Sly230 a seule. Dans la colonne de droite, ces résultats sont superposés avec ceux des interactions SGII et SIII. Deux familles de courbes sont tracées. $\delta \rho_c = 0$: effets coulombiens supprimés. $\delta \rho_c = \delta \rho_p$: traitement complet de la variation d'énergie libre.

En effet, on peut constater pour les forces de Skyrme utilisées ici que la valeur $\partial \mu_n / \partial \rho_n$ (soit la courbure de f^h dans la direction \vec{u}_n) augmente avec la densité de protons. Tandis que les effets coulombiens suppriment l'oscillation de la densité des protons, la direction de courbure minimale se rapproche de \vec{u}_n : l'énergie du mode s'en trouve d'autant plus augmentée que la courbure dans la direction \vec{u}_n est élevée. C'est ainsi que les effets coulombiens réduisent plus fortement l'instabilité du côté riche en protons.



FIG. 6.3 – Représentation des k-spinodales : régions d'instabilité de la matière homogène par rapport à une oscillation de densité, pour différentes valeurs du nombre d'onde k. Ligne du haut : T = 4MeV. Ligne du bas : T = 10MeV. Deux courbes extérieures : coexistence et spinodale thermodynamique, avec les points critiques. Deux courbes intérieures : k-spinodales. En pointillé : sans effets coulombiens. En trait plein : traitement complet de la variation d'énergie libre.

Pour une température donnée, les différentes k-spinodales qu'il est possible de tracer correspondent à des nombres d'onde compris dans un certain intervalle. Pour chacune des deux valeurs limites, la k-spinodale se réduit à un point, qui se situe du côté riche en neutron pour la limite inférieure, et se rapproche de l'axe de la matière symétrique pour la limite supérieure. La figure 6.4 présente en fonction de la température les limites de k entre lesquelles une oscillation de densité peut révéler une instabilité. Le cas $\delta \rho_c = 0$ est encore une fois représenté. Comme nous venons de le voir, il ne présente qu'une borne supérieure. Tandis qu'augmente la température, cette borne se rapproche de l'axe k = 0, qu'elle atteint à la température critique T_u (température du point critique ultime, marquant la disparition de la spinodale thermodynamique). Considérant la charge électrique $\delta \rho_c = \delta \rho_p$, l'intervalle d'instabilité de k est limité par deux bornes, qui se rapprochent l'une de l'autre pour une température croissante. Elles se rejoignent en une nouvelle température limite, noté T_{lim} : celle ci est nécessairement strictement inférieure à T_u dans la mesure où une valeur finie de k réduit l'instabilité.



FIG. 6.4 – Intervalle du nombre d'onde k donnant lieu à une région d'instabilité dans le plan des densités, en fonction de la température. A gauche : paramétrisation Sly230a. A droite : paramétrisations Sly230a, SGII et SIII. Deux familles de courbes : $\delta \rho_c = 0$ (effets coulombiens supprimés) et $\delta \rho_c = \delta \rho_p$ (traitement complet). T_u : température du point critique ultime de la transition liquide-gaz de la matière nucléaire. T_{lim} : température limite pour une instabilité de longueur d'onde finie compte tenu des effets coulombiens.

Maintenant que les contributions des deux termes dépendants de k sont explicités, considérons uniquement les k-spinodales tenant compte de la totalité de la matrice C^f (à savoir le cas $\delta \rho_c = \delta \rho_p$). Nous avons commencé par voir qu'en chaque point (ρ_n, ρ_p) , le système de matière homogène présente une instabilité par rapport aux modes de fluctuation dont le nombre d'onde k est compris dans un certain intervalle, dont on peut noter l'extension $\Delta k(\rho_n, \rho_p)$. Ainsi, l'on peut définir la région d'instabilité de la matière homogène par rapport à la formation d'agrégats comme l'ensemble des points pour lesquels Δk est non nul. Ceci revient à décrire l'enveloppe de toutes les k-spinodales. En effet, il n'existe pas de valeur de k telle que la région couverte englobe toutes les autres, les influences en k^2 et $1/k^2$ agissant sur différentes régions du plan des densités. (Remarquons que pour le cas $\rho_c = 0$, au contraire, cette enveloppe n'est rien d'autre que la spinodale thermodynamique, soit la k-spinodale pour k = 0).

La figure 6.5 présente une série de k-spinodales, illustrant la formation de ce que nous appellerons l'enveloppe d'instabilité, qui les contient toutes. Cette enveloppe se construit en déterminant en chaque point la valeur de k conduisant à la plus petite valeur propre $c_{<}(k)$. La courbe recherchée est la frontière pour laquelle cette valeur minimale de courbure est 0. On peut remarquer que les k-spinodales les plus étendues (k = 80 à 100 MeV/c) sont très proches de l'enveloppe, sans y correspondre tout à fait.

Les enveloppes d'instabilité obtenues avec les différentes paramétrisations de Skyrme (Sly230a, SGII et SIII) sont données sur la figure 6.6 pour trois températures différentes, T = 0, 4 et 10 MeV. Malgré la différence d'extension de l'intervalle Δk que nous avions constatée entre Sly230a et SGII sur la figure 6.2, nous trouvons ici à nouveau un comportement semblable pour ces deux forces. Ceci vient du fait que l'enveloppe d'instabilité est essentiellement déterminée par les k-spinodales de plus grande extension, et par conséquent ne dépend pas de l'extension de Δk . Pour ce qui est de la paramétrisation SIII, elle présente toujours le même caractère atypique pour la matière



FIG. 6.5 – Enveloppe d'instabilité pour Sly230a, avec T = 4MeV (en haut) et 10MeV (en bas). A gauche : k-spinodales pour $k \leq 80MeV/c$, par intervalles de 20MeV/c. Au centre : k-spinodales pour k > 80MeV/c, par intervalles de 40MeV/c. A droite : enveloppe d'instabilité englobant les différentes k-spinodales.

asymétrique. L'on peut noter que, pour les basses températures, l'extension en densité du domaine instable aux environs de la matière symétrique est en accord avec le cas des autres forces. A T = 10 MeV en revanche, la frontière haute densité de l'enveloppe SIII s'écarte de celle des autres forces sur toute la gamme d'asymétrie. Ceci, ainsi que les valeurs plus négatives de $c_{<}$ obtenues sur la figure 6.2, reflète la valeur excessive de l'incompressibilité nucléaire de saturation dans ce jeu de paramètres : soit $K_{\infty} = 357 MeV$ au lieu de 240 MeV environ d'après les interprétations récentes de données sur les résonances géantes [ColG04, Shl04]. Une grande incompressibilité à la saturation induit en effet à une courbure très négative de l'énergie libre dans la direction isoscalaire à basse densité, se traduisant pour la matière homogène par une plus grande instabilité.



FIG. 6.6 – Enveloppes d'instabilité de la matière homogène par rapport à une oscillation de densité, avec dépendance en température et paramétrisation de Skyrme.

6.1.3 Définition du mode le plus instable

Nous venons d'établir que, dans certaines conditions, la présence d'oscillations de densité dans la matière nucléaire est favorable du point de vue de l'énergie libre. Ceci concerne une région contenue dans la spinodale thermodynamique et dont nous appelons la frontière « enveloppe d'instabilité ». Cette région correspond à l'existence d'une valeur négative de la courbure de l'énergie libre dans l'espace des fluctuations de taille finie, pour une valeur au moins du nombre d'onde k. Ainsi, partant d'un état uniforme situé à l'intérieur de cette enveloppe, la matière tend à se décomposer en formant des agrégats, qui résultent de l'amplification d'une oscillation de densité (cf figure 6.1). La taille et la composition de la structure formée, suivant l'hypothèse d'une décomposition k-spinodale dont l'évolution dynamique est déterminée par les conditions d'instabilité à l'instant d'apparition des oscillations, dépendent du mode ($c_{\leq}(k), \vec{u}_{\leq}(k)$) qui se trouve développé.

En un point donné compris dans l'enveloppe d'instabilité, différents modes sont susceptibles de se développer : l'instabilité concerne en général un intervalle fini de valeurs de k. Afin déterminer les caractéristiques des agrégats formés, nous pouvons cependant faire l'hypothèse que la décomposition est dominée par un mode particulier k_0 , qui est le mode le plus instable au point considéré.

Dans une approche dynamique, le mode le plus instable est celui qui conduit à la plus rapide amplification des oscillations [Cho04]. De façon générale, pour un mode d'oscillation donné, l'évolution temporelle des amplitudes est décrite par

$$A_q(t) = A_q(0)e^{-i\omega t} + c.c. (6.26)$$

où la fréquence ω est reliée au nombre d'onde k par une relation de dispersion définie par la dynamique. Pour un nombre d'onde k correspondant à un mode instable, cette fréquence est imaginaire pure : $\omega = i/\tau$. Il en résulte une divergence exponentielle de l'amplitude, en $e^{t/\tau}$. Le

mode le plus instable k_0 est donc tel que $\tau(k_0)$ est minimal : il est donc donné par le minimum obtenu dans la relation de dispersion $\omega^2(k)$, pour laquelle une valeur négative est obtenue sur l'intervalle instable de k. Ainsi, à partir d'un système homogène dans lequel des fluctuations sont générées aléatoirement, l'apparition d'une oscillation de nombre d'onde k^0 provoque l'évolution la plus rapide : son influence domine celle des autres modes [Liu04, ColM05, Wen98, Cho04].

La notion d'évolution temporelle n'est pas traitée dans notre présente approche, qui étudie l'instabilité sur des critères d'énergie libre en considérant des modes d'oscillations statiques. Cependant, pour le contexte d'équilibre local dans lequel nous nous plaçons (approximation de Thomas-Fermi), on a en chaque point \vec{r} une densité $\rho(\vec{r})$ et une pression $P(\vec{r})$ dont l'évolution dynamique s'obtient par les équations de l'hydrodynamique [Lan]. On peut alors en déduire le nombre d'onde correspondant au mode le plus instable, suivant la démarche détaillée dans la référence [Cho04]. L'évolution temporelle du système est donnée par un ensemble de deux relations, l'équation d'Euler et l'équation de continuité :

$$\frac{d}{dt}m\rho\vec{v} = -\nabla P \tag{6.27}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \rho \vec{v} = 0 \tag{6.28}$$

où P est la pression, m la masse des particules constituant le système, ρ la densité de particules au point considéré et \vec{v} la vitesse en ce point. L'équation d'Euler (6.27) exprime la relation fondamentale de la dynamique dans le cas d'une force s'exerçant sur chaque élément de volume, donnée par le gradient de pression. L'équation de continuité (6.28) intervient pour imposer la conservation du nombre de particules dans l'élément de volume considéré.

Considérant de petites fluctuations de densité $\rho(\vec{r}, t) = \rho_0 + \delta \rho(\vec{r}, t)$, la variation de la pression s'exprime par un développement de Taylor faisant apparaître la courbure de la densité d'énergie libre f [Cho04] :

$$P(\vec{r},t) = P_0 + \delta P(\vec{r},t)$$

$$\delta P(\vec{r},t) = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{\rho_0} \delta \rho(\vec{r},t) = \rho_0 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \rho^2}\right)_{\rho_0} \delta \rho(\vec{r},t)$$
(6.29)

Le module d'incompressibilité $K^{-1} = \rho \partial P / \partial \rho$ permet ainsi de faire le lien entre les propriétés thermodynamiques (courbure de l'énergie libre) et la dynamique de propagation d'une fluctuation.

En posant $C = (\partial^2 f / \partial \rho^2)_{\rho_0}$, la linéarisation des équations (6.27) et (6.28) conduit à l'équation du mouvement

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \rho_0 C \triangle \rho \tag{6.30}$$

Pour une oscillation de densité en onde plane de la forme

$$\rho(\vec{r},t) = \rho_0 + \delta\rho(\vec{r},t) \quad avec \quad \delta\rho(\vec{r},t) = A_q e^{i(k\cdot\vec{r}-\omega t)} + c.c. \tag{6.31}$$

on a alors la relation de dispersion

$$\omega^2 = \rho_0 C k^2 \tag{6.32}$$

Ainsi, une courbure négative de l'énergie libre correspond à une fréquence ω imaginaire pure, conformément à ce qui avait été annoncé plus haut concernant l'évolution des modes instables.

En résumé, ces arguments permettent d'attribuer à un mode d'oscillation spatial k dans la direction \vec{u}_{\leq} une fréquence $\omega(k)$ telle que

$$\omega(k)^2 \propto k^2 c_{<}(k). \tag{6.33}$$

Remarquons qu'une même forme de l'équation de dispersion est obtenue dans des théories microscopiques telles que la RPA [Cho04].

La valeur la plus négative de $\omega^2 = (i/\tau)^2$ conduit à la divergence la plus rapide de l'amplitude d'oscillation. Le nombre d'onde k_0 du mode le plus instable est alors donné par la position du minimum de la courbe $k^2c_{\leq}(k)$. Cette valeur se situe nécessairement dans l'intervalle d'instabilité de k, au delà de la valeur k_{min} donnant le minimum de la courbe $c_{<}(k)$, ainsi qu'il est illustré sur la figure 6.7. Dans le cas où l'intervalle d'instabilité se réduit à un point, les deux courbes $c_{<}(k)$ et $k^2c_{<}(k)$ présentent le même minimum de valeur nulle. En l'absence d'intervalle d'instabilité, la courbe $k^2c_{<}(k)$ ne présente pas nécessairement de minimum (hormis en k = 0).



FIG. 6.7 – Détermination du mode le plus instable, correspondant au minimum de $k^2c_{\leq}(k)$ pour une température et un point du plan des densités fixés.

Le nombre d'onde k_0 est celui du mode dominant la décomposition de la matière homogène, affectant ainsi les propriétés des agrégats qui seront finalement formés. D'une part, la taille de ces structures doit être de l'ordre de grandeur de la demie-longueur d'onde associée, $\lambda_0/2 = \pi/k_0$. D'autre part, leur composition dépend de la direction du vecteur propre associé à ce mode, $\vec{u}_{\leq}(k_0)$.

Une vue globale de l'évolution du mode le plus instable dans le plan (ρ_n, ρ_p) est donnée sur la figure 6.8. pour la force de Skyrme Sly230a à une température T = 4MeV. Différentes quantités permettant de caractériser la formation des agrégats sont représentées en lignes de niveaux dans l'ensemble de la région instable.

En haut de la figure 6.8 est représenté le nombre d'onde le plus instable k_0 , ainsi que la demielongueur d'onde $\lambda_0/2$ donnant une estimation de la taille des clusters : l'ordre de grandeur observé est de l'ordre de quelques fm. Les lignes de niveaux sont quasiment symétriques par rapport à l'axe $\rho_n = \rho_p$ (en réalité, pour deux points symétriques $\lambda_0/2$ est légèrement plus faible du côté riche en neutrons). La valeur de $\lambda_0/2$ présente un minimum pour un point à basse densité proche de la matière symétrique, et elle augmente à l'approche du bord de la région d'instabilité. L'allure des lignes de niveaux obtenues montre que la taille des agrégats dépend essentiellement de la densité totale du système initial pour une large gamme d'asymétrie.

En bas de la figure 6.8 sont représentées deux quantités caractérisant la direction du vecteur $\vec{u}_{<}(k_0)$. Ce vecteur donne la direction du mode le plus instable dans l'espace des amplitudes d'oscillation : $\vec{u}_{<} = (A_n, A_p)_{<}$. Tandis que l'oscillation correspondante est amplifiée, les agrégats et le gaz se déplacent dans le plan des densités suivant une direction $\delta \rho_n / \delta \rho_p = A_n / A_p$. Nous exprimons cette direction par le rapport $\delta \rho_3 / \delta \rho = (A_n - A_p)/(A_n + A_p)$. La différence $\rho_3 / \rho - \delta \rho_3 / \delta \rho$ est également représentée, car elle fait apparaître la distillation d'isospin (ρ_3 / ρ étant la direction de Z/A constant).

En l'absence d'effets coulombiens, on aurait par symétrie $\delta \rho_3/\delta \rho = \rho_3/\rho = 0$ le long de l'axe $\rho_n = \rho_p$. Ici, du fait de l'interaction coulombienne, l'amplitude d'oscillation des protons est réduite : ceci conduit à un décalage positif du rapport $\delta \rho_3/\delta \rho$. La ligne de niveau $\delta \rho_3/\delta \rho = 0$ se trouve par conséquent du côté riche en protons. Pour la même raison, la différence $\rho_3/\rho - \delta \rho_3/\delta \rho$ s'annule dans la région riche en neutrons.

Les deux lignes $\delta \rho_3 / \delta \rho = 0$ et $\delta \rho_3 / \delta \rho = \rho_3 / \rho$ délimitent une région dans laquelle les propriétés de distillation de l'isospin se trouvent qualitativement modifiées par les effets coulombiens. Cette



FIG. 6.8 – Représentation en lignes de niveaux des caractéristiques du mode le plus instable obtenu à travers le plan des densités. En haut à gauche : nombre d'onde le plus instable, k_0 (MeV/c). Niveaux régulièrement espacés de 20MeV/c. En haut à droite : demie-longueur d'onde correspondante, $\lambda_0/2$ (fm). Niveaux régulièrement espacés de 0.5fm. En bas à gauche : direction du mode d'oscillation le plus instable $(\delta\rho_3/\delta\rho)_<(k_0)$. Niveaux régulièrement espacés de 0.1. En bas à droite : différence $\rho_3/\rho - (\delta\rho_3/\delta\rho)_<(k_0)$, qui fait apparaître le phénomène de distillation d'isospin $(\rho_3/\rho$ étant la direction de Z/A constant). Niveaux régulièrement espacés de 0.05.

région est illustrée par la figure 6.9. Pour la partie riche en neutrons de cette région, il se forme des agrégats plus asymétriques que le système global : il s'agit de distillation inversée [Pro06]. Pour la partie riche en protons, le rapport $\delta \rho_3 / \delta \rho > 0$ indique que les agrégats formés peuvent être riches en neutrons (il faut pour cela qu'ils atteignent une densité suffisante pour franchir l'axe $\rho_n = \rho_p$). Remarquons que la région concernée par de tels effets est très réduite : la distillation d'isospin ordinaire continue de concerner l'essentiel de la région instable.



FIG. 6.9 – Région de distillation anormale due à l'interaction coulombienne. La direction de séparation de phase est donnée en chaque point par la direction du mode le plus instable : $\delta \rho_3 / \delta \rho = (\delta \rho_3 / \delta \rho)_< (k_0)$. A gauche : dans le plan (ρ_n, ρ_p) , la région de distillation anormale est comprise entre les deux lignes $\delta \rho_3 / \delta \rho = 0$ et $\delta \rho_3 / \delta \rho = \rho_3 / \rho$. A droite : représentation schématique du décalage coulombien de la direction $\delta \rho_3 / \delta \rho$, faisant apparaître les bornes de la région anormale. La ligne en traits-pointillés symbolise la direction qui serait obtenue en l'absence d'effets coulombiens ($\rho_c = 0$).

Une représentation plus quantitative des grandeurs dont la figure 6.8 donne une vue globale est donnée sur la figure 6.10, où l'on donne les différentes valeurs obtenues le long d'un axe $\rho = 0.05 f m^{-3}$, en fonction du rapport protonique Z/A. Deux températures sont comparées pour Sly230a, tandis que pour T = 4MeV on montre les résultats obtenus avec trois paramétrisations de Skyrme différentes (Sly230a, SGII, SIII).

A nouveau, l'on observe que les valeurs prises par k_0 sont quasiment symétriques par rapport à l'axe Z/A = 0.5. La région instable est cependant plus étendue du côté riche en neutrons, où de plus petites valeurs de k_0 peuvent ainsi être atteintes.

La valeur de k_0 diminue lorsque la température augmente. En effet, nous pouvons constater sur la figure 6.4 que la réduction de l'intervalle instable de k avec la température se traduit essentiellement par un abaissement de la borne supérieure : ce qui entraîne le comportement de k_0 observé ici. Comparant les différentes forces, l'on voit de même se refléter en k_0 les différences concernant la borne supérieure de l'intervalle instable de k (*cf* figures 6.2 et 6.4). Les effets de distillation d'isospin, que l'on voit se réduire avec la température, sont quant à eux comparables pour les trois forces.

6.2 Conséquences en physique de la multifragmentation

L'étude de la variation d'énergie libre lorsqu'une oscillation de densité de faible amplitude est introduite dans un état de matière uniforme a permis de rapprocher le travail sur la matière infinie



FIG. 6.10 – Caractéristiques du mode le plus instable, déterminées le long de l'axe $\rho = 0.05 fm^{-3}$. Les points marquent les frontières de la région instable. De gauche à droite : nombre d'onde k_0 , demie-longueur d'onde $\lambda_0/2 = \pi/k_0$, direction $(\delta\rho_3/\delta\rho)_<(k_0)$. En haut : dépendance en température pour l'intéraction Sly230a. En bas : dépendance en paramétrisation de Skyrme pour T = 4MeV.

de la problématique rencontrée pour décrire les petits systèmes, tels que les noyaux.

Au cours d'une collision d'ions lourds aboutissant à une multifragmentation, il se forme initialement un volume de matière qui peut être considérée comme homogène (en première approximation). Remarquons que pour un tel système, le terme monopolaire de l'énergie coulombienne a une valeur finie qui reste constante lorsqu'une fluctuation de densité est introduite. La contribution coulombienne à variation d'énergie libre s'obtient donc, pour ce système fini aussi bien que comme dans notre approche, à partir de la variation de la densité de charge $\delta \rho_c(\vec{r})$. Le développement des fluctuations conduit à la décomposition en fragments du volume de matière formé par la collision.

Notre étude de la transition liquide-gaz de la matière nucléaire, en particulier la formation d'agrégats à partir de la matière uniforme, constitue une approche analytique simplifiée de ce processus : les fragments peuvent être associés à la partie liquide, le gaz étant formé par les particules légères. Dans ce cadre, nous proposons une mise en parallèle de nos résultats avec les propriétés d'isospin observées expérimentalement par l'intermédiaire du coefficient d'isoscaling.

6.2.1 Contexte expérimental : multifragmentation et isoscaling

Dans une expérience de multifragmentation, les fragments décomptés sur un grand nombre d'événements s'arrangent suivant une distribution Y(N, Z), où (N, Z) détermine un type de fragment (comportant N neutrons et Z protons) et Y donne le taux de comptage associé. Représenter Y(N, Z) en fonction de N pour Z fixé, ou inversement, donne les différentes distributions isotopiques des fragments.

Une propriété a été constatée concernant ces distributions, et abondamment étudiée depuis le travail initial de B.Tsang *et al.* [Tsa01a, Tsa01b] : il s'agit de l' « isoscaling ». La propriété d'isoscaling concerne le rapport existant entre les distributions isotopiques obtenues pour deux réactions d'asymétrie globale différente. Par exemple, une première réaction étudiée peut être engendrée par une collision ${}^{112}Sn + {}^{112}Sn$, soit un rapport protonique $(Z/A)_1 = 0.446$; une seconde par une collision ${}^{124}Sn + {}^{124}Sn$, soit $(Z/A)_2 = 0.403$. On observe alors d'après les données
expérimentales que le rapport des distributions Y(N, Z) obtenues dans les réactions (1) et (2) est tel que

$$R_{iso}^{(1,2)}(N,Z) = \frac{Y_2(N,Z)}{Y_1(N,Z)} \propto e^{\alpha_n N + \alpha_p Z}$$
(6.34)

où α_n et α_p sont des coefficients d'isoscaling dont la valeur est approximativement constante pour les différentes distributions isotopiques concernant les fragments de masse intermédiaire ($3 \leq Z \leq 20$). Ainsi, en représentant le logarithme $\ln R_{iso}^{(1,2)}(N,Z)$ en fonction de N pour différentes valeurs de Z fixées, on obtient une série de droites de même pente, α_n . Il en est de même pour les distributions isotones, dont sont déduites le coefficient α_p .

Cette observation trouve une interprétation simple dans le cadre du formalisme grand-canonique, où la probabilité de production d'un fragment (N, Z) prend la forme :

$$Y(N,Z) \propto e^{(-F(N,Z) + \mu_n N + \mu_p Z)/T}$$
 (6.35)

F(N,Z) étant l'énergie libre du fragment considéré, et μ_q (q = n, p) les potentiels chimiques associés aux deux espèces de nucléons.

Considérons alors deux réactions mettant en jeu une même température T mais des asymétries différentes, soit deux sources (1) et (2) telles que $(Z/A)_1 < (Z/A)_2$. Dans ce cas les potentiels chimiques varient $((\mu_q)_1 \neq (\mu_q)_2)$: on retrouve alors l'expression (6.34) du rapport $Y_2(N, Z)/Y_1(N, Z)$, où les coefficients d'isoscaling prennent la forme $\alpha_q = [(\mu_q)_2 - (\mu_q)_1]/T$.

Dans un contexte expérimental, cette relation est une approximation : une température commune est supposée, les émissions de pré-équilibre et les désintégrations secondaires ne sont pas prises en compte, et les effets de taille finie limitent la validité de l'isoscaling pour les fragments lourds. Cependant, la détermination du paramètre d'isoscaling α_q est très précise du point de vue expérimental. Ce paramètre est une façon condensée de présenter les propriétés isotopiques des fragments : il s'agit donc d'une information intéressante pour la théorie. L'observation expérimentale de l'isoscaling suggère que la production isotopique des fragments est dominée par des effets statistiques, ce qui encourage une interprétation en termes des propriétés de la surface d'énergie libre.

6.2.2 Distillation d'isospin et mesure de l'énergie de symétrie

Il a été proposé d'utiliser les paramètres d'isoscaling pour extraire le coefficient d'asymétrie C_{sym} de l'équation d'état de la matière nucléaire. Un tel lien peut être fait dans le formalisme grand-canonique, qui permet d'obtenir la relation approchée suivante [Ono03, She04] :

$$\alpha_n = \frac{4C_{sym}}{T} \left[\left(\frac{Z}{\langle A \rangle} \right)_1^2 - \left(\frac{Z}{\langle A \rangle} \right)_2^2 \right]$$
(6.36)

Voici le résumé de la dérivation qui en est faite dans la référence [Ono03]. Il s'agit tout d'abord d'employer dans l'expression (6.35) une expression de l'énergie libre du fragment faisant apparaître son énergie de symétrie. Pour Z fixé, F est exprimée comme

$$F(N,Z) = aN + b + C\frac{(N-Z)^2}{A}$$
(6.37)

où a, b et C sont des paramètres a priori dépendants de Z, et C(Z) s'identifie au coefficient d'asymétrie de l'élément considéré. Le nombre moyen de neutrons $\langle N \rangle (Z)$ est ensuite assimilé au maximum de la distribution $\overline{N}(Z)$ (approximation de point selle). Ce maximum est déterminé dans un contexte d'équilibre thermodynamique à partir de l'expression (6.35) de la distribution en (N, Z):

$$\left[\frac{\partial}{\partial N}\left(F(N,Z) - \mu_n N - \mu_p Z\right)\right]_{N = \overline{N} \simeq \langle N \rangle} = 0$$
(6.38)

conduisant, pour chaque élément, à

$$C(Z)\left(1 - 4(\frac{Z}{\langle A \rangle})^{2}\right) = \mu_{n} - a$$
(6.39)

En faisant la différence de cette relation obtenue pour deux réactions à la même température telles que $(\mu_n)_2 - (\mu_n)_1 = T\alpha_n$, on retrouve alors l'expression (6.36). Pour cette expression toutefois, C(Z) a été remplacé par une valeur commune C_{sym} en raison de la faible dépendance en Z des rapports isotopiques moyens Z/ < A >. Chaque valeur $(Z/ < A >)_i(Z)$ (i = 1, 2) est ainsi assimilée à la fraction protonique moyenne de l'ensemble de la partie liquide pour chaque réaction, $(Z/A)_{liq,i}$.

Cependant, cette quantité n'est pas non plus accessible par l'expérience. En effet, les fragments détectés ont subi des désexcitations secondaires qui les ont rapprochés de la vallée de stabilité par rapport à leur contenu isotopique initial, lequel se trouve effacé dans l'information expérimentale. Pour cette raison, on trouve ailleurs dans la littérature [Lef05, Bot02, Tsa01b] le recours à une approximation supplémentaire, qui consiste à assimiler la fraction protonique moyenne des fragments à celle de la source Z_0/A_0 . La source est le système global formé par la collision de deux noyaux, à partir duquel se forment les fragments : son asymétrie est assimilée à celle de la somme des deux noyaux. Ceci se justifie par le fait que l'analyse expérimentale sélectionne les événements produits en collisions centrales, pour lesquelles la cible et le projectile interagissent en totalité. On aboutit alors à la formule suivante :

$$\alpha_n = \frac{4C_{sym}^0}{T} \left[\left(\frac{Z_0}{A_0} \right)_2^2 - \left(\frac{Z_0}{A_0} \right)_1^2 \right]$$
(6.40)

Cette expression correspond à une approximation de faible température, pour laquelle dans un scénario d'équilibre la fraction protonique des fragments converge vers celle de la source. Ce n'est cependant pas le cas en général : ainsi la valeur de C_{sym}^0 obtenue avec l'équation (6.40) peut se révéler différente de la valeur C_{sym} qui aurait été fournie par l'équation (6.36). Que l'on soit à l'équilibre avec une température finie, ou que la fragmentation soit opérée par un processus dynamique (décomposition spinodale), l'on peut s'attendre à l'intervention des effets de distillation d'isospin. Ainsi les fragments, associés à la partie liquide, ne devraient pas avoir le même contenu isotopique que la source donnant l'asymétrie du système global. La mesure de C_{sym} obtenue à partir des coefficients d'isoscaling devrait donc être affectée par l'approximation faite dans l'équation (6.40).

Notre étude de la matière nucléaire infinie ne permet pas d'énoncer des prédictions quantitatives concernant le contenu isotopique des fragments produits lors des différents mécanismes de transition de phase envisageables. Cependant, elle a permis de constater la robustesse du phénomène de distillation d'isospin, qui trouve sa source dans la minimisation de l'énergie de symétrie et n'est que peu affecté par les effets de surface et d'interaction coulombienne. Nous pouvons alors envisager une estimation de l'influence de la distillation d'isospin, à savoir un ordre de grandeur de la déformation encourue par la mesure de C_{sym} lorsque ce phénomène n'est pas pris en compte.

Nous proposons ici d'étudier la valeur de C_{sym} qui peut être obtenue dans notre approche à partir de l'équation (6.36), en travaillant sur deux systèmes (1) et (2) dont les asymétries correspondent respectivement à celles des noyaux ^{112}Sn et ^{124}Sn . Nous sommes en mesure de comparer trois approches différentes de la séparation de phase :

- l'équilibre de Gibbs, pour lequel la position des phases est déterminée par la construction de l'enveloppe convexe de l'énergie libre $f^h(\rho_n, \rho_p)$ d'un système infini et homogène;
- la décomposition spinodale, qui sépare le système en deux phases infinies par un processus dynamique, suivant la direction de courbure minimale de f^h à l'instant initial de formation des phases;
- la décomposition dynamique en agrégats, suivant le mode d'oscillation de densité le plus instable déterminé à partir de la matrice de courbure de l'énergie libre f dans l'espace des fluctuations de densité.

Les résultats déduits de ces approches dépendent du choix de différents paramètres. Tout d'abord, il nous faut connaître la densité de la source à l'instant initial de la séparation de phase, afin de situer le point pour lequel doit être déterminée la direction de séparation de phase : nous appelons cette densité ρ_{ini} . Dans le cas de l'équilibre, la donnée de ce point détermine la position du liquide correspondant, situé sur la courbe de coexistence. Dans le cas des processus dynamiques, on ne peut en déduire que la direction de séparation de phase, en considérant que ces mécanismes sont suffisamment rapides pour que la formation des phases soit dominée par le développement du mode le plus instable présent à l'instant initial. Afin de déterminer la fraction protonique $(Z/A)_{liq}$ intervenant dans le calcul de C_{sym} , il nous faut alors un paramètre de plus : la densité atteinte par la partie liquide à l'instant où les phases deviennent séparées, que nous appelons ρ_{sep} . L'instant de séparation, dit de « freeze-out », est celui où les phases cessent tout échange de matière, atteignant ainsi leur composition définitive (du point de vue de la séparation de phase : il n'est pas question ici des désintégrations secondaires).

Les modèles de transports dynamiques [Bar05, Ono03] indiquent que la formation des fragments a lieu à une densité relativement bien définie à l'intérieur de la région spinodale. Cette densité est déterminée par la dynamique de collision. Ainsi, une valeur peut être fixée pour ρ_{ini} : elle doit typiquement se situer aux alentours de $\rho_0/3$, ρ_0 étant la densité de saturation de la matière nucléaire. Pour l'étude que nous proposons ici, la valeur de densité initiale est fixée à $\rho_{ini} =$ $0.05 fm^{-3}$.

Les différentes directions de séparation de phase obtenues le long de l'axe $\rho = \rho_{ini}$ sont représentées sur la figure 6.11 en fonction de la fraction protonique Z/A du système global initial. La position des systèmes (1) et (2) que nous souhaitons étudier sont indiquées.

Deux températures ont été envisagées : T = 4 et 10 MeV. La première est une valeur absolue typique pour la multifragmentation. Cependant, notre étude concerne un système infini : dans le cas des noyaux, la surface et le terme monopolaire de l'interaction coulombienne entraînent un décalage de l'échelle d'énergie de liaison. Il en résulte une réduction de la température critique d'un facteur voisin de 2 par rapport au cas de la matière nucléaire [Ric01]. Par ailleurs, l'universalité associée aux phénomènes critiques [Leb87] implique qu'une même phénoménologie doit se retrouver pour les mêmes valeurs de variables réduites, T/T_c , ρ/ρ_c , P/P_c . Par conséquent, une température de 10 MeV semble indiquée pour notre étude, en vue d'une mise en parallèle avec la multifragmentation.

Le haut de la figure 6.11 montre les directions de séparation de phase obtenues avec les différents mécanismes (équilibre, décomposition spinodale et formation d'agrégats). Nous pouvons voir que, pour une température de 4MeV, la distillation d'isospin à l'équilibre est négligeable : il faudrait étudier des noyaux beaucoup plus exotiques pour percevoir son effet. Ce n'est cependant pas le cas pour les mécanismes dynamiques : déjà pour de faibles asymétries, y compris pour les deux systèmes auxquels nous nous intéressons ici, la direction de séparation de phase s'écarte sensiblement de la direction de Z/A constant. Pour une température de 10MeV, cet effet concerne également le cas de l'équilibre.

Les directions de séparation de phase concernant les systèmes (1) et (2) sont représentées dans le plan des densités au bas de la figure 6.11. Dans le cas de l'équilibre, la partie liquide a une position fixée par la ligne de coexistence. Pour les processus dynamiques en revanche, pour déterminer la composition du liquide il faut imposer la densité ρ_{sep} afin de fixer la position qu'il occupe le long de la droite de séparation de phase, dont notre approche établit la direction. La densité ρ_{sep} est nécessairement comprise entre deux bornes, qui sont la densité de la source à l'instant initiale de la séparation de phase (ρ_{ini}) et la densité de saturation de la matière nucléaire (ρ_0) : cependant, aucun principe fondamental ne permet d'en connaître la valeur. Généralement, l'hypothèse est faite que les fragments atteignent quasiment la densité de saturation avant d'être séparés, soit $\rho_{sep} \simeq \rho_0$. De récents calculs AMD (Anstisymmetrized Molecular Dynamics) semblent toutefois indiquer que des densités inférieures, de l'ordre de $0.1 fm^{-3}$, seraient plus réalistes [She04, On04]. Pour notre étude, nous envisageons pour ρ_{sep} l'ensemble de l'intervalle [ρ_{ini} , ρ_0].

Connaissant les directions de séparation de phase, calculées pour ρ_{ini} fixé, nous pouvons déterminer en fonction de ρ_{sep} les rapports $(Z/A)_{liq,i}$ atteintes par chacun des systèmes (1) et (2) au terme de la séparation de phase : c'est ce que représente le haut de la figure 6.12. On



FIG. 6.11 – Directions de séparation de phase à $\rho = \rho_{ini} = 0.05 fm^{-3}$, pour T = 4 et 10 MeV. Pointillés : équilibre. Trait fin : décomposition spinodale. Trait épais : décomposition en agrégats. En haut : direction de séparation en fonction de Z/A le long de l'axe $\rho = \rho_{ini}$. En bas : représentation des directions suivies par la partie liquide dans le plan des densités, pour deux systèmes dont les asymétries correspondent à ¹¹²Sn et ¹²⁴Sn. Les courbes de coexistence et spinodale thermodynamique sont représentées (courbes extérieures), avec les points critiques. L'enveloppe d'instabilité de la matière homogène par rapport à toutes les oscillation de densité est également tracée. Les axes $\rho = \rho_{ini}$ et $\rho = \rho_0$ donnent les limites de la densité ρ_{sep} que peut avoir la partie liquide à l'instant de séparation des phases suite à un processus dynamique. Pour l'équilibre de phase, la position du liquide est fixée par la courbe de coexistence.

peut alors en déduire (toujours en fonction de ρ_{sep}) le coefficient d'asymétrie C_{sym} défini par l'équation (6.36), et le comparer à sa valeur approchée C_{sym}^0 donnée par l'équation (6.40). Le rapport C_{sym}/C_{sym}^0 ainsi obtenu est montré en bas de la figure. Pour une température de 4MeV et un scénario d'équilibre, peu de différence apparaît, conformément aux prédictions du modèle statistique SMM (Statistical Multifragmentation Model) [Bot02]. Cependant, les effets de distillation d'isospin non négligeables associés aux processus dynamiques affectent les rapports protoniques $(Z/A)_{liq,i}$ de telle sorte que le coefficient C_{sym}^0 se trouve multiplié par un facteur conséquent. Ceci implique que les faibles valeurs de C_{sym} obtenues dans des études pour lesquelles la relation (6.40) est employée [Lef05] pourrait être interprétée, de façon alternative, comme un signal de distillation de l'isospin, si la fragmentation se produit hors équilibre.



FIG. 6.12 – Influence de la direction de séparation de phase sur la mesure du coefficient d'asymétrie C_{sym} . Températures T = 4 et 10 MeV. Cette étude est faite en fonction de ρ_{sep} , densité de la partie liquide à l'instant de séparation des phases dans un processus dynamique. Pointillés : équilibre (dans ce cas ρ_{sep} est fixé par la courbe de coexistence pour chacun des deux systèmes : pour alléger la représentation ces deux valeurs sont ici approximées par une valeur commune ρ_{eq}). Trait fin : décomposition spinodale. Trait épais : formation de fragments. En haut : évolution des rapports protoniques de la partie liquide $(Z/A)_{liq,i}$ pour chacun des deux systèmes considérés (i = 1, 2), correspondant aux asymétries de ¹¹²Sn et ¹²⁴Sn. En bas : conséquence sur la mesure du coefficient d'asymétrie, exprimée par le rapport C_{sym}/C_{sym}^0 . C_{sym} est obtenu en fonction des fractions protoniques $(Z/A)_{liq,i}$, tandis que C_{sym}^0 est donné par l'approximation $(Z/A)_{liq,i} \simeq (Z/A)_i$ (où $(Z/A)_i$ est la fraction protonique de la source i = 1, 2).

La figure 6.13 illustre l'évolution des tendances observées sur la figure 6.12 si l'on considère des systèmes dont l'asymétrie correspond à celle de noyaux exotiques tels que ^{100}Sn (riche en protons) et ^{132}Sn (riche en neutrons). Lorsque des systèmes plus asymétriques sont étudiés, la distillation d'isospin est accentuée, soit une plus forte évolution du Z/A de la partie liquide. Cependant, le rapport C_{sym}/C_{sym}^0 étant non-linéaire en fonction des différentes valeurs de Z/A qu'il met en jeu, son évolution ne se déduit pas directement de l'importance de l'effet de distillation : une évolution non-triviale est attendue avec l'emploi de noyaux exotiques.



FIG. 6.13 – Évolution du rapport C_{sym}/C_{sym}^0 pour différents couples de réactions (1, 2). Pour le couple de référence (a), l'asymétrie du système (1) est celle de ^{112}Sn , l'asymétrie du système (2) est celle de ^{124}Sn . Pour le couple (b), le système (1) prend l'asymétrie de ^{100}Sn (matière symétrique). Pour le couple (c), le système (2) prend l'asymétrie de ^{132}Sn . La dépendance de C_{sym}/C_{sym}^0 par rapport à la distillation d'isospin mise en jeu est non triviale.

Chapitre 7

Contexte astrophysique : matière nucléaire avec électrons

Dans le chapître précédent, nous nous sommes intéressés au rapprochement entre notre étude de la matière nucléaire infinie et celle du phénomène de multifragmentation observé dans les collisions d'ions lourds. En particulier, nous avons proposé que la formation de fragments peut s'interpréter comme le résultat d'une instabilité liée à la transition de phase de type liquide-gaz que présente l'équation d'état de la matière nucléaire. La région spinodale obtenue dans une approche thermodynamique (système homogène et infini), se traduit en effet par une région d'instabilité par rapport à la formation de clusters lorsque des fluctuations de taille finie sont envisagées.

En astrophysique, les étoiles compactes sont potentiellement concernées par la transition liquidegaz de la matière nucléaire. Un astre compact est formé lorsqu'une étoile, ayant achevé les réactions nucléaires exothermiques en son coeur, subit un effondrement gravitationnel. Le noyau de l'étoile, représentant typiquement une masse de $1.4M_{\odot}$ (où M_{\odot} est la masse solaire), se trouve alors réduit à un rayon de seulement quelques kilomètres. Il présente alors des densités de matière très élevées, pouvant atteindre une valeur de l'ordre de quelques ρ_0 au centre (ρ_0 étant la densité de saturation de la matière nucléaire). Cette densité diminue vers la périphérie jusqu'à quasiment s'annuler à la frontière entre l'objet compact et le milieu interstellaire. Ainsi, un vaste domaine de densité entre en jeu : l'on s'attend à rencontrer dans cet intervalle la région de transition de phase liquide-gaz de la matière nucléaire.

La présence d'une transition liquide-gaz dans la matière d'un astre dense a d'importantes conséquences sur les propriétés de l'étoile. Concernant les étoiles à neutrons, qui sont des objets compacts froids, cette transition pourrait se traduire par la présence de structures exotiques, portant le nom de phases « pasta » [Rav83, Wat03, Hor04a, Las87], localisées dans la partie interne de l'écorce.

Une étoile à neutrons n'a pas toujours été froide : elle a été formée dans l'explosion d'une supernova, un phénomène particulièrement énergétique au cours duquel la température peut atteindre plus de 20*MeV* [Bur86, Pra01]. La proto-étoile à neutrons correspond au coeur de l'étoile en fin de vie, qui s'effondre sur lui-même tandis que les couches externes sont projetés dans l'espace. Les différentes propriétés de la proto-étoile sont déterminantes pour la dynamique de l'explosion. L'expulsion des couches externes nécessite en effet la formation d'une onde de choc et sa propagation jusqu'à la surface de l'étoile. Cette onde de choc prend naissance lorsque les couches externes tombant vers le centre de l'étoile se heurtent au coeur devenu incompressible. Cependant, les modélisations de ce processus menées à partir de calculs hydrodynamiques ne parviennent pas à reproduire l'explosion de l'étoile, l'onde de choc disparaissant avant d'atteindre la surface [Bur03]. Pour remédier à cette situation, il a été proposé dès la fin des années 1970 que les neutrinos, produits en grande quantité au cours de l'effondrement, jouent un rôle clé dans la dynamique de l'onde de choc [Arn77, Fre77, Bet79, Bur81], En particulier, s'ils se trouvent un moment piégés dans le milieu avant d'être soudainement relâchés, ils peuvent exercer une pression susceptible de raviver l'onde de choc, permettant ainsi l'explosion de l'étoile. La présence d'une instabilité de type liquide-gaz dans la matière de la proto-étoile est cruciale pour l'étude de la propagation des neutrinos dans le milieu. Leur libre parcours moyen dépend en effet de la structure de la matière à l'échelle microscopique. Si le milieu présente des fluctuations dont la taille est comparable à la longueur d'onde des neutrinos, la section efficace d'interaction peut s'accroître en raison d'un mécanisme de diffusion cohérente : le libre parcours moyen peut alors être fortement réduit (milieu opaque aux neutrinos) [MarJ04, Hor05].

Nous allons ici reprendre notre étude de la transition liquide-gaz nucléaire, en l'adaptant à la description de la matière d'étoile : au minimum, ceci implique qu'il faut ajouter aux constituants de la matière nucléaire (à savoir, en l'absence de baryons exotiques, neutrons et protons) un gaz d'électrons.

L'influence de cette espèce supplémentaire sera discutée au long du présent chapître. Dans un premier temps, nous présenterons comment les électrons sont intégrés dans notre approche. Nous reviendrons alors sur le cas de la transition de phase thermodynamique, pour constater la suppression de la séparation liquide-gaz du fait de l'incompressibilité du gaz d'électrons [Cho05]. Nous retrouverons ensuite l'existence d'une région pour laquelle la matière homogène se décompose en clusters, l'instabilité spinodale de la matière nucléaire pouvant à nouveau se manifester dans la réponse du système aux fluctuations de taille finie. Nous évoquerons finalement comment les résultats obtenus se situent par rapport à la condition d'équilibre β , ainsi que la signification qu'ils peuvent prendre compte tenu des différentes échelles de temps intervenant dans l'évolution de l'étoile.

7.1 Neutralisation de la matière homogène

Les objets astrophysiques compacts sont le siège de phénomènes électro-magnétiques complexes. C'est d'ailleurs ce qui les rend observables : l'existence des étoiles à neutrons a ainsi été révélée par la détection des pulsars, qui se manifestent par de puissante émissions électromagnétiques. Cependant, contrairement aux noyaux atomiques, de tels objets doivent être électriquement neutres dans leur globalité. Afin d'éviter que l'énergie coulombienne atteigne des valeurs excessives, il est même nécessaire que la charge électrique s'annule strictement sur toute portion macroscopique de l'étoile, ce qui concerne déjà des distances très inférieures à la dimension globale de l'objet compact.

Pour l'ensemble d'une étoile compacte, la neutralisation de la charge électrique résulte de la présence de différentes espèces, hadroniques et leptoniques, faisant intervenir dans les régions de haute densité des constituants exotiques tels qu'hypérons et muons [Gle01]. Dans le cadre de l'étude des instabilités de type liquide-gaz, la région qui nous intéresse correspond à une densité inférieure à la densité de saturation. Dans ce cas, les hadrons en présence constituent la matière nucléaire ordinaire : neutrons et protons, et ce sont les électrons qui neutralisent la charge des protons. Remarquons que des neutrinos peuvent se trouver piégés dans la matière que nous étudions. Ces neutrinos participent alors à l'équilibre β , ce qui affecte la composition de l'étoile : en ce sens, leur présence peut jouer un rôle dans la transition de phase, comme nous le verrons à la fin de ce chapître.

7.1.1 Contrainte d'électroneutralité stricte

Considérons d'abord le cas d'une matière homogène, formée de neutrons, protons et électrons. Il est important de noter que, dans un tel cas, la limite thermodynamique impose une électroneutralité stricte à l'échelle macroscopique. Cela signifie que l'existence d'une densité de charge (même infime) entraînerait la divergence de l'énergie coulombienne par unité de volume, $\mathcal{E}^c \propto \rho_c^2 V^{2/3}$, le volume V tendant vers l'infini. Ainsi, pour l'étude proposée, les électrons n'apportent pas un degré de liberté supplémentaire. En particulier, les fluctuations de la densité des électrons et des protons ne peuvent être indépendantes, car cela entraînerait une fluctuation de la densité de charge $\rho_c = e(\rho_p - \rho_e)$ interdite par la contrainte d'électroneutralité stricte.

Cette contrainte a d'importantes conséquences pour la thermodynamique d'un système soumis à l'interaction coulombienne, en particulier sur la présence et l'ordre d'une éventuelle transition de phase [Cho05]. Considérons ici le cas d'une séparation de phase thermodynamique (séparation en deux systèmes infinis et homogènes) : la même contrainte d'électroneutralité doit s'appliquer à chacune des deux phases. Les fonctions thermodynamiques du système ne sont définies que dans le sous-espace des observables tel que $\rho_c = 0$. La contruction de Gibbs devant être effectuée dans ce sous-espace, les conditions d'équilibre de phase s'en trouvent modifiées : en particulier, le potentiel chimique μ_c associé à la densité ρ_c ne participe pas à ces conditions. Pour l'étude de la matière homogène, nous rechercherons donc la présence d'une transition de phase en étudiant l'énergie libre du système dans l'espace (ρ_n, ρ_p), la contribution des électrons étant déterminée par leur densité $\rho_e = \rho_p$ (égalité stricte).

7.1.2 Gaz parfait d'électrons

Voyons maintenant quelle est la contribution des électrons à l'énergie libre du système.

De façon générale, la présence des deux espèces chargées occasionne des interactions coulombiennes proton-proton, électron-électron et proton-électron. Cependant, en conséquence de l'électroneutralité stricte imposée à la matière homogène que nous étudions, toute interaction coulombienne est supprimée : sa prise en compte est contenue dans la condition $\rho_e = \rho_p$. Une fois cette condition imposée, protons et neutrons se rapportent au modèle de la matière nucléaire non-chargée. Les électrons quant à eux forment un gaz sans interaction, c'est à dire un gaz de Fermi parfait de particules de masse m_e . En l'absence de couplage entre matière nucléaire et gaz électronique, la fonction de partition décrivant l'ensemble du système se factorise comme :

$$Z_{MNe} = Z_{MN} Z_e \tag{7.1}$$

ce qui se traduit par l'additivité des énergies libres

$$f_{MNe} = f_{MN} + f_e \tag{7.2}$$

où f_{MN} est l'énergie libre de la matière nucléaire, que nous avons déterminée précédemment (soit $f^h(\rho_n, \rho_p)$ pour un système homogène), et f_e la contribution due au gaz d'électrons. Cette contribution peut s'écrire

$$f_e(\beta, \rho_e = \rho_p) = \mathcal{E}_e^k - \frac{s_e(\rho_e)}{\beta}$$
(7.3)

où \mathcal{E}_e^k est la densité d'énergie cinétique des électrons, et s_e leur densité d'entropie. Chacun de ces termes a une expression connue, dans le cadre du formalisme grand-canonique appliqué à un gaz parfait de fermions. Il ne nous est cependant pas utile de les expliciter. En vue d'étudier l'effet des électrons sur l'instabilité spinodale présente dans la matière nucléaire, nous devons seulement exprimer la modification apportée à la matrice de courbure de l'énergie libre. C'est donc à la dérivée seconde de f_e que nous allons par la suite nous intéresser. Elle définit la susceptibilité χ_e^{-1} du gaz d'électrons, directement reliée à l'incompressibilité de ce gaz, et fait intervenir son potentiel chimique μ_e :

$$\chi_e^{-1} = \frac{\partial^2 f}{\partial \rho_e^2} = \frac{\partial \mu_e}{\partial \rho_e} \tag{7.4}$$

où μ_e est le potentiel chimique des électrons, relié de façon univoque à la densité selon l'intégrale de Fermi :

$$\rho_e = \int_0^\infty \frac{g4\pi p^2 dp}{h^3} \frac{1}{1 + e^{\beta(E_k(m_e, p) - \mu_e)}}$$
(7.5)

Cette relation donne la densité ρ_e en fonction de μ_e : elle contient donc toute l'information concernant la contribution des électrons à la courbure de l'énergie libre. S'il est possible de la traiter par un calcul exact, il est aussi intéressant de noter deux approximations que l'on rencontre fréquemment pour la description du gaz d'électrons : celles d'un gaz ultra-relativiste et dégénéré.

Gaz d'électrons ultra-relativiste

Notons $E_k(m,p)$ l'énergie cinétique d'une particule de masse m et d'impulsion p, dont l'expression exacte relativiste est

$$E_k(m,p) = \sqrt{(p^2c^2 + m^2c^4)} - mc^2 \tag{7.6}$$

Dans le cas des nucléons, une approximation non-relativiste a été utilisée. Ceci est justifié par le fait que, pour les densités considérées, l'impulsion de Fermi p_F est telle que $p_F c \ll m_q c^2$, m_q étant la masse d'un nucléon ¹. Par exemple, pour la matière symétrique à la densité de saturation ρ_0 le moment de Fermi commun aux deux espèces de nucléons vaut environ 260 MeV/c, soit avec $m_q \simeq 940 MeV$ une approximation non-relativiste correcte à mieux que 2% près. La validité de cette approximation s'améliore pour les densités de sous-saturation auxquelles nous nous intéressons.

S'agissant des électrons, le rapport des ordres de grandeur est inversé : $p_F c \gg m_e c^2$. Dans ce cas, non seulement les effets relativistes doivent être pris en compte, mais une expression ultrarelativiste de l'équation (7.6) peut être employée :

$$E_k(m_e, p) \simeq pc \tag{7.7}$$

Cette approximation ultra-relativiste reste valide jusqu'à de très faibles densités (encore valable à 1% près pour des densités d'électrons de l'ordre de $10^{-7} fm^{-3}$).

Gaz d'électrons dégénéré

La petite masse des électrons autorise souvent une approximation supplémentaire, qui est de les assimiler à un gaz dégénéré : ceci consiste à remplacer la distribution de Fermi-Dirac de température finie n(p) par son équivalent à température nulle $n^0(p)$.

Considérons en effet la distribution de Fermi-Dirac $n(\epsilon)$, où ϵ est l'énergie d'un état individuel :

$$n(\epsilon) = 1/\left[1 + e^{\beta(\epsilon-\mu)}\right] \tag{7.8}$$

Pour l'énergie $\epsilon_{1/2}$ telle que $n(\epsilon_{1/2}) = 0.5$, la pente de cette distribution est $-\beta$. Ainsi, $n(\epsilon)$ se distingue d'une fonction de Heavyside essentiellement pour un intervalle $\Delta \epsilon \simeq 1/\beta$: une approximaion de température nulle peut donc être faite si l'on a $\epsilon_F \gg T$ (où ϵ_F est le niveau de Fermi) [Diu89]. Cette condition est remplie d'autant plus facilement que la masse des particules est faible. Comparons en effet la valeur des niveaux de Fermi pour les nucléons et les électrons à température nulle, pour une densité $\rho_0/2$ (correspondant pour les nucléons à la matière symétrique à la densité de saturation). Pour tout type de particule de dégénérescence 2, le moment de Fermi correspondant vaut $p_F \simeq 260 MeV/c$.

- Pour les nucléons, on a $\epsilon_{Fq} = p_F/2m_q^* \simeq 50 MeV$;
- Pour les électrons, l'énergie au niveau de Fermi est ultrarelativiste : on a $\epsilon_{Fe} = p_F c \simeq 260 MeV$.

Un ordre de grandeur concernant le domaine de validité de l'approximation du gaz d'électrons dégénéré est indiqué dans le tableau 7.1. Des densités relativement élevées sont requises, en comparaison des frontières des domaines d'instabilité étudiés. Nous aurons toutefois l'occasion de voir pourquoi cette approximation donne pour notre étude des résultats quasiment indiscernables de ceux d'un calcul de température finie.

7.1.3 Suppression de l'instabilité thermodynamique

Étudions maintenant comment la présence des électrons modifie la matrice de courbure de l'énergie libre qui avait été obtenue pour la matière nucléaire. Nous sommes ici dans le cas de

¹Cette relation fait intervenir la masse nue des nucléons. La masse effective est introduite une fois faite l'approximation d'une énergie cinétique en $p^2/2m$: elle permet alors de réexprimer cette énergie de façon à absorber la dépendance quadratique en impulsion.

	T=5 MeV	T=10 MeV
10%	0.0001	0.0007
1%	0.0043	0.0345

TAB. 7.1 – Densités (en fm^{-3}) correspondant à deux niveaux de validité pour l'approximation de température nulle, selon la température finie considérée. Le pourcentage est l'écart relatif portant sur la valeur de $d\mu_e/d\rho_e$ obtenue.

la matière homogène : la contrainte d'électroneutralité stricte impose $\rho_e = \rho_p$. L'énergie libre du système s'exprime alors toujours dans le plan des densités de neutrons et protons. Elle est donnée par l'équation (7.2), dans laquelle la contribution électronique vaut $f_e(\rho_e = \rho_p)$. Toute variation $\delta \rho_p$ entraîne une variation identique $\delta \rho_e = \delta \rho_p$. En conséquence, la matrice de courbure demeure de dimension 2, avec un terme supplémentaire dû aux électrons (à savoir leur incompressibilité χ_e^{-1}) pour un déplacement dans la direction ρ_p :

$$C^{h}_{MNe}(\rho_n,\rho_p) = \begin{pmatrix} \partial \mu_n / \partial \rho_n & \partial \mu_n / \partial \rho_p \\ \partial \mu_p / \partial \rho_n & \partial \mu_p / \partial \rho_p + \chi_e^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{nn}^{-1} & \chi_{np}^{-1} \\ \chi_{pn}^{-1} & \chi_{pp}^{-1} + \chi_e^{-1} \end{pmatrix}$$
(7.9)

où l'on a noté $\chi_{qq}^{-1} = \partial_{\rho_q} \mu_q$, $\chi_{\bar{q}q}^{-1} = \partial_{\rho_{\bar{q}}} \mu_q$ les susceptibilités de la matière nucléaire. C'est donc le comportement de χ_e^{-1} qui va déterminer l'évolution de l'instabilité avec l'introduction du gaz d'électrons. S'agissant de l'incompressibilité d'un gaz parfait, elle prend uniquement des valeurs positives. Les valeurs propres de la matrice de courbure s'en trouvent augmentées, ce qui revient à dire que l'instabilité est réduite.

Afin de caractériser l'évolution de χ_e^{-1} avec la densité, nous en donnons ici par mesure de simplicité l'expression à température nulle dans l'approximation d'un gaz d'électrons ultra-relativiste. La relation (7.5) se réduit alors à

$$\mu_e = \hbar c \left(3\pi^2 \rho_e\right)^{1/3} \tag{7.10}$$

d'où l'incompressibilité

$$\chi_e^{-1} = \hbar c \left(\frac{\pi^2}{9\rho_e^2}\right)^{1/3} = (\hbar c)^3 \frac{\pi^2}{\mu_e^2}$$
(7.11)

Remarquons déjà que cette expression diverge pour $\rho_e \to 0$. Elle se conforme en cela à un comportement général, qui se retrouve lorsque les expressions exactes sont employées, à température finie comme à température nulle. Nous l'avions déjà observé lors de l'étude de la matière nucléaire : la disparition d'une espèce se traduit par une dérivée infinie pour le potentiel chimique associé.

L'incompressibilité des électrons décroît de façon monotone tandis que la densité augmente : c'est le comportement d'un gaz parfait de fermions. Les densités concernées par notre étude correspondent cependant toujours à une valeur très élevée de χ_e^{-1} , qui domine les autres termes de la matrice. Ainsi, pour le point correspondant à la matière nucléaire symétrique à la densité de saturation ($\rho_n = \rho_p = \rho_0/2$), les dérivées secondes nucléaires valent $\partial \mu_q / \partial \rho_q \simeq 560 MeV. fm^3$ et $\partial \mu_i / \partial \rho_{j \neq i} \simeq -240 MeV. fm^3$, tandis que $\partial \mu_e / \partial \rho_e$ est encore de plus de $1000 MeV. fm^3$.

La région d'instabilité spinodale correspond à une valeur négative du déterminant de la matrice C^h_{MNe} . Etant donnée la symétrie neutron-proton pour la matière nucléaire, ce déterminant s'écrit :

$$\det(C_{MNe}^{h}) = \chi_{qq}^{-1}(\chi_{qq}^{-1} + \chi_{e}^{-1}) - \chi_{q\bar{q}}^{-2} = \det(C_{MN}^{h}) + \chi_{qq}^{-1}\chi_{e}^{-1}$$
(7.12)

La valeur $\chi_{qq}^{-1}\chi_e^{-1}$ étant fortement positive, il en résulte une forte suppression de l'instabilité. En fait, pour les trois forces de Skyrme considérées ici, on ne trouve plus d'instabilité spinodale : c'est ce qu'illustrent les figures 7.1 et 7.2.

La partie gauche de la figure 7.1 représente l'instabilité de la matière nucléaire homogène (en l'absence d'électrons). Pour différentes valeurs fixées de Z/A, la valeur propre c_{\leq} est représentée en fonction de la densité, à T = 10 MeV avec la force de Skyrme Sly230a. Les différentes courbes présentent chacune un minimum, définissant la valeur propre minimale $c^{min}_{<}(Z/A)$. Cette valeur



FIG. 7.1 – Valeur propre minimale de la matrice de courbure obtenue dans la région de transition liquide-gaz de la matière nucléaire, à T = 10 MeV. La présence d'électrons supprime l'instabilité spinodale. Bloc de gauche : courbes $c_{<}(\rho)$ pour différentes valeurs de Z/A, (espacées de 0 à 0.5 par pas de 0.1), pour la matière nucléaire seule (MN) et en présence d'électrons (MN+e). A droite : report du minimum $c_{<}^{min}(Z/A)$ dans les deux cas. Pointillés : matière nucléaire avec électrons à température nulle.

minimale est négative pour certaines des courbes tracées, ce qui marque l'existence d'une région d'instabilité spinodale.

La partie droite met en évidence le domaine d'asymétrie concerné par cette instabilité, par la représentation de $c_{<n}^{min}(Z/A)$. Toujours pour le cas de la matière nucléaire seule, on observe un large intervalle de Z/A pour lequel une valeur propre négative peut être obtenu. Lorsque les électrons sont introduits en revanche, $c_{<n}^{min}$ est toujours positive : l'instabilité spinodale est supprimée. Nous pouvons remarquer que les deux courbes (avec et sans électrons) se rejoignent en Z/A = 0, correspondant à la matière de neutrons. Dans les deux cas en effet, la courbure dans la direction ρ_p devient infinie et la valeur propre minimale s'identifie à la dérivée seconde $\partial^2 f_{MN}^h/\partial \rho_n^2$ (soit, selon les propriétés de la matière de neutrons, une quantité positive).

Les plus petites valeurs de $c_{<}$ étant obtenues à température nulle, la suppression totale de l'instabilité est vérifiée en traçant suivant le même procédé $c_{<}^{min}(Z/A)$ à température nulle : la courbe résultante est alors plus basse que pour 10 MeV, mais demeure entièrement positive.

Un tel résultat est *a priori* dépendant du modèle employé pour décrire l'interaction nucléaire. Nous pouvons vérifier sur la figure 7.2 que l'on aboutit à une conclusion similaire pour les trois paramétrisations des Skyrme Sly230a, SGII et SIII. Il a en revanche été montré que, dans un modèle de champ moyen relativiste, une petite région d'instabilité spinodale est conservée en présence d'électrons [Pro06].

7.2 Fluctuations de taille finie en présence d'électrons

La suppression de l'instabilité spinodale thermodynamique que nous avons constatée en présence d'électrons ne signifie pas la disparition des effets liés à la transition liquide-gaz de la matière nucléaire. Dans le chapître précédent, nous avons étudié l'effet de fluctuations de densité de taille finie dans la matière nucléaire, et établi l'existence d'une instabilité de la matière homogène par rapport à la formation d'agrégats. Nous allons maintenant montrer que la présence d'un gaz d'électrons permet une légère extension de cette région d'instabilité.



FIG. 7.2 – Suppression de l'instabilité spinodale en présence d'électrons, pour différentes interactions nucléaires effectives (Skyrme), à T = 0. En haut : valeur propre minimale rencontrée dans le domaine de densité de la transition liquide-gaz, pour chaque fraction protonique fixée $c_{<}^{min}(Z/A)$. En bas : densité correspondant au minimum obtenu. Le point terminant chaque courbe du côté des Z/A élevés marque la disparition du minimum suivi par la courbe, par annulation de la dérivée seconde. (Il existe une autre famille de minima, partant du bord Z/A = 1 pour lequel $c_{<} = \partial \mu_p / \partial \rho_p + \chi_e^{-1}$: cependant, elle concerne des densités plus élevées et correspond également à des valeurs positives.)

7.2.1 Addition d'un degré de liberté

La contrainte d'électroneutralité stricte concerne la matière infinie homogène, pour laquelle une densité de charge infime fait diverger l'énergie coulombienne. Nous avons vu dans le chapître précédent que la situation est différente lorsqu'on considère une distribution de charge fluctuante $\delta \rho_c(\vec{r})$ de moyenne spatiale nulle. Ainsi, pour une distribution sous forme d'onde plane de nombre d'onde k, la densité d'énergie coulombienne prend une valeur finie (proportionnelle à $1/k^2$). Ceci est permis par l'annulation du terme monopolaire de l'interaction, qui est à l'origine de la divergence dans le cas d'une distribution homogène, grâce au gaz uniforme d'électrons.

Ainsi, considérant des fluctuations de densité de taille finie, il est possible d'avoir une charge électrique locale pourvu que la charge globale du système sur une échelle macroscopique soit strictement neutre. Attribuons alors à chacune des trois espèces en présence (neutrons, protons et électrons) une fluctuation de densité en onde plane de vecteur \vec{k} :

$$\rho_q = \rho_q^0 + \delta \rho_q(\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad avec \quad \delta \rho_q(\vec{k} \cdot \vec{r}) = A_q e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + c.c. \tag{7.13}$$

avec maintenant q = n, p, e. L'exigence de neutralité globale se traduit par l'égalité stricte sur les valeurs moyennes $\rho_e^0 = \rho_p^0$. Les amplitudes d'oscillation A_p et A_e sont en revanche indépendantes, permettant l'existence d'une densité de charge ρ_c de la forme

$$\rho_c(\vec{k} \cdot \vec{r}) = A_c e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + c.c.$$

$$vec \quad A_c = e(A_p - A_e)$$

$$(7.14)$$

Nous avons vu dans le chapître précédent que, si k est non-nul, une telle densité de charge introduit dans le système la densité d'énergie coulombienne finie (dont le calcul est donné dans l'annexe A) :

a

$$\delta \mathcal{E}_c = |A_c|^2 \frac{4\pi}{k^2}.\tag{7.15}$$

La variation de l'énergie libre due aux fluctuations de densités doit maintenant s'étudier dans un espace à trois dimensions, correspondant à chacune des amplitudes d'oscillation (A_n, A_p, A_e) . Elle s'exprime sous forme d'une matrice de courbure, qui s'obtient suivant une démarche analogue à celle qui a été détaillée dans le chapître 6. Elle aboutissait alors à la matrice (6.24), notée C_{MN}^f (courbure de l'énergie libre de la matière nucléaire dans l'espace des fluctuations de densité (A_n, A_p)). Compte tenu de la dimension ajoutée par les électrons, nous obtenons dans le cas présent :

$$\mathcal{C}_{MNe}^{f} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mu_{n}}{\partial \rho_{n}} & \frac{\partial \mu_{n}}{\partial \rho_{p}} & 0 \\ \frac{\partial \mu_{p}}{\partial \rho_{n}} & \frac{\partial \mu_{p}}{\partial \rho_{p}} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{e}^{-1} \end{pmatrix} \\
+ 2k^{2} \begin{pmatrix} C_{nn}^{\nabla} & C_{np}^{\nabla} & 0 \\ C_{pn}^{\nabla} & C_{pp}^{\nabla} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
+ \frac{4\pi e^{2}}{k^{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$
(7.16)

où l'on voit intervenir les électrons dans le premier terme (par leur incompressibilité) et dans le troisième terme (par l'interaction coulombienne).

La grande incompressibilité χ_e^{-1} était responsable de la suppression de l'instabilité dans la matrice C_{MNe}^h , concernant la matière homogène. Elle avait alors pour effet de bloquer le degré de liberté lié à la densité de protons. Ce n'est plus le cas pour cette matrice à trois dimensions, dans laquelle les électrons apportent un degré de liberté supplémentaire. Dans le cas limite $\chi_e^{-1} \to \infty$, les fluctuations liées aux electrons sont supprimées, et l'on retrouve la matrice C_{MN}^f étudiée dans le chapître précédent. Ainsi, les électrons ne peuvent cette fois-ci supprimer l'instabilité obtenue pour

la matière nucléaire seule. Au contraire, le degré de liberté qu'ils apportent, bien qu'il soit fortement limité par la valeur de χ_e^{-1} , permet de minimiser davantage l'énergie libre. Cette optimisation passe par un compromis entre la tendance à réduire l'énergie coulombienne (incitant ρ_e et ρ_p à fluctuer en phase) et la forte incompressibilité du gaz d'électrons (tendant à supprimer les fluctuations $\delta \rho_e$). La contribution des électrons à la matrice de courbure \mathcal{C}_{MNe}^f que nous avons maintenant à étudier constitue donc une perturbation de la matrice \mathcal{C}_{MN}^f étudiée auparavant pour la matière nucléaire seule.

7.2.2 Perturbation des modes instables

Nous allons maintenant nous concentrer sur la comparaison entre les résultats obtenus pour la matière nucléaire seule et en présence d'électrons, s'agissant de l'instabilité par rapport aux fluctuations de taille finie.

Rappelons que deux situations avaient été étudiées pour la formation de clusters dans la matière nucléaire : avec et sans effet coulombien. Le fait de ne pas prendre en compte l'interaction coulombienne nous permettait alors de faire la part de la contribution purement nucléaire à la modification des modes instables : à savoir la dépendance en gradients de densité de l'interaction effective. Considérant maintenant la présence d'un gaz neutralisant ($\rho_e^0 = \rho_p^0$), chacune de ces deux situations peut s'interpréter comme un cas limite du comportement de ce gaz. Pour une fluctuation des densité en onde plane de nombre d'onde k fini, l'effet du gaz neutralisant dépend de son incompressibilité χ^{-1} :

- − Dans la limite $\chi^{-1} \to \infty$ (soit $\chi^{-1} \gg \alpha/k^2$), nous avons un gaz figé uniforme : l'étude du système est alors équivalente à celle de la matière nucléaire seule avec effets coulombiens. Un tel cas correspond au traitement du gaz d'électrons dans une approximation d'incompressibilité infinie, qui est faite dans plusieurs travaux [Pet95a, Wat04, Mag01].
- A l'inverse, si l'on suppose une incompressibilité nulle, seule l'énergie coulombienne est modifiée par une fluctuation de densité du gaz neutralisant : la minimisation de l'énergie libre passe alors par la suppression de l'énergie coulombienne par une fluctuation $\delta \rho_e(\vec{r}) = \delta \rho_p(\vec{r})$. On retrouve ainsi le cas de la matière nucléaire sans interaction coulombienne.

Les électrons jouant ici le rôle de gaz neutralisant forment un gaz de Fermi : ils ont une incompressibilité χ_e^{-1} finie. Ainsi, les résultats obtenus en présence de ce gaz doivent être compris entre les deux cas limites que nous venons d'évoquer. C'est ce que nous allons maintenant vérifier.

Commençons par le cas d'un point du plan des densités nucléaires, situé dans la région instable pour la matière homogène non chargée : l'évolution des modes propres de C_{MN}^f est étudiée en fonction du nombre d'onde k de la fluctuation. Un exemple en est donné par la figure 7.3, avec l'interaction de Skyrme Sly230a, pour une température de 5MeV. Le mode propre de coubure minimale est caractérisé par la valeur propre $c_{<}$, et le vecteur propre $\vec{u}_{<}$ qui définit ici une direction dans un espace à trois dimensions, (A_n, A_p, A_e) . Nous avons représenté cette direction par deux quantités. La direction de séparation de phase dans le plan des densités nucléaires est comme auparavant représentée par l'écart à la direction isoscalaire $\delta\rho_3/\delta\rho$, avec $\rho_3 = \rho_n - \rho_p$ et $\rho = \rho_n + \rho_p$. La participation des électrons à la fluctuation de densité est quant à elle donnée par le rapport $\delta\rho_e/\delta\rho_p$. Ces deux rapports définissent la direction de séparation de phase dans l'espace des densités (ρ_n, ρ_p, ρ_e) .

Le rapport $\delta \rho_e / \delta \rho_p$ est représenté en bas de la figure 7.3. Il constitue une mesure de l'entraînement du gaz d'électrons dans la fluctuation des protons pour réduire l'énergie coulombienne, contre l'incompressibilité χ_e^{-1} . Son évolution en k présente une allure caractéristique, qui est essentiellement indépendante de la force nucléaire. En effet, la courbe obtenue est proche de celle qui résulte du calcul d'une matrice où seules l'interaction coulombienne et l'incompressibilité sont prises en compte. Cette matrice vidée de l'interaction nucléaire s'exprime dans l'espace à deux dimensions (A_p, A_e) par :

$$C_0 \begin{pmatrix} \alpha/k^2 & -\alpha/k^2 \\ -\alpha/k^2 & \alpha/k^2 + \chi_e^{-1} \end{pmatrix}$$
(7.17)

où l'on a posé $\alpha = 4\pi e^2$. La direction du vecteur associé à la plus petite valeur propre est alors :

$$(\delta\rho_e/\delta\rho_p)_0 = -\frac{k^2\chi_e^{-1}}{2\alpha} + \sqrt{\left(\frac{k^2\chi_e^{-1}}{2\alpha}\right)^2 + 1}$$
(7.18)

Pour une densité $\rho_p^0 = \rho_e^0$ donnée, l'incompressibilité χ_e^{-1} est une constante : la dépendance en k de l'expression est due à l'interaction coulombienne. Pour des valeurs de k élevées, cette interaction devient négligeable et le gaz d'électrons demeure quasiment uniforme. En revanche, pour $k^2/\alpha \ll \chi_e$, les effets coulombiens dominent et le gaz d'électrons suit le déplacement des protons. On a donc :

- $\begin{array}{l} \ \delta\rho_e/\delta\rho_p \to 0 \ \text{pour} \ k \to \infty \\ \ \delta\rho_e/\delta\rho_p \to 1 \ \text{pour} \ k \to 0. \end{array}$

L'allure de cette courbe est d'autant plus piquée aux basses valeurs de k que la compressibilité χ_e^{-1} est élevée, ce qui correspond du point de vue des densités nucléaires à une faible densité de protons. Un moyen de caractériser cette allure en fonction de ρ_p est de représenter la valeur $k = k_{1/2}(\rho_p)$ pour laquelle $(\delta \rho_e / \delta \rho_p)_0 = 1/2$, donnée par la relation $k_{1/2}^2 \chi_e^{-1} = 3\alpha/2$. Cette évolution est indiquée sur la figure 7.4, où l'on voit que $k_{1/2}$ varie lentement avec la densité ρ_p .

Revenons-en à l'étude du rapport $\delta \rho_e / \delta \rho_p$ présentée sur la figure 7.3. Nous venons de voir que son évolution en k est gouvernée par l'interaction Coulombienne. Comparons maintenant les courbes obtenues selon que l'interaction nucléaire soit prise en compte ou non. On voit alors que le léger effet introduit par l'interaction nucléaire tend à réduire le rapport $\delta \rho_e / \delta \rho_p$. Ceci se comprend en remarquant que le mode de courbure minimale de l'énergie libre réalise un compromis entre la minimisation de l'énergie coulombienne et celle de l'énergie de symétrie. Nous avons vu pour ce qui est des densités nucléaires que la direction de séparation conserve un caractère isoscalaire, soit un rapport $\delta \rho_n / \delta \rho_p$ proche de 1 : une fluctuation de la densité de neutrons entraîne une fluctuation du même ordre de grandeur pour les protons. Le mouvement des électrons est quant à lui limité par l'incompressibilité : il en résulte une limitation du rapport $\delta \rho_e / \delta \rho_p$. L'énergie coulombienne créée par cette situation est compensée par la réduction de l'énergie de symétrie.

La participation des électrons à l'oscillation de densité que nous venons de discuter en détail se répercute de façon immédiate sur le comportement des deux autres quantités représentées sur la figure 7.3 pour caractériser le mode propre en fonction de k, à savoir $c_{<}$ (en haut) et $\delta \rho_3 / \delta \rho_p$ (au centre). Pour chacune de ces quantités, trois courbes sont représentées, le cas de la matière nucléaire avec électrons étant encadré par les deux situations limites que nous avons évoquées : d'une part, un gaz neutralisant strictement incompressible ($\chi_e^{-1} = \infty$), et d'autre part un gaz neutralisant infiniment compressible ($\chi_e^{-1} = 0$). Ainsi, l'on voit que pour la majeure partie du domaine d'instabilité en k, le comportement du gaz d'électrons est dominé par son incompressibilité : au-delà de k = 50 MeV/c, il n'est plus possible de distinguer dans la résolution de la figure les courbes obtenues en présence d'électrons de celles qui sont obtenues pour un gaz neutralisant uniforme. Ce résultat, en accord avec la référence [MarT05], justifie l'approximation de gaz uniforme employée pour différents travaux [Pet95a, Wat04, Mag01, Nap].

Ces familles de courbes se séparent toutefois vers les faibles valeurs de k. Concernant la valeur propre $c_{<,}$ l'on voit que le degré de liberté apporté par les électrons non incompressibles permet alors une légère extension de l'intervalle d'instabilité en k. Pour ce qui est de la direction de séparation de phase dans le plan des densités nucléaires, nous avions observé que les effets coulombiens tendent à réduire (jusqu'à la supprimer) la distillation d'isospin pour les faibles valeurs de k, en défavorisant la fluctuation de densité des protons. La présence des électrons permet ici d'atténuer l'énergie coulombienne, apportant une légère restauration de la distillation d'isospin.

A la limite $k \to 0$, on retrouve le cas d'un système homogène : la contrainte d'électroneutralité impose que la fluctuation du gaz neutralisant s'accorde strictement avec celle des protons. Dans le cas d'un gaz incompressible, cela signifie une suppression totale de la fluctuation des protons : le mode est alors restreint à la direction des neutrons, soit $c_{<}(0) = \partial \mu_n / \partial \rho_n$ et $\delta \rho_3 / \delta \rho(0) = 1$. En présence d'électrons, une fluctuation des protons est encore possible dans la limite $k \to 0$, étant neutralisée par une fluctuation équivalente des électrons. L'énergie coulombienne tend ainsi à être

annulée au prix de l'énergie due à l'incompressibilité des électrons, dont dépendent les valeurs limites de $c_{<}(0)$ et $\delta \rho_3 / \delta \rho(0)$.

Considérons maintenant l'extension de l'instabilité due au degré de liberté des électrons. Nous avons vu que, pour un point de densités nucléaires fixées, il se traduit par un décalage sensible de la borne inférieure de l'intervalle d'instabilité en k, tandis que le décalage de la borne supérieure est imperceptible. La figure 7.5 présente en fonction de la température l'intervalle de k pour lequel une région instable peut être rencontrée dans le plan (ρ_n, ρ_p) . L'intervalle instable de k est maximal en T = 0. Tandis que la température augmente, la borne supérieure baisse rapidement tandis que la borne inférieure augmente peu. L'intervalle se referme en une température limite T_{lim} . Les résultats obtenus, pour différentes forces de Skyrme, sont très semblables à ceux qui étaient donnés par la figure 6.4 dans le chapître précédent, où l'on étudiait la formation de clusters dans la matière nucléaire seule. En particulier, la borne supérieure de l'intervalle et la position de température limite ne présentent pas de variation perceptible lorsque le degré de liberté des électrons est pris en compte. La différence porte sur la borne inférieure, dont le décalage est mis en évidence sur la partie droite de la présente figure.

Regardons maintenant comment se traduit dans le plan des densités l'extension du domaine d'instabilité due au degré de liberté des électrons. La figure 7.6 représente différentes k-spinodales, à k = 20, 40 et 80MeV/c pour une température de 5MeV. Conformément aux observations précédentes, l'accroissement de la région d'instabilité par rapport au cas d'un gaz neutralisant uniforme est d'autant plus important que la valeur de k est faible. L'extension a lieu du côté riche en protons, pour lequel l'incompressibilité χ_e^{-1} est moins importante. Pour les faibles densités de protons en revanche, χ_e^{-1} prend des valeurs très élevées : même pour une faible valeur de k, la frontière de k-spinodale devient indiscernable de celle obtenue dans le cas d'une incompressibilité infinie.

Remarquons, pour revenir sur la discussion de la partie 7.1.2, que ceci explique que l'on obtienne des résultats quasiment indiscernables en utilisant l'approximation de température nulle pour le gaz d'électrons. En effet, la validité de cette approximation s'affaiblit pour les basses densités, pour lesquelles l'incompressibilité très élevée des électrons supprime presque totalement le degré de liberté associé quelle que soit la température mise en jeu (l'incompressibilité est encore plus élevée pour un gaz d'électrons à température finie). Il faut aussi noter que dans la région de basse densité, l'incompressibilité a une pente très importante, ainsi le décalage existant entre deux valeurs de χ_e^{-1} pour ρ_e fixé ne correspond qu'à un infime écart dans le plan des densités.

La distinction entre les deux familles de k-spinodales a déjà quasiment disparu pour k = 80 MeV/c, alors que l'on arrive dans la région d'extension maximale. Ainsi, aucune différence n'est perceptible si l'on s'intéresse aux enveloppes d'instabilités : pour la matière nucléaire avec électrons, les résultats obtenus sont quasi-identiques à ceux qui ont été présentés sur la figure 6.6 du chapître précédent. Il en est de même pour les caractéristiques du mode le plus instable, qui concerne un domaine de valeurs du nombre d'onde k tel que l'effet des électrons n'entre quasiment pas en compte. On peut ainsi se reporter aux figures 6.8 et 6.10 pour une représentation des modes dominant la décomposition en clusters de la matière nucléaire en présence d'un gaz d'électrons.

7.3 Formation de clusters dans la matière d'étoile

L'étude de la matière nucléaire avec électrons montre qu'un tel milieu, s'il ne peut se séparer en deux phases infinies homogènes, présente une instabilité de la matière homogène contre la formation de clusters. Cette instabilité est une manifestation de la transition liquide-gaz de la matière nucléaire. Elle est très semblable à celle qui est observée pour la matière nucléaire seule dans le cas des fluctuations de longueur d'onde finie, en particulier pour les modes les plus instables. Nous allons à présent tenter de rapprocher cette étude des phénomènes susceptibles de se dérouler dans les objets astrophysiques compacts.



FIG. 7.3 – Dépendance en k du mode propre, pour des densités et une température fixées. En haut : valeur propre minimale de la matrice de courbure de l'énergie libre dans l'espace des fluctuations de densité. Au milieu : direction de la séparation de phase dans le plan des densités nucléaires. La ligne en pointillés indique la valeur du rapport ρ_3/ρ , donnant la direction de Z/A constant. En bas : direction de la séparation de phase dans le plan (ρ_p, ρ_e). Le rapport $\delta \rho_e / \delta \rho_p$ constitue une mesure de la participation des électrons à la transition, qui est essentiellement déterminée par le poids relatif de l'incompressibilité χ_e^{-1} et de l'interaction coulombienne. Ceci est illustré par la courbe en pointillés, qui représente la direction correspondant au mode de plus petite valeur propre obtenu en l'absence d'interaction nucléaire. Pour les deux figures du haut, le cas de la matière nucléaire avec électrons est encadré par deux autres courbes représentant les cas limites pour l'incompressibilité du gaz neutralisant.



FIG. 7.4 – Dépendance en densité de la participation des électrons à la séparation de phase, en ne tenant compte que de l'incompressibilité et de l'interaction coulombienne. L'influence de la température est très faible. En haut, l'évolution de k est tracée pour différentes densités $\rho_e = \rho_p$, indiquées sur les courbes en fm^{-3} . En bas, la valeur $k_{1/2}$ correspondant à la mi-hauteur de ces courbes est tracée en fonction de ρ_p .



FIG. 7.5 – Bornes de l'intervalle instable de k en fonction de la température. Pour chaque k compris dans cet intervalle, il existe une région k-spinodale à la température considérée. A gauche : intervalle instable pour la matière nucléaire avec électrons, pour différentes paramétrisations de Skyrme. A droite : comparaison de la borne inférieure dans le cas d'un gaz d'électrons d'incompressibilité χ_e^{-1} (courbe inférieure, en trait épais) et dans le cas d'un gaz neutralisant incompressible $\chi^{-1} = \infty$ (courbe supérieure, en trait fin). A titre de comparaison, la température critique en matière nucléaire infinie vaut $T_c = 14.54 MeV$ pour Slya, 14.46 MeV pour SGII et 17.96 MeV pour SIII.



FIG. 7.6 – k-spinodales pour la partie inférieure de l'intervalle instable de k, pour une température fixée. La courbe extérieure (constante) rappelle la spinodale thermodynamique, correspondant à k = 0 pour la matière nucléaire sans effet coulombien. Les trois courbes évoluant avec k correspondent aux k-spinodales de la matière nucléaire avec électrons, encadrées par les deux cas limites pour l'incompressibilité du gaz neutralisant.

7.3.1 Situations de séparation de phase

La transition liquide-gaz dans la matière d'étoile peut intervenir de différentes façons suivant le stade d'évolution de l'objet considéré. Une étoile à neutrons se forme au cours d'un processus violent, lorsqu'une étoile massive termine son cycle de réactions nucléaires en synthétisant un noyau constitué de Fer [Bur86, Pra01]. Une fois la masse de Chandrasekhar atteinte, ce noyau s'effondre sous l'effet de la gravitation, tandis qu'une onde de choc entraîne l'éjection des couches externes. C'est le scénario d'explosion d'une supernova. Le noyau constitue la proto-étoile à neutrons. Il subit dans ces premiers instants de brusques variations des conditions de densité et de température. Les caractéristiques du rebond faisant suite à l'effondrement sont liées à l'équation d'état de la matière nucléaire, en particulier l'incompressibilité de la matière asymétrique chaude. Cette discussion est détaillée dans la référence [Gle01]. Une incompressibilité trop faible provoquerait la formation d'un trou noir, mais si elle était trop importante, l'effondrement serait freiné : dans aucun des cas ne se produirait l'onde de choc permettant l'existence des supernovae. Ces contraintes fournissent par extrapolation à la matière symétrique une incompressibilité K_{∞} de l'ordre de 200MeV.

Des neutrinos sont produits en grande quantité au cours de l'événement : d'une part, du fait du déplacement de l'équilibre β avec la densité provoquant une conversion des protons en neutrons par capture électronique, mais également à plus long terme par émission thermique. C'est essentiellement par émission de neutrinos que l'étoile se refroidit, sur de grandes échelles de temps [Pag04, Pra01]. Dans les premières secondes, les neutrinos sont piégés dans la proto-étoile. Ils sont susceptibles de provoquer un choc retardé (après quelques centaine de millisecondes), venant raviver la première onde de choc due à l'incompressibilité de la matière nucléaire. Le rôle joué par les neutrinos dans la dynamique de l'explosion dépend des caractéristiques de leur propagation dans le milieu. Celle-ci est affectée par les structures et les corrélations pouvant exister au niveau microscopique. Ainsi, le libre parcours moyen des neutrinos se trouve fortement réduit en présence de clusters dont la taille est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde associée. Si les neutrinos se trouvent ainsi piégés dans une certaine couche de l'étoile, l'accroissement de pression dû aux particules venant des régions internes pourrait se traduire, dans un relachement soudain, par l'émission d'un « flash » de neutrinos exerçant une seconde poussée sur les couches externes [MarJ04]. Cet effet pourrait être crucial pour la description des supernovae, le premier choc étant à l'heure actuel insuffisant pour provoquer dans les simulations l'éjection des couches externes [Bur03].

Il est donc important de connaître la façon dont la transition liquide-gaz de la matière nucléaire affecte la structure microscopique de la proto-étoile à neutrons. Les caractéristiques de cette transition dépendent des différentes échelles de temps mises en jeu, entre variation des conditions physiques et réalisation des équilibres :

- Rapidité de variation de la température et de la pression au cours des étapes successives : phase d'effondrement (0.5 à 1 seconde), rebond et onde de choc (quelques secondes), refroidissement (sur plusieurs années) [Bur86].
- Temps de piégeage des neutrinos : quelques dizaines de secondes.
- Équilibre β (échelle de temps de l'interaction faible, à partir de quelques fractions de secondes).
- Temps de décomposition spinodale : séparation de phase sous l'effet d'une instabilité locale de la matière homogène contre la formation de clusters (échelle de temps de l'interaction forte, soit quelques dizaines de fm/c).
- Équilibre thermodynamique : maximisation de l'entropie par exploration de l'espace des phases. L'échelle de temps associée est difficile à prévoire. Les expériences portant sur les noyaux indiquent un temps d'équilibre de l'ordre de quelques centaines de fm/c. Ce temps peut être plus important si l'équilibre doit etre réalisé sur de plus grandes distances.

Ces différents temps sont interconnectés, et la connaissance précise de l'évolution des conditions dans les premiers instants de la proto-étoile est un problème complexe mettant en jeu certains paramètres encore mal connus, tels que la propagation des neutrinos.

Dans le cadre de notre étude de champ moyen, nous sommes en mesure de décrire la formation de clusters par décomposition spinodale, c'est à dire sous l'effet du développement d'une instabilité locale de la matière homogène : un mode dominant de séparation de phase s'établit à l'instant d'apparition des fluctuations. Les clusters formés ne sont déterminés par un tel processus que dans une situation hors-équilibre thermodynamique : ceci concerne par exemple la région de l'onde de choc. En dehors de cette discontinuité, l'équilibre devrait avoir le temps de se réaliser sur les échelles de temps considérées (de l'ordre de la milliseconde). Dans une situation d'équilibre, le calcul de la spinodale est une façon de définir la région minimale de transition de phase.

Pour la description d'une matière formée de clusters, l'équilibre thermodynamique ne peut s'obtenir par une construction de Gibbs, qui concerne une séparation en deux phases infinies et homogènes. Cette situation est explorée par les travaux portant sur les phases « pasta », pour lesquels des configurations d'équilibre inhomogènes sont étudiées [Rav83, Wat03, Hor04a, Las87]. De telles configurations ne sont pas traitées dans notre approche, qui se base sur les propriétés d'instabilité de la matière homogène. Cependant, les régions d'instabilité obtenues (enveloppes) indiquent la zone minimale (en température et dans le plan des densités) concernée par la formation de phases « pasta ».

7.3.2 Matière d'étoile à l'équilibre β

L'équilibre β constitue une contrainte sur la composition de l'étoile, en fonction de la densité. Considérons une matière constituée de neutrons, protons, électrons et neutrinos électroniques ν . Partant d'une fraction protonique Z/A excédentaire, l'équilibre β s'atteint par les réactions de capture électronique :

$$p + e^- \to n + \nu \tag{7.19}$$

Etablissons d'une façon générale le critère d'équilibre pour la composition d'un système de quatre constituants A, B, C, D dont les densités peuvent être modifiées suivant la réaction

$$A + B \leftrightarrow C + D \tag{7.20}$$

entraînant $\delta \rho_C = \delta \rho_D = -\delta \rho_A = -\delta \rho_B$. Notons $f^t(\rho_A, \rho_B, \rho_C, \rho_D)$ la densité d'énergie libre totale du système, dans laquelle est comptée l'énergie de masse :

$$f^{t}(\{\rho_{i}\}) = f(\{\rho_{i}\}) + \sum_{i} \rho_{i} m_{i}$$
(7.21)

Sa variation due à la réaction (7.20) est :

$$\delta f^t = \left(\frac{\partial f^t}{\partial \rho_C} + \frac{\partial f^t}{\partial \rho_D} - \frac{\partial f^t}{\partial \rho_A} - \frac{\partial f^t}{\partial \rho_B}\right) \delta \rho_C \tag{7.22}$$

L'équilibre est atteint pour une énergie libre minimale, soit $\delta f^t = 0$, ce qui donne la condition sur les potentiels chimiques :

$$\mu_A^t + \mu_B^t = \mu_C^t + \mu_D^t$$

$$avec \quad \mu_i^t = \frac{\partial f^t}{\partial \rho_i} = \frac{\partial f}{\partial \rho_i} + m_i = \mu_i + m_i$$
(7.23)

Ainsi, l'équilibre β est défini par la relation :

$$\mu_p + m_p + \mu_e + m_e = \mu_n + m_n + \mu_\nu$$
soit $\mu_p^t + \mu_e^t = \mu_n^t + \mu_\nu$
(7.24)

Remarquons ici que le potentiel chimique μ_{ν} détermine simultanément les densités ρ_{ν} et $\rho_{\overline{\nu}}$ des neutrinos et antineutrinos, qui se déduisent de la même distribution de Fermi-Dirac $n_{\nu}(\epsilon)$. Ceci est illustré schématiquement par la figure 7.7. Ainsi, la condition d'équilibre β (7.24) concerne de façon équivalente la réaction de capture électronique (7.19) et la désintégration β des neutrons, $n \rightarrow p + e^- + \overline{\nu}$. A température nulle, une valeur de μ_{ν} positive (négative) correspond à la seule présence de neutrinos (antineutrinos). A température finie en revanche, des neutrinos et antineutrinos sont simultanément présents. Si le potentiel chimique μ_{ν} est nul, neutrinos et antineutrinos ont des



FIG. 7.7 – Illustration schématique de la distribution de Fermi-Dirac à température finie, s'appliquant simultanément aux neutrinos et antineutrinos. Les neutrinos forment un gaz parfait de fermions de masse nulle : ainsi, les énergies négatives correspondent à la mer de Fermi, de telle sorte que la distribution $1 - n_{\nu}(\epsilon)$ pour $\epsilon < 0$ donne le nombre d'antineutrinos d'énergie $-\epsilon$.

densités égales : ils forment un ensemble de paires thermiques particule-antiparticule. Un potentiel chimique μ_{ν} non nul correspond à une différence $\rho_{\nu} - \rho_{\overline{\nu}}$ de même signe.

Il est souvent supposé que l'équilibre β ne fait pas intervenir les neutrinos. On considère dans ce cas que les neutrinos émis par capture électronique ou les antineutrinos émis par désintégration des neutrons quittent le milieu immédiatement après leur émission. Le potentiel chimique μ_{ν} est alors nul, et la condition d'équilibre β s'écrit :

$$\mu_p^t + \mu_e^t = \mu_n^t \tag{7.25}$$

Pour notre étude, nous envisageons les conditions d'équilibre lorsqu'une certaine fraction des neutrinos émis est retenue dans le milieu : nous notons cette fraction x_{ν} , et lui donnons le nom d'opacité aux neutrinos. Elle définit la densité de neutrinos présents en un point (ρ_n, ρ_p) du plan des densités nucléaires, en fonction d'une fraction protonique initiale $(Z/A)_0$. Nous avons fixé ce rapport Z/A initial pour être celui de l'élément ⁵⁶Fe, qui constitue le noyau de l'étoile au moment de l'effondrement, soit $(Z/A)_0 = 26/56$.

Considérons un point de densité ρ et de fraction protonique Z/A. Dans le cas $Z/A < (Z/A)_0$, la composition présente a été atteinte par des réactions de capture électronique, produisant une quantité déterminée de neutrinos. En termes de densités, cette quantité se note ρ_{ν}^{prod} et elle est donnée par :

$$\rho_{\nu}^{prod} = \rho \left[\left(\frac{Z}{A} \right)_0 - \frac{Z}{A} \right] \tag{7.26}$$

Dans le cas $Z/A > (Z/A)_0$, des désintégrations de neutrons ont produit une quantité d'antineutrinos $\rho_{\overline{u}}^{prod}$ donnée par :

$$\rho_{\overline{\nu}}^{prod} = \rho \left[\frac{Z}{A} - \left(\frac{Z}{A} \right)_0 \right] \tag{7.27}$$

L'opacité x_{ν} détermine la quantité de neutrinos retenus $\Delta \rho_{\nu}$:

$$\Delta \rho_{\nu} = x_{\nu} \rho_{\nu}^{prod} = x_{\nu} \rho \left[\left(\frac{Z}{A} \right)_0 - \frac{Z}{A} \right]$$
(7.28)

Dans le cas où ce sont des antineutrinos qui sont produits, une valeur négative de $\Delta \rho_{\nu}$ est obtenue.

En l'absence de piégeage, on a $\mu_{\nu} = 0$. A température finie, ce potentiel chimique impose les densités thermiques $\rho_{\nu}^{th} = \rho_{\overline{\nu}}^{th}$, qui sont nulles pour T = 0. Pour une opacité x_{ν} aboutissant à un piégeage $\Delta \rho_{\nu}$, on a (*cf* figure 7.7) :

$$\rho_{\nu} = \rho_{\nu}^{th} + \Delta \rho_{\nu} \quad si \quad \Delta \rho_{\nu} > 0
\rho_{\overline{\nu}} = \rho_{\overline{\nu}}^{th} - \Delta \rho_{\nu} \quad si \quad \Delta \rho_{\nu} < 0$$
(7.29)

En posant $\epsilon = pc$ et $n(\epsilon) = \left[1 + e^{\beta(\epsilon - \mu)}\right]^{-1}$, le potentiel chimique μ_{ν} est alors déterminé par l'une des intégrales de Fermi équivalentes

$$\rho_{\nu} = \int_{0}^{\infty} \frac{\epsilon^{2} d\epsilon}{2\pi^{2} (\hbar c)^{3}} n(\epsilon)$$

$$ou \quad \rho_{\overline{\nu}} = \int_{-\infty}^{0} \frac{\epsilon^{2} d\epsilon}{2\pi^{2} (\hbar c)^{3}} (1 - n(\epsilon))$$
(7.30)

soit

$$\Delta \rho_{\nu} = \int_{0}^{2\mu_{\nu}} \frac{\epsilon^2 d\epsilon}{2\pi^2 (\hbar c)^3} n(\epsilon)$$
(7.31)

A température nulle, on a simplement :

$$\rho_{\nu} = \Delta \rho_{\nu} = \frac{1}{6\pi^2} \left(\frac{\mu_{\nu}}{\hbar c}\right)^3 , \quad \rho_{\overline{\nu}} = 0 \quad si \quad \Delta \rho_{\nu} > 0$$

$$\rho_{\overline{\nu}} = -\Delta \rho_{\nu} = \frac{1}{6\pi^2} \left(\frac{-\mu_{\nu}}{\hbar c}\right)^3 , \quad \rho_{\nu} = 0 \quad si \quad \Delta \rho_{\nu} < 0$$
(7.32)

Nous allons maintenant chercher à représenter les équilibres β correspondant à différentes fractions retenues de neutrinos. Pour en rendre compte dans l'espace des potentiels chimiques, il est commode de définir le plan (μ_n^t, μ_{pe}^t) avec $\mu_{pe}^t = \mu_p^t + \mu_e^t$. Dans ce plan, l'équilibre en l'absence de neutrinos est simplement donné par la droite diagonale $\mu_{pe}^t = \mu_p^t$; si une fraction de neutrinos est retenue, le potentiel μ_{ν} pour le chemin d'équilibre correspondant se lit comme le décalage vertical par rapport à cette diagonale.

Une représentation de ce type est donnée sur la figure 7.8. Pour différentes températures et interactions nucléaires, les enveloppes d'instabilité y sont représentées, ainsi que les chemins d'équilibre β correspondant à différentes opacités x_{ν} , comprises entre les bornes 0 et 1 définissant en principe les limites d'accessibilité à l'équilibre β .

Apportons quelques précisions sur la partie de cette figure concernant des températures finies. Dans ce cas, les chemins représentés correspondent à la relation (7.24) dans laquelle les potentiels chimiques des nucléons sont calculés à température finie, tandis que par mesure de simplicité une approximation de température nulle (c'est à dire de gaz dégénéré) est employée pour les leptons. Cette approche peut cependant être facilement généralisée à des leptons de température finie. Tant que l'on ne considère pas de très basses densités, l'approximation des leptons dégénérés conduit à des résultats proches de ceux que l'on devrait obtenir dans un traitement exact, ainsi qu'il sera illustré par la suite (cf figure 7.11). Ainsi, dans la partie qui nous intéresse, à savoir dans la région d'instabilité, les tracés obtenus ne seraient que très légèrement modifiés par un traitement des leptons à température finie.

Il apparaît nettement sur la figure 7.8 que les chemins d'équilibre β sont très sensibles à l'opacité x_{ν} , une faible fraction retenue décalant déjà l'équilibre de façon considérable. Par ailleurs, l'évolution en température des différents chemins (gouvernée par la différence $\mu_p - \mu_n$) est faible. A température nulle, les chemins correspondant aux différentes opacités x_{ν} traversent tous l'enveloppe d'instabilité. Ce n'est pas le cas à température finie, du fait du rétrécissement de cette enveloppe : ainsi, à T = 10 MeV, en l'absence de neutrinos le chemin d'équilibre β est trop riche en neutrons pour atteindre la région d'instabilité : en revanche, une opacité x_{ν} de seulement 0.01 permet de la traverser.

Plaçons-nous maintenant dans le plan des densités nucléaires, (ρ_n, ρ_p) . Les équilibres β correspondant aux différentes valeurs d'opacité x_{ν} sont représentés dans ce plan sur la figure 7.9. L'enveloppe d'instabilité est également tracée. Différentes températures sont considérées, pour l'interaction Sly230a. Les chemins d'équilibre β apparaissent quasiment comme des chemins à



FIG. 7.8 – Représentation dans l'espace des potentiels chimiques $(\mu_n^t, \mu_{pe}^t = \mu_p^t + \mu_e^t)$ des équilibres β correspondant à différentes valeurs d'opacité aux neutrinos, $x_{\nu} = 0$, 0.01, 0.1 et 1. Les valeurs $x_{\nu} = 0$ et 1 définissent les bornes de la région du plan accessible en principe à un équilibre β . L'enveloppe d'instabilité de la matière nucléaire homogène avec électrons est également représentée. A température nulle (partie du haut), les chemins d'équilibre sont définis et calculés de façon exacte. Il apparaît une borne physique, au delà de laquelle la diagonale $\mu_{pe}^t = \mu_n^t$ est prolongée en pointillés pour guider l'oeil. A température finie, les chemins sont calculés dans l'approximation du gaz dégénéré pour les leptons.



FIG. 7.9 – Représentation dans le plan des densités des chemins d'équilibre β correspondant à différentes valeurs d'opacité aux neutrinos, $x_{\nu} = 0$, 0.01, 0.1 et 1, pour l'interaction Sly230a. L'enveloppe d'instabilité est également tracée.

Z/A constant. Afin de mettre en évidence l'évolution en Z/A, nous opérons alors un changement de variable pour nous placer en représentation $(\rho, Z/A)$.

La figure 7.10 donne ainsi l'analogue dans le plan $(\rho, Z/A)$ de la série présentée par la figure 7.8 dans le plan (μ_n^t, μ_{pe}^t) . Pour l'ensemble des chemins d'équilibre β obtenus, l'évolution en Z/Aest faible. La fraction protonique est quasiment constante pour les densités supérieures à la région d'instabilité. Aux basses températures, on observe une diminution de Z/A vers les basses densités. Toutes les courbes cependant présentent une brusque remontée aux très basses densités, soit quasiment sur l'axe des ordonnées dans la résolution de la figure 7.10 : en effet, lorsque la densité des différentes espèces présentes tend vers 0, le bilan des potentiels chimiques est dominé par le bilan en masse $m_n - m_p - m_e$: celui-ci étant positif, on obtient une matière de protons (hydrogène).

Cette figure permet de constater que, pour une fraction donnée de neutrinos piégés, l'équilibre β correspond essentiellement à un chemin de Z/A constant, tel que celui qui est suivi si un morceau de matière à l'équilibre β pour une densité proche de la saturation subit une brusque dilatation, entrainant une variation de densité plus rapide que le temps d'équilibre β . Ainsi, bien que l'équilibre β ne puisse être défini de la même façon pour la matière homogène et pour une matière de clusters, l'équilibre défini pour une matière homogène à haute densité détermine en grande partie la possibilité d'atteindre la région d'instabilité spinodale au cours d'une variation de la densité. Cette possibilité est certaine à température nulle : quelle que soit la fraction de neutrinos retenus, les différents chemins traversent l'enveloppe d'instabilité. Dans l'approche considérée, ceci garantit pour une étoile à neutrons refroidie l'existence d'une couche présentant une structure en clusters (phase « pasta »). Pour ce qui est des premiers instants de formation de la proto-étoile, au moment où la présence de structures de ce type pourrait jouer un rôle dans la dynamique de la supernova, ce sont des températures finies qu'il faut considérer. L'on voit alors que la possibilité d'un passage par la région instable dépend d'une part de la température (l'instabilité disparaissant au-delà de $T \simeq 12 MeV$, cf figure 7.5) mais aussi de la fraction de neutrinos retenus dans le milieu.

Observons maintenant plus en détail l'influence de la température sur les différents chemins d'équilibre. A cet effet, la figure 7.11 présente, sur la partie du haut, un recadrage et une superposition en température des différents graphiques de la figure 7.10. L'on y voit plus clairement que l'effet de la température est de réhausser globalement la valeur de Z/A pour un équilibre β de x_{ν} donné. Ce résultat est confirmé par la partie du bas de la figure, pour laquelle le chemin $x_{\nu} = 0$ est calculé de deux façons à température finie :

- avec l'approximation d'un gaz d'électrons dégénéré, correspondant à l'approche suivie jusqu'à présent pour les leptons;
- en calculant le potentiel chimique des électrons à température finie.



FIG. 7.10 – Représentation dans le plan ($\rho = \rho_n + \rho_p, Z/A$) des chemins d'équilibre β correspondant à différentes valeurs d'opacité aux neutrinos, $x_{\nu} = 0$, 0.01, 0.1 et 1. L'enveloppe d'instabilité est également tracée.

L'on voit ainsi que les chemins obtenus sont assez proches : bien que clairement distincts à T = 10 MeV, ils sont quasiment confondus à T = 5 MeV. L'effet perceptible est d'accentuer la hausse en Z/A déjà remarquée avec l'augmentation de la température.

La figure 7.12 donne une autre représentation de la relation entre chemins d'équilibre β et enveloppe d'instabilité, évoluant avec la température. Il s'agit, pour chaque température donnée, de l'opacité x_{ν} minimale pour laquelle le chemin correspondant atteint l'enveloppe d'instabilité. Les valeurs obtenues ont été calculées dans l'approximation des gaz de leptons dégénérés : ainsi, l'on peut s'attendre pour le traitement exact à un décalage de l'ensemble vers les plus hautes températures. L'allure obtenue ici est caractéristique, car essentiellement déterminée par l'évolution en température de la région d'instabilité (les chemins d'équilibre β variant peu avec la température). Pour une certaine plage de température, le chemin $x_{\nu} = 0$ traverse l'enveloppe. Par la suite, la fraction x_{ν} nécessaire pour atteindre l'enveloppe reste à de très petites valeurs, puis augmente brusquement à l'approche de la température limite marquant la disparition de l'enveloppe. Dans l'approche présente, le chemin $x_{\nu} = 1$ cesse d'atteindre la région d'instabilité peu avant la disparition de celle-ci.

Les résultats discutés soulignent que, si la présence de clusters peut être déterminante pour la propagation des neutrinos dans la matière d'étoile, réciproquement la présence de neutrinos piégés exerce une influence sur la possibilité et le mode de formation des clusters dans cette matière. Cette corrélation dépend de la température, surtout à l'approche de la température limite d'existence de la région d'instabilité.



FIG. 7.11 – Dépendance en température : superposition des résultats présentés sur la figure 7.10 pour T = 0, 5 et 10 MeV. Les enveloppes d'instabilité correspondantes sont tracées, ainsi que différents chemins d'équilibre β . En haut, ces chemins sont donnés pour les différentes valeurs d'opacité aux neutrinos, $x_{\nu} = 0, 0.01, 0.1$ et 1. Dans la partie du bas, seul est considéré le chemin $x_{\nu} = 0$. Dans le cas des températures finies, ce chemin est calculé de deux façons différentes : dans l'approximation du gaz d'électrons dégénéré (en pointillés) et avec un traitement exact de la température finie (en trait épais).



FIG. 7.12 – Dépendance en température de l'opacité minimale x_{ν}^{min} permettant à un chemin d'équilibre β d'atteindre l'enveloppe d'instabilité. Les points ont été obtenus dans l'approche des gaz de leptons dégénérés pour le calcul de l'équilibre β .

Chapitre 8 Conclusions

En travaillant sur la matière infinie dans une approche de champ moyen, nous avons pu étudier de façon analytique les propriétés d'isospin de la transition liquide-gaz de la matière nucléaire. Les résultats obtenus font apparaître des caractéristiques robustes, qui sont confirmées par l'étude de l'instabilité par rapport à la formation d'agrégats. Ce dernier cas prend en compte des effets coulombiens et de taille finie : on peut donc s'attendre à ce que les caractéristiques observées se répercutent sur les systèmes physiques de nucléons, à savoir les noyaux et la matière des étoiles denses. En assimilant les agrégats de notre étude aux fragments obtenus dans les collisions d'ions lourds, nous avons montré que le comportement observé du coefficient d'isoscaling peut s'interpréter comme un signal de distillation d'isospin importante (indiquant un mécanisme de décomposition spinodale). Nous avons également travaillé sur les implications astrophysiques de la transition liquide-gaz. Grâce à une étude détaillée de la thermodynamique de la matière d'étoile, nous avons donné des critères quantitatifs pour la présence de phases clusterisées dans une proto-étoile à neutrons. Ceux-ci mettent en jeu, pour une interaction nucléaire donnée, la température et la fraction de neutrinos retenus dans l'étoile.

Le calcul du champ moyen s'est fait à partir d'une interaction nucléaire effective de type Skyrme, pour laquelle nous avons utilisé trois paramétrisations différentes. Leur comparaison nous a essentiellement permis de vérifier la bonne tenue qualitative des comportements observés. En particulier, les deux forces réalistes SGII et Sly230a présentent des résultats très voisins. La force SIII en revanche n'est pas adaptée aux systèmes asymétriques, ce qui se traduit par une dépendance en isospin atypique de l'instabilité. Ceci montre l'importance d'utiliser des forces réalistes dans les simulations numériques.

Dans la suite, nous allons passer schématiquement en revue les principaux résultats de ce travail.

Transition de phase du premier ordre

L'interaction de Skyrme en champ moyen donne une expression de l'énergie du système en fonction des densités à un corps des neutrons et protons. La thermodynamique de l'ensemble grand-canonique s'exprime alors comme la solution d'un problème auto-cohérent, pour chaque température fixée : la résolution des équations posées relie les différentes variables thermodynamiques aux densités de particules ρ_n et ρ_p .

Notre étude se situant à la limite thermodynamique, nous avons bénéficié de l'équivalence entre ensembles statistiques. Pour chaque température fixée, nous avons ainsi pu représenter l'énergie libre du système (à savoir son potentiel canonique) dans le plan des observables (ρ_n, ρ_p) . C'est en travaillant sur cette surface que nous avons pu déterminer les équilibres de phase constituant le diagramme de coexistence liquide-gaz de la matière nucléaire (chapître 4). L'équilibre thermodynamique est en effet défini par la maximisation de l'entropie sous contrainte : lorsque la température est imposée, cette condition est équivalente à la minimisation de l'énergie libre.

En dessous d'une température critique, la surface d'énergie libre d'un système homogène

présente une région de concavité. Il s'agit d'une anomalie topologique, marquant la présence d'une transition de phase d'ordre 1. En effet, pour un système de taille infinie, l'énergie libre peut alors être minimisée en certains points par une interpolation linéaire correspondant à un mélange de deux phases. L'équilibre statistique implique donc pour le diagramme de phase de la matière nucléaire une région de coexistence : elle s'obtient par la construction de Gibbs, qui réalise l'enveloppe convexe de la surface d'énergie libre. Cette enveloppe comporte une surface réglée, constituée des droites reliant les différents couples de phases en équilibre : ceux-ci satisfont au critère d'égalité des paramètres intensifs.

Ainsi, la construction de Gibbs dans l'espace des observables correspond à une discontinuité des observables dans l'espace des variables intensives, soit un pli de la fonction de partition correspondante. Il y a donc équivalence entre une coexistence de phase (déduite de la correction d'une anomalie de courbure de l'entropie) et une transition du premier ordre selon la définition d'Ehrenfest.

Diagramme des phases et distillation d'isospin

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés aux propriétés d'équilibre de la matière nucléaire, qui peuvent s'appréhender par l'étude du diagramme de phase (chapître 4). Celui-ci a été établi en tenant compte du degré de liberté lié à l'isospin : c'est à dire, en traitant ρ_n et ρ_p comme deux dimensions indépendantes de l'espace des observables. Pour une température donnée, un tel diagramme met en relation différents couples de phases en coexistence dans le plan (ρ_n, ρ_p) .

Nous avons ainsi pu vérifier que deux phases en équilibre se distinguent essentiellement par leur densité isoscalaire $\rho = \rho_n + \rho_p$, ce qui justifie l'analogie avec une transition liquide-gaz.

La matière nucléaire symétrique ($\rho_n = \rho_p$) se comporte dans la transition comme un fluide unique. En revanche, lorsque le système global est formé de matière asymétrique, des effets d'isospin apparaissent : la direction de séparation de phase est en effet toujours plus proche de la direction isoscalaire que la direction de fraction protonique Z/A constante. Cela signifie que les deux phases en équilibre n'ont pas le même rapport Z/A, le gaz formé étant plus asymétrique que le système global. Ce phénomène est connu : il porte le nom de distillation d'isospin. Il est dû au fait qu'une phase dense plus symétrique permet une réduction globale de l'énergie de symétrie du système. Nous avons ici quantifié cet effet en fonction de différentes forces de Skyrme.

L'effet de la distillation d'isospin sur l'allure d'une transformation thermodynamique à Z/A constant peut entraîner une confusion concernant l'ordre de la transition impliquée. En effet, la contrainte imposée à un paramètre d'ordre (la fraction protonique) se traduit par une évolution continue des observables le long de la ligne de coexistence. Alors que ce comportement continu a souvent été interprété comme le signe d'une transition du second ordre, nous avons mis en évidence la nécessité de distinguer les notions de transition et de transformation. Il apparaît alors clairement que la transition impliquée (pour laquelle se produit une coexistence de phase) est du premier ordre bien que la transformation spécifique considérée (à fraction protonique constante) ne permette pas à la discontinuité associée de s'exprimer dans l'évolution des observables.

Équilibre et décomposition spinodale

La distillation d'isospin caractérisant la transition liquide-gaz de la matière asymétrique ne concerne pas uniquement l'équilibre de phase. Pour le vérifier, nous avons étudié la direction de séparation de phase attendue pour un processus hors équilibre (chapître 5). Cela concerne une réaction rapide au cours de laquelle un système homogène se décompose en deux phases qui cessent d'échanger de la matière avant que l'équilibre thermodynamique n'ait pu être réalisé. Nous avons supposé dans ce cas un scénario de décomposition spinodale, selon lequel la séparation est suffisamment rapide pour être dominée par les conditions d'instabilité locale lors de l'apparition de la fluctuation. Elle suit alors la direction de courbure minimale de la surface d'énergie libre, donnée par le vecteur propre correspondant de sa matrice de courbure.

Nous avons pu constater que, dans la majorité des cas, la distillation d'isospin se trouve accentuée dans le processus hors-équilibre, du moins en termes de direction de séparation de phase. Pour ce qui est de la valeur du rapport isotopique de chaque phase au terme d'une décomposition spinodale, elle dépend non seulement de la direction de cette séparation, mais aussi de la densité à laquelle les phases cessent d'échanger de la matière : cette quantité met en jeu des critères dynamiques qui ne sont pas accessibles dans le cadre de cette étude.

Le formalisme de la matrice de courbure ne donne pas seulement la direction de décomposition spinodale. La matrice de courbure de l'entropie dans le plan (ρ_n, ρ_p) présente deux modes propres : l'un donne la direction d'instabilité, tandis que celui qui lui est orthogonal est lié à la fluctuation de composition du système, soit essentiellement la fluctuation d'isospin. Si l'on étudie la surface d'entropie d'un système homogène, les modes propres correspondants concernent un système hors-équilibre. Si l'on étudie l'enveloppe concave de cette surface, une matrice de courbure peut également être définie, dont les modes propres concernent un système à l'équilibre. Nous avons ainsi pu comparer les fluctuations associées aux deux cas. Dans la littérature, les fluctuations hors équilibres sont supposées négligeables et ignorées, conduisant à l'idée que seule une fragmentation à l'équilibre peut produire des distributions isotopiques larges. Dans notre étude, nous avons au contraire constaté que les fluctuations sont du même ordre de grandeur dans les deux cas. Les fluctuations hors équilibre sont donc à prendre en compte dans les conditions initiales des modèles de production de fragments par développement d'une instabilité spinodale. Ceci présente des conséquences pour la comparaison entre les résultats des simulations et les données expérimentales.

Instabilités de taille finie

Il a d'abord été question de décomposition spinodale comme amplification d'une instabilité thermodynamique, conduisant à la séparation du système en deux phases infinies homogènes. Nous avons ensuite considéré des instabilités de taille finie, dont l'amplification doit aboutir à la formation de clusters, gouttelettes de liquide plongées dans un gaz (chapître 6). Pour cela, une fluctuation de densité en onde plane a été introduite dans la matière homogène. Dans l'approximation des petites oscillations, la variation résultante de l'énergie libre est alors donnée par sa courbure dans l'espace des fluctuations de densité. En notant k le nombre d'onde des oscillations, les différentes contributions à cette variation sont :

- la courbure de l'énergie libre de la matière nucléaire homogène dans le plan des densités, indépendante de k;
- un terme lié à la dépendance en moment de l'interaction nucléaire, proportionnelle à k^2 ;
- un terme lié à l'interaction coulombienne, proportionnel à $1/k^2$.

L'étude de l'instabilité thermodynamique de la matière nucléaire fait donc partie intégrante d'un tel calcul. Les termes dépendant de k contribuent tous deux à réduire cette instabilité. Le premier d'entre eux correspond à une énergie de surface, introduisant un effet de taille finie. L'interaction coulombienne peut quant à elle être introduite dans ce contexte dans la mesure où le terme monopolaire divergent s'annule dans la soustraction effectuée pour calculer la variation de l'énergie libre. Si cette technique a déjà été utilisée dans la littérature, nous l'appliquons ici pour la première fois à des interactions réalistes pour une comparaison globale des propriétés d'instabilité de la matière nucléaire et de la matière d'étoile.

En étudiant la matrice de courbure de l'énergie libre dans l'espace des oscillations de densité, nous avons déterminé la région d'instabilité contre les fluctuations de taille finie. En chaque point de cette région, nous avons énoncé un critère de détermination du mode dominant la séparation de phase. Les conséquences sur la taille et la composition des clusters formés ont été exposées. Concernant la direction de séparation de phase, nous avons essentiellement constaté une persistance du phénomène de distillation d'isospin.

Conséquence pour l'étude des noyaux

L'étude de la formation des clusters à partir de la matière nucléaire infinie peut être mise en parallèle avec le phénomène de multifragmentation observé dans les collisions d'ions lourds. Les fragments obtenus expérimentalement sont alors supposés analogues aux clusters (phase liquide)
apparaissant dans notre étude. Avec cette approche, nous avons étudié le comportement du coefficient d'isoscaling α_n . Expérimentalement, il a été observé que le produit $T\alpha_n$ (où T est la température) décroît avec la centralité de la collision. Ceci a été interprété comme une mesure des effets de la densité sur l'énergie de symétrie. Nos résultats, bien que qualitatifs, sont suffisamment solides pour nous permettre de proposer une interprétation alternative de ce comportement : en cas de fragmentation par décomposition spinodale, la distillation d'isospin peut entraîner une baisse importante du coefficient $T\alpha_n$ mesuré.

Application à l'astrophysique

La transition liquide-gaz de la matière nucléaire intervient dans les objets astrophysiques compacts : son étude dans un tel contexte nécessite de prendre en compte la présence d'un gaz d'électrons (chapître 7). Nous avons montré que dans ce cas la construction de Gibbs est supprimée, tandis qu'une coexistence de phase existe pour la matière inhomogène, sous forme d'agrégats dispersés dans un gaz. En effet, l'incompressibilité du gaz d'électrons s'oppose à la séparation en deux phases infinies. La contrainte d'électroneutralité s'appliquant à chacune de ces phases, la variation de densité des protons est inhibée par la faible mobilité du gaz d'électrons. Avec les forces de Skyrme employées, l'instabilité spinodale thermodynamique disparaît, ce qui supprime la construction de Gibbs. Considérant en revanche des fluctuations de taille finie, les électrons ajoutent une dimension à l'espace des fluctuations de densité : ils ont alors un effet perturbatif conduisant à une légère augmentation de l'instabilité par rapport au cas de la matière nucléaire seule.

Les fluctuations de densité de matière nucléaire sont susceptibles d'affecter la dynamique des supernovae, par leur effet sur la propagation des neutrinos. L'explosion d'une supernova s'accompagne de la formation d'une proto-étoile à neutrons : l'éventuelle formation de clusters dans un tel objet est soumise à différentes influences, dépendant des échelles de temps mises en jeu dans les premiers instants d'évolution de l'étoile compacte. Nous avons proposé ici une étude de l'instabilité par rapport à la formation d'agrégats en corrélation avec la probabilité de piégeage des neutrinos. La fraction de neutrinos retenue dans l'étoile (x_{ν}) affecte l'équilibre β : dans le cas où cet équilibre détermine la composition globale de la matière, nous avons établi la dépendance en x_{ν} de l'instabilité, en fonction de la température. Ce résultat implique une réciprocité entre le piégeage des neutrinos et la présence de clusters.

Ainsi, au cours de cette étude, nous avons pu représenter des caractéristiques de la transition liquide-gaz de la matière nucléaire qui devraient influencer le comportement des systèmes physiques.

Des limitations ont cependant été rencontrées, notre approche ne traitant pas la dynamique du système. Nous allons maintenant exposer dans les perspectives le travail que nous envisageons de réaliser pour la prise en compte d'effets dynamiques dans l'étude des instabilités de la matière nucléaire.

Chapitre 9

Perspectives

Le travail qui a été présenté dans ce document s'appuie sur un critère statique pour la détermination de l'instabilité d'un système homogène : il s'agit d'établir si la décomposition d'un tels système en différentes phases lui permet de minimiser son énergie libre. La perspective qui se présente dans l'immédiat est d'inclure dans cette étude des effets dynamiques permettant de décrire le mécanisme de séparation de phase. Si une telle description pouvait être obtenue pour l'ensemble du processus, elle déterminerait l'état du système à l'issue d'une séparation hors équilibre. Deux méthodes complémentaires sont envisageables :

- Hydrodynamique : dans cette approche, le système est traité de façon macroscopique, sans intervention des fonctions d'onde. Il est décrit en termes des densité $\rho_q(\vec{r}, t)$ qu'une hypothèse d'équilibre local permet de définir en chaque point. L'évolution en temps est alors déterminée par l'équation de Navier-Stokes [Cho04].
- TDHF (Time Dependent Hartree-Fock) : il s'agit d'une approche microscopique, dans laquelle le système est décrit par sa fonction d'onde. L'évolution dynamique est calculée moyennant l'hypothèse que cette fonction d'onde peut être approximée en chaque instant par un déterminant de Slater.

Un premier pas dans la prise en compte des effets dynamiques consiste à étudier la réponse du système à des variations de petite amplitude, dans une approximation linéaire. La méthode RPA (Random Phase Approximation) correspond à la linéarisation de l'approche TDHF. Une étude des instabilités RPA est déjà en cours de réalisation dans le cadre d'une collaboration avec Jérôme Margueron (IPN-Orsay). Nous allons en exposer brièvement les prémices.

9.1 Étude des instabilités RPA

La méthode RPA a été initialement introduite afin de traiter les corrélations à longues portées dans un gaz d'électrons en oscillation [Boh]. Appliquée en physique nucléaire, elle définit un formalisme pour la description d'un système en termes d'interactions particules-trous, en tenant compte de corrélations dans l'état fondamental. Son premier intérêt a été de permettre la description d'excitations collectives dans les noyaux [Bro61, Bla77]. Cette méthode permet de décrire la réponse du système à une excitation extérieure de faible amplitude. La notion de fonction de réponse peut être employée pour étudier la propagation des neutrinos dans un milieu nucléaire [Her96, Nav, MarJ01], ou encore la dynamique de formation des fragments dans un scénario de décomposition spinodale [ColM05].

Nous voulons ici nous intéresser aux modes instables de la RPA, conduisant la matière nucléaire homogène à se séparer en deux phases. Un premier pas en ce sens a été de déterminer la frontière de cette région d'instabilité, caractérisée par une divergence de la fonction de réponse pour une énergie transférée nulle.

Fonction de réponse

Les équations RPA peuvent être obtenues par linéarisation de l'équation TDHF [Rin80, Bla77, Bra95]. Cette équation donne l'évolution temporelle de la matrice densité à un corps, selon :

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left[\hat{h} + \hat{V}_{ext}, \hat{\rho}\right] \tag{9.1}$$

où \hat{h} est l'hamiltonien de champ moyen du système en interaction, et \hat{V}_{ext} un champ extérieur. L'état fondamental de Hartree-Fock correspond à une matrice densité $\hat{\rho}_0$ et un hamiltonien \hat{h}_0 tels que $\left[\hat{h}_0, \hat{\rho}_0\right] = 0$. Considérons une variation de la matrice densité $\delta \hat{\rho}(t)$. Elle implique une variation du champ moyen, s'exprimant par l'interaction résiduelle v_{res} :

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 + \delta \hat{\rho}(t)
\hat{h}[\hat{\rho}] = \hat{h}[\hat{\rho}_0] + \frac{\delta \hat{h}}{\delta \hat{\rho}} \delta \hat{\rho}
= \hat{h}_0 + v_{res} \delta \hat{\rho}$$
(9.2)

Dans l'approximation des petites amplitudes, on a alors :

$$i\hbar \frac{d(\delta\hat{\rho})}{dt} = \left[\hat{h}_0, \delta\hat{\rho}\right] + \left[v_{res}\delta\hat{\rho} + \hat{V}_{ext}, \hat{\rho}_0\right]$$
(9.3)

Cette relation peut s'exprimer en termes des éléments de matrice sur la base des états propres de l'impulsion notés $|\mathbf{k}\rangle$. Ce sont aussi des états propres de $\hat{\rho}$ et \hat{h} , tels que :

$$\begin{cases} \hat{\rho}_0 |\mathbf{k}\rangle = f_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \\ \hat{h}_0 |\mathbf{k}\rangle = \epsilon_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \end{cases}$$
(9.4)

ce qui donne pour chaque élément de matrice de l'équation 9.3 :

$$<\mathbf{k}|i\hbar\frac{d(\delta\hat{\rho})}{dt}|\mathbf{k}'>=(\epsilon_{\mathbf{k}}-\epsilon_{\mathbf{k}'})<\mathbf{k}|\delta\hat{\rho}|\mathbf{k}'>+(f_{\mathbf{k}'}-f_{\mathbf{k}})<\mathbf{k}|v_{res}\delta\hat{\rho}+\hat{V}_{ext}|\mathbf{k}'>$$
(9.5)

Considérons une excitation extérieure en onde plane de faible amplitude, introduite de façon adiabatique depuis $t \to -\infty$ et cessant à t = 0:

$$\begin{cases} \hat{V}_{ext} = \mathcal{E}e^{-i\hat{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{r}}-i(\omega+i\eta)t} & t < 0\\ \hat{V}_{ext} = 0 & t \ge 0 \end{cases}$$
(9.6)

Il en résulte des éléments de matrice densité de la forme :

$$<\mathbf{k}|\delta\hat{\rho}|\mathbf{k}'> = \alpha e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}-i(\omega+i\eta)t}\delta(\vec{k}+\vec{q}-\vec{k}')$$
(9.7)

En définissant la densité locale par $\rho(\vec{r}) = \langle \mathbf{r} | \hat{\rho} | \mathbf{r} \rangle$, on obtient :

$$\delta\rho(\vec{r}) = \alpha e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}-(\omega+i\eta)t} = \Pi_0 \left(\alpha v_{res} + \mathcal{E}\right) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}-(\omega+i\eta)t}$$

avec
$$\Pi_0(\omega,\vec{q}) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-f_{\mathbf{k}}}{\hbar\omega-\epsilon_{\mathbf{k}}+\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}+i\hbar\eta}$$
(9.8)

où $\hbar\omega$ et \vec{q} sont respectivement l'énergie et le moment transférés au système. La fonction de réponse du système à l'excitation \hat{V}_{ext} est définie par :

$$\Pi(\omega, \vec{q}) = \lim_{\mathcal{E} \to 0} \frac{\delta \rho(\vec{r}, t)}{V_{ext}(\vec{r}, t)} = \lim_{\mathcal{E} \to 0} \frac{\alpha}{\mathcal{E}}$$
(9.9)

La quantité Π_0 qui a été introduite plus haut est la fonction de réponse non-corrélée, correspondant au cas d'une interaction résiduelle nulle. La fonction de réponse dépend de Π_0 et v_{res} selon l'équation de Bethe et Salpeter :

$$\Pi(\omega, \vec{q}) = \frac{\Pi_0}{1 - v_{res} \Pi_0} \tag{9.10}$$



FIG. 9.1 – Comparaison entre les régions d'instabilité statique et RPA de la matière nucléaire, pour différentes valeurs du moment transféré q. Le calcul est effectué avec l'interaction de Skyrme Sly230a.

Spinodale RPA

Les modes propres RPA correspondent aux pôles de la fonction de réponse. Pour une valeur fixée du moment transféré \vec{q} , on trouve pour un système donné une énergie de résonance $\hbar\omega_0$ telle que $1 - v_{res}\Pi_0(\omega_0, \vec{q}) = 0$. Dans cette approche, le système est instable si un mode propre est associé à une énergie $\hbar\omega_0$ imaginaire. La frontière de cette région d'instabilité, que l'on appelle la spinodale RPA, est définie en fonction du moment transféré par $\hbar\omega_0(\vec{q}) = 0$.

Travaillant avec le degré de liberté d'isospin, la fonction de réponse du système est une matrice définie dans l'espace des densités ρ_n, ρ_p . Ses pôles correspondent à l'annulation du déterminant de la matrice $[1 - \mathbf{v_{res}} \mathbf{\Pi_0}]$, avec :

$$\mathbf{\Pi}_{\mathbf{0}} = \begin{pmatrix} \Pi_{n}^{0} & 0\\ 0 & \Pi_{p}^{0} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{v}_{\mathbf{res}} = \begin{pmatrix} v_{nn}^{res} & v_{np}^{res}\\ v_{pn}^{res} & v_{pp}^{res} \end{pmatrix}$$
(9.11)

Cette condition peut être mise en relation avec le critère d'instabilité statique, portant sur le signe de variation de l'énergie libre. Si un moment \vec{q} est transféré au système, cela se traduit par une fluctuation de densité de vecteur d'onde q. Il en résulte une variation d'énergie libre donnée par sa courbure dans l'espace des fluctuations de densité. La condition d'instabilité porte alors sur la matrice de courbure C^f de l'énergie libre.

A température nulle, cette matrice s'écrit en fonction de la densité d'états N_0 et de l'interaction résiduelle v_{res} :

$$\mathcal{C} = (\mathbf{N}_{0})^{-} + \mathbf{v}_{res}$$

$$avec \quad \mathbf{N}_{0} = \begin{pmatrix} N_{n}^{0} & 0\\ 0 & N_{p}^{0} \end{pmatrix}$$

$$N_{q}^{0} = \begin{pmatrix} \frac{d\rho_{q}}{d\epsilon} \end{pmatrix}_{\epsilon=\epsilon_{F}} = \frac{g}{4\pi^{2}} \frac{2m}{\hbar^{2}} k_{F}$$

$$(9.12)$$

La région d'instabilité correspond à l'existence d'une valeur propre négative de C. La frontière

de cette région (courbe spinodale statique) est alors donnée par la condition

$$\det \mathcal{C} = \det \left[(\mathbf{N}_0)^{-1} + \mathbf{v}_{res} \right] = 0$$
soit $\det \left[1 + \mathbf{v}_{res} \mathbf{N}_0 \right] = 0$
(9.13)

Par ailleurs, pour une énergie transférée nulle, la fonction de réponse non-corrélée vérifie [Fet71] : $\mathbb{H}^0(-\vec{\lambda}) = \mathbb{N}^0$

$$\lim_{q \to 0} \Pi_q^0(\omega, \vec{q}) = -N_q^0$$
soit
$$\lim_{q \to 0} \left[1 - \mathbf{v_{res}} \mathbf{\Pi}_0\right] = \det \left[1 + \mathbf{v_{res}} \mathbf{N}_0\right]$$
(9.14)

signifiant que les conditions d'instabilité statique et RPA deviennent équivalentes.

Nous avons comparé les deux types de spinodales pour différentes valeurs du moment transféré. La figure 9.1 présente les résultats obtenus à température nulle. Nous pouvons observer que, pour un moment transféré donné, la spinodale RPA est moins étendue que la spinodale statique. Ceci est dû au coût en énergie cinétique impliqué par une oscillation de la densité dans l'approche RPA. En effet, le système étant décrit par un déterminant de Slater, les excitations particule-trou permettant une variation de la densité se traduisent par une translation de la sphère de Fermi : le principe de Pauli impose l'occupation d'états d'énergie cinétique plus élevée [Ayi95]. Cette translation correspondant au moment transféré, la réduction de la région d'instabilité est d'autant plus sensible que la valeur de q est importante.

Dans un avenir proche, nous envisageons d'étudier la région d'instabilité RPA, pour lesquels les pôles de la fonction de réponse correspondent à une énergie transférée imaginaire. Dans de telles conditions, les modes propres sont associés à une séparation de phase, dont ils indiquent la direction dans le plan (ρ_n, ρ_p) : nous pourrons alors comparer la distillation d'isospin dans une approche statique et dynamique. Afin de réaliser une telle étude en présence d'un gaz d'électrons, il sera par ailleurs nécessaire de traiter de façon relativiste la fonction de réponse Π_e^0 correspondante.

9.2 Perpectives à long terme

Notre étude s'inscrit dans le contexte d'une recherche visant à approfondir la connaissance de l'équation d'état de la matière nucléaire. En particulier, la dimension d'isospin dont dépend cette équation nécessite d'être explorée. Du point de vue expérimental, de nouvelles données seront bientôt fournies par la prochaine génération d'accélérateurs d'ions lourds (Spiral2, FAIR, RIA, Eurisol), qui permettra d'étudier des réactions mettant en jeu des noyaux exotiques. En progressant dans la compréhension des mécanismes de ces réactions, il devrait être possible d'établir de nouvelles contraintes pour la description de la dépendance en isospin de la force nucléaire.

Une telle avancée est nécessaire pour renforcer les connexions actuellement en cours de développement entre la physique des collisions d'ions lourds et l'astrophysique des objets compacts. Supernovae et étoiles à neutrons sont en effet constituées d'une matière très asymétrique, dont le comportement est directement lié à l'équation d'état de la matière nucléaire. La transition liquide-gaz dans la matière d'étoile devrait entraîner l'existence de structures particulières (phases « pasta ») dans l'écorce des étoiles compactes, affectant leurs propriétés mécaniques et thermiques. Par ailleurs, la présence de clusters pourrait jouer un rôle crucial dans la dynamique des supernovae en modifiant la propagation des neutrinos.

Le dialogue entre ces deux domaines de la physique promet d'évoluer grâce aux futures expériences et observations dont la confrontation devrait permettre d'améliorer les modèles théoriques.

Annexe A

Variation de l'énergie libre sous l'effet d'une fluctuation de densité

Dans les chapîtres 6 et 7, nous étudions l'instabilité de la matière homogène par rapport à la formation d'agrégats. Le critère employé est le signe de variation de l'énergie libre lors de l'introduction dans le milieu homogène de petites fluctuations $\delta \rho_q(\vec{r})$ des différentes densités de particules, s'accompagnant d'une fluctuation $\delta \rho_c(\vec{r})$ de la densité de charge. Dans cette annexe, nous détaillons d'abord comment l'effet de petites fluctuations de forme quelconque se décompose en une somme d'effets dus à des fluctuations en ondes planes de vecteur d'onde \vec{k} . Le calcul du terme direct de l'interaction coulombienne est ensuite explicité.

A.1 Découplage des vecteurs d'onde \vec{k}

Une fluctuation de forme quelconque peut s'exprimer par la transformée de Fourier :

$$\delta \rho_q(\vec{r}) = \int d\vec{k} \, a_q(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{A.1}$$

avec la relation $a_q(\vec{k}) = a_q^*(-\vec{k}) \ (\delta \rho_q \text{ étant réel}).$

Dans le chapître 6, nous avons montré que la variation d'énergie libre due à des fluctuations $\delta \rho_q(\vec{r})$ de faible amplitude résulte de trois contributions : un terme de volume, un terme en gradients de densités et un terme d'énergie coulombienne, soit $\delta f = \delta f^b + \delta \mathcal{E}^{\nabla} + \delta \mathcal{E}^c$. La conservation du nombre de particules imposant des fluctuations dont la moyenne sur l'espace est nulle, ces trois contributions s'écrivent (dans l'approximation des faibles amplitudes) :

$$\delta f^b = \frac{1}{2V} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 f^h}{\partial \rho_j \partial \rho_i} \right)_{\{\rho_q^0\}} \int d\vec{r} \,\delta \rho_i(\vec{r}) \delta \rho_j(\vec{r}) \tag{A.2}$$

$$\delta \mathcal{E}^{\nabla} = \frac{1}{V} \sum_{ij} C_{ij}^{\nabla} \int d\vec{r} \, \nabla \rho_i(\vec{r}) \cdot \nabla \rho_j(\vec{r}) \tag{A.3}$$

$$\delta \mathcal{E}^c = \frac{1}{2V} \int \int d\vec{r} \, d\vec{r_0} \, \frac{\delta \rho_c(\vec{r_0}) \delta \rho_c(\vec{r_0} + \vec{r})}{|\vec{r}|} \tag{A.4}$$

Exprimons ces équations avec des fluctuations de densité (A.1). Terme de volume :

$$\delta f^{b} = \frac{1}{2V} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^{2} f^{h}}{\partial \rho_{j} \partial \rho_{i}} \right)_{\{\rho_{q}^{0}\}} \int \int d\vec{k} \, d\vec{k}' \, d\vec{r} \, a_{i}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{j}(\vec{k}') e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}$$

$$= \frac{1}{2V} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^{2} f^{h}}{\partial \rho_{j} \partial \rho_{i}} \right)_{\{\rho_{q}^{0}\}} \int \int \int d\vec{k} \, d\vec{k}' \, d\vec{r} \, a_{i}(\vec{k}) a_{j}(\vec{k}') \delta(\vec{k}+\vec{k}') \qquad (A.5)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^{2} f^{h}}{\partial \rho_{j} \partial \rho_{i}} \right)_{\{\rho_{q}^{0}\}} \int d\vec{k} \, a_{i}(\vec{k}) a_{j}^{*}(\vec{k})$$

Terme en gradients de densités :

$$\delta \mathcal{E}^{\nabla} = \frac{1}{\nabla} \sum_{ij} C_{ij}^{\nabla} \int \int d\vec{k} \, d\vec{k'} \, d\vec{r} \, \nabla \left(a_i(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) \cdot \nabla \left(a_j(\vec{k'}) e^{i\vec{k'}\cdot\vec{r}} \right) = \int d\vec{k} \, k^2 a_i(\vec{k}) a_i^*(\vec{k})$$
(A.6)

Terme direct d'interaction coulombienne :

$$\begin{split} \delta \mathcal{E}^{c} &= \frac{1}{2V} \int \int \int d\vec{k} \, d\vec{k'} \, d\vec{r} \, d\vec{r_0} \, a_c(\vec{k'}) \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{|\vec{r}|} e^{i(\vec{k}+\vec{k'})\cdot\vec{r_0}} \\ &= \frac{1}{2} \int d\vec{k} \, |a_c(\vec{k})|^2 \int d\vec{r} \, \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{|\vec{r}|} \end{split}$$
(A.7)

Ces expressions montrent que la variation de l'énergie libre ne couple pas les différents vecteurs d'onde. Autrement dit, si l'on considère des fluctuations en onde plane telles que :

$$\delta \rho_q(\vec{r}) = A_q e^{i\vec{k}_q \cdot \vec{r}} + c.c. \tag{A.8}$$

la variation δf résultante est non-nulle seulement si les vecteurs d'onde \vec{k}_q associés aux différentes espèces sont égaux. C'est pourquoi nous considérons dans notre étude sur les fluctuations de taille finie des variations de densité en ondes planes avec un vecteur d'onde \vec{k} commun aux trois espèces.

A.2 Calcul du terme direct de l'interaction coulombienne

Considérons une variation de densité de charge de la forme

$$\delta\rho_c(\vec{r}) = A_c e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + c.c. \tag{A.9}$$

Dans une approche semi-classique, nous ne considérons que le terme direct de l'interaction coulombienne. La variation d'énergie coulombienne s'écrit alors :

$$\delta \mathcal{E}^c = |A_c|^2 \int d\vec{r} \, \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{|\vec{r}|} \tag{A.10}$$

Elle peut être calculée en introduisant une longueur d'écrantage λ telle que l'interaction coulombienne entre deux particules de charges respectives q_i et q_j et séparées par une distance $|\vec{r}|$ s'exprime par :

$$V_{ij} = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\lambda|\vec{r}|}}{|\vec{r}|} \tag{A.11}$$

On a alors :

$$\begin{split} \delta \mathcal{E}^c(\lambda) &= |A_c|^2 \int d\vec{r} \, \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-\lambda|\vec{r}|}}{|\vec{r}|} \\ &= |A_c|^2 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \, \frac{e^{-\lambda r}}{r} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) e^{ikr\cos\theta} \\ &= |A_c|^2 \frac{2\pi}{ik} \int_0^\infty dr \, e^{-\lambda r} \left(e^{ikr} - e^{-ikr}\right) \\ &= |A_c|^2 \frac{4\pi}{\lambda^2 + k^2} \end{split}$$
(A.12)

Ainsi, en l'absence d'écrantage, la variation d'énergie coulombienne due à une fluctuation (A.9) est :

$$\delta \mathcal{E}^c = |A_c|^2 \frac{4\pi}{k^2} \tag{A.13}$$

Bibliographie

- [Arn77] W.D.Arnett, Ap. J. 218 (1977) 815-833
- [Ayi95] S.Ayik, M.Colonna and Ph.Chomaz, Phys. Lett. B353 (1995) 417-421
- [Bal82] R. Balian, From Microphysics to Macrophysics, Springer Verlag, 1982.
- [Bal03] M.Baldo and G.F.Burgio, Int. Journ. Mod. Phys. B 17 (2003) 5127
- [Bar98] V.Baran et al, Nucl.Phys. A632 (1998) 287.
- [Bar02] V.Baran et al., Nucl. Phys. A703 (2002) 603
- [Bar05] V.Baran et al., Phys. Rep. 410 (2005) 335-466
- [Bar81] M.Barranco, J.R.Buchler, Phys. Rev. C24 (1981) 1191
- [Bay71a] G.Baym, C.Pethick and P.Sutherland, Astrophys. J. 170 (1971) 299-317
- [Bay71b] G.Baym, H.A.Bethe and C.Pethick, Nucl. Phys. A175 (1971) 225
- [Bei75] M.Beiner et al., Nucl. Phys. A238, 29 (1975)
- [Ber83] G.Bertsch, P.J.Siemens, Phys. Lett. B 126 (1983)
- [Bet79] H.A.Bethe, G.E.Brown, J.Applegate and J.M.Lattimer, Nucl. Phys. A324 (1979) 487-533
- [Bet88] H.A.Bethe, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 38 (1988) 1-28
- [Bla77] J.P.Blaizot and D.Gogny, Nucl. Phys. A284 (1977) 429
- [Boh] D.Bohm and D. Pines, Phys. Rev. 82 (1951) 625; D. Pines and D.Bohm, Phys. Rev. 85 (1952) 338; D.Bohm and D. Pines, Phys. Rev. 92 (1953) 625
- [Bon82] P.Bonche and D.Vautherin, Astron. Astrophys. 112 (1982) 268
- [Bon95] J. Bondorf et al., Phys. Rep. 257 (1995) 133
- [Bor04] B. Borderie et al., Nucl. Phys. A734 (2004) 495
- [Bot02] A.S. Botvina et al., Phys.Rev. C65 (2002) 044610
- [Bra95] F.L.Braghin, D.Vautherin and A.Abada, Phys. Rev. C52 (1995) 2504
- [Bro61] G.E.Brown, J.A.Evans and D.J.Thouless, Nucl. Phys. 24 (1961) 1
- [Bur03] R.Buras, M.Rampp, H.T.Janka and K.Kifonidis, Phys. Rev. Lett. 90 (2003) 241101
- [Bur81] A.Burrows, T.J.Mazurek and J.M.Lattimer, Ap. J. 251 (1981) 325-336
- [Bur86] A.Burrows and J.M.Lattimer, Ap. J. 307 (1986) 178-196
- [Bur95] A.Burrows, J.Hayes and B.A.Fryxell, Ap. J. 450 (1995) 830-850
- [Car98] J.M.Carmona et al., Nucl. Phys. A643 (1998) 115
- [Cat97] F.Catara et al, NPA 624 (1997) 449
- [Cha97] E.Chabanat et al., Nucl. Phys. A627 (1997) 710-746.
- [Cho02] Ph.Chomaz and F.Gulminelli, in Dynamics and Thermodynamics of systems with long range interactions, Lecture Notes in Physics vol.602, Springer (2002)
- [Cho04] Ph.Chomaz, M.Colonna, J.Randrup, Phys. Rep. 389 (2004) 263.
- [Cho05] P.Chomaz, F.Gulminelli, C.Ducoin, P.Napolitani and K.H.O.Hasnaoui, arXiv :astroph/0507633

- [Coc04] B.Cochet, K.Bennaceur, J.Meyer, P.Bonche and T.Duguet, Int. J. Mod. Phys. E13 (2004) 187-190
- [ColG03] G.Colo and Nguyen Van Giai, Proceedings of the COMEX1 Conference, Paris, 2003
- [ColG04] G.Colo, Nguyen Van Giai, J.Meyer, K.Bennaceur and P.Bonche, Phys. Rev. C70 (2004) 024307
- [ColM94] M.Colonna et al., Nucl. Phys. A567 (1994) 637
- [ColM05] M.Colonna and F.Matera, Phys.Rev. C71 (2005) 064605.
- [Das03] C.B.Das et al, Phys. Rev. C67 (2003) 064607
- [Das05] C.B.Das et al, Phys. Rep. 406 (2005) 1
- [Diu89] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, and B. Roulet, *Elements de Physique Statistique*, Hermann, Paris, 1989
- [Dou00a] F.Douchin and P.Haensel, Phys. Lett. B485 (2000) 107
- [Dou00b] F.Douchin, P.Haensel and J.Meyer, Nucl. Phys. A665 (2000) 419
- [Duc06] C.Ducoin, Ph.Chomaz, F.Gulminelli, Nucl. Phys. A771 (2006) 68-92
- [Duf01] V.Duflot-Flandrois, Signaux de transitions de phase des systèmes finis, thèse de doctorat (2001)
- [Ehr59] P.Ehrenfest and T.Ehrenfest, The Conceptual Foundation of the Statistical Approach in Mechanics, Cornell University Press, Ithaka NY, 1959
- [Fet71] A.L. Fetter and J.D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, McGraw-Hill, New York, 1971
- [Fin82] J.E.Finn et al., Phys. Rev. Lett 49 (1982) 1321
- [Fre77] D.Z.Freedman, D.N.Schramm and D.L.Tubbs, Ann. Rev.Nucl. Sci. 27 (1977) 167-207
- [Gle85] N.K.Glendenning, Ap. J. 293 (1985) 470-493
- [Gle92] N.K.Glendenning, Phys. Rev. D46 (1992) 1274
- [Gle97] N.K.Glendenning, Compact Stars, Springer-Verlag, New York, 1997
- [Gle01] N.K.Glendenning, Phys. Rep. 342 (2001) 393.
- [Goo82] B.T.Goodwmin, Ap. J. 261 (1982) 321-331
- [GroD97] D.H.E.Gross, Phys. Rep. 279 (1997) 119
- [GroD01] D.H.E.Gross, *Microcanonical thermodynamics : phase transitions in finite systems*, Lecture notes in Physics vol.66, World Scientific (2001)
- [GroD02] D.H.E.Gross, PCCP, 4 (2002) 863-872
- [GroS67] S.Grossmann and W.Rosenhauer, Z. Phys. 207 (1967) 138
- [Gua97] A.Guarnera et al., Phys. Lett. B403 (1997) 191
- [Gul99] F.Gulminelli and Ph.Chomaz, Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 1402
- [Gul03a] F.Gulminelli, Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 202701
- [Gul03b] F.Gulminelli, J.M.Carmona, Ph.Chomaz, J.Richert, S.Jimenez and V.Regnard, Phys. Rev. E68 (2003) 26119
- [Gul04] F.Gulminelli, Ann. Phys. Fr. 29 (2004) 6
- [Her96] E.S.Hernandez, J.Navarro, A.Polls and J.Ventura, Nucl. Phys. A597 (1996) 1-18
- [Hor04a] C.J.Horowitz, M.A.Perez-Garcia and J.Piekarewicz, Phys. Rev. C69 (2004) 045804
- [Hor04b] C.J.Horowitz, M.A.Perez-Garcia, J.Carriere, D.K.Berry and J.Piekarewicz, Phys. Rev. C70 (2004) 065806
- [Hor05] C.J.Horowitz, M.A.Perez-Garcia, D.K.Berry and J.Piekarewicz, Phys. Rev. C72 (2005) 035801
- [Hua63] K.Huang, Statistical Mechanics, Wiley 1963

BIBLIOGRAPHIE

- [Ish02] C.Ishizuka, A.Ohnishi and K.Sumiyoshi, Prog. Theor. Phys. 146 (2002) 373
- [Ish03] C.Ishizuka, A.Ohnishi and K.Sumiyoshi, Nucl. Phys. A723 (2003) 517
- [Jac96] B.Jacquot, Instabilités spinodales dans les noyaux atomiques, thèse de doctorat (1996)
- [Jay57a] E.T.Jaynes, Phys. Rev. 106 (1957) 620
- [Jay57b] E.T.Jaynes, Phys. Rev. 108 (1957) 171
- [Kri80] H.Krivine, J.Treiner and O.Bohigas, Nucl. Phys. A336 (1980) 155-184
- [Lam76] D.Q.Lamb and C.J.Pethick, Ap. J. 209 (1976) L77-L81
- [Lan] L.D.Landau, E.M.Lifshitz, L.P.Pitaevskii, Cours de Physique Théorique vol.6 : Mécanique des fluides
- [Las87] M.Lassaut, H.Flocard, P.Bonche, P.H.Heenen and E.Suraud, Astron. Astrophys. 183 (1987) L3-L6
- [Lat85] J.M.Lattimer, C.J.Pethick, D.G.Ravenhall, D.Q.Lamb, Nucl. Phys. A432 (1985) 646
- [Lat00] J.M.Lattimer and M.Prakash, Phys. Rep. 333 (2000) 121
- [Leb87] M. Le Bellac, Des phénomènes critiques au champs de jauge, inter ed. CNRS. 1987
- [Lee01] S.J.Lee and A.Z.Mekjian, Phys. Rev. C63 (2001) 44605
- [Lef05] A.LeFevre et al., Phys. Rev. Lett 94 (2005) 162701
- [Len31] J.E. Lennard-Jones, Proc. Camb. Phil. Soc. 27 (1931) 469
- [Li97] B.A.Li and C.Ko, Nucl. Phys. A618 (1997) 498
- [Li98] B.A.Li, C.M.Ko and W.Bauer, Int. J. Mod. Phys. E 7 (1998) 147
- [Li05] B.A.Li and A.W.Steiner, Phys. Rev. C72 (2005) 41601
- [Liu04] T.X.Liu et al., Phys. Rev. C69 (2004) 014603.
- [Lyn94] R.M.Lynden-Bell and D.J.Wales, J. Chem. Phys. 101 (1994) 1460
- [Mag01] P.Magierski and P.H.Heenen, Phys. Rev. C65 (2001) 045804
- [MarJ01] J.Margueron, Effets du milieu sur la propagation des neutrinos dans la matière nucléaire, thèse de doctorat (2001)
- [MarJ02] J.Margueron, J.Navarro, Nguyen Van Giai, Phys. Rev. C66 (2002) 14303
- [MarJ03] J.Margueron, Ph.Chomaz, Phys. Rev. C67 (2003) 041602
- [MarJ04] J.Margueron, J.Navarro and Patrick Blottiau, Phys. Rev. C70 (2004) 28801
- [MarT05] T.Maruyama et al., Phys. Rev. C72 (2005) 015802
- [Mul95] H.Muller and B.Serot, Phys. Rev. C52 (1995) 2072.
- [Nap] P.Napolitani et al., in preparation
- [Nav] J.Navarro, E.S.Hernandez and D.Vautherin, Phys. Rev. C60 (1999) 45801
- [Neg73] J.W.Negele and D.Vautherin, Nucl. Phys. A207 (1973) 298-320
- [Ngu81a] Nguyen Van Giai and H.Sagawa, Nucl. Phys. A371, 1 (1981)
- [Ngu81b] Nguyen Van Giai and H.Sagawa, Phys. Lett. B 106 (1981) 379
- [Ono03] A.Ono et al., Phys. Rev. C68 (2003) 51601.
- [Ono04] A. Ono et al., Phys. Rev. C70 (2004) 041604(R)
- [Pag04] D.Page, J.M.Lattimer, M.Prakash and A.W.Steiner, Ap. J. Supplement 155 (2004) 623
- [Par05] M.Parlog et al., Eur.Phys.J. A25 (2005) 223
- [Pei91] G.Peilert, J.Randrup, H.Stoecker and W.Greiner, Phys. Lett. B260 (1991) 271
- [Pet95a] C.J.Pethick, D.G.Ravenhall, C.P.Lorentz, Nucl. Phys. A584 (1995) 675-703
- [Pet95b] C.J.Pethick and D.G.Ravenhall, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 45 (1995) 429
- [Pel02] A.Pelissetto and E.Vicari, Phys. Rep. 368 (2002) 549-727

- [Pia05] S.Piantelli et al., the Indra Collaboration, Phys.Lett. B627 (2005) 18-25
- [Pic05] M.Pichon, B.Tamain, R.Bougault, O.Lopez (INDRA-ALADIN collaborations), Nucl. Phys. A749 (2005) 93
- [Pon99] J.A.Pons, S.Reddy, M.Prakash, J.M.Lattimer and J.A.Miralles, Ap. J. 513(1999) 780-804
- [Pra01] M.Prakash, J.M.Lattimer, J.A.Pons, A.W.Steiner and S.Reddy, Lect. Notes Phys. 578 (2001) 364
- [Pro06] C.Providencia, L.Brito, S.S.Avancini, D.P.Menezes and Ph.Chomaz, Phys. Rev. C73 (2006) 025805
- [Qia03] W.L.Qian and S.R.Keng, Journ. Phys. G (2003) 1023
- [Rad02] A.H.Raduta and A.R.Raduta, Nucl. Phys. A703 (2002) 876
- [Rad06] Ad.R.Raduta, Phys.Rev. C73 (2006) 014606
- [Rav83] D.G.Ravenhall, C.J.Pethick and J.R.Wilson, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 2066
- [Ric01] J.Richert and P.Wagner, Phys. Rep. 350 (2001) 1-92
- [Rik03] J.Rikovska-Stone, J.C.Miller, R.Koncewicz, P.D.Stevenson and M.R.Strayer, Phys. Rev. C68 (2003) 034324
- [Rin80] P.Ring and P.Schuck, The Nuclear Many-Body Problem, Springer-Verlag, New York, 1980
- [Rin96] P. Ring, Prog. Part. Nucl. Phys. 37, 193 (1996)
- [Riv05] M.F.Rivet et al, Nucl. Phys. A749 (2005) 73
- [Sal81] E.E.Salpeter and S.L.Shapiro, Ap. J. 251(1981) 311-324
- [Saw79] R.F.Sawyer and A.Soni, Ap.J. 230 (1979) 859-869
- [Sha48] C.E.Shannon, Bell System Tech. J. 27 (1948) 379, 623
- [She04] D.V.Shetty et al, Phys.Rev. C70 (2004) 011601
- [Shl04] S.Shlomo, B.K.Agrawal and V.K.Au, Nucl. Phys. A734 (2004) 589
- [Shl05] S.Shlomo, V.M.Kolomietz, Rep. Prog. Phys. 68 (2005) 1
- [Sil04] T.Sil et al., Phys. Rev. C69 (2004) 14602
- [Sri02] B.K.Srivastava et al., Phys. Rev. C65 (2002) 054617
- [Sky56] T.H.R.Skyrme, Phil. Mag. 1 (1956) 1043
- [Sky59] T.H.R.Skyrme, Nucl. Phys. 9 (1959) 615
- [Sta71] H.E.Stanley, Introduction to phase transitions and critical phenomena, Oxford University press, 1971.
- [Sum95] K.Sumiyoshi, H.Suzuki and H.Toki, Astron. Astroph. 303 (1995) 475
- [Tab06] G.Tabacaru et al., the Indra collaboration, Nucl. Phys. A764 (2006) 371
- [Tra05] W.Trautmann et al., Nucl. Phys. A752 (2005) 407
- [Tsa01a] M.B.Tsang et al., Phys. Rev. C64 (2001) 41603.
- [Tsa01b] M.B.Tsang et al., Phys.Rev. C64 (2001) 054615
- [Tub75] D.L.Tubbs and D.N.Shramm, Ap. J. 201 (1975) 467-488
- [Van05a] E.N.E.Van Dalen, C.Fuchs and Amand Faessler, Phys. Rev. Lett. 95 (2005) 022302
- [Van05b] E.N.E.Van Dalen, C.Fuchs and Amand Faessler, Phys. Rev. C72 (2005) 065803
- [Vau72] D.Vautherin and D.M.Brink, Phys. Rev. C 5 (1972) 626
- [Vau96] D.Vautherin, Adv. Nucl. Phys. 22 (1996) 123.
- [Wat03] G.Watanabe, K.Sato, K.Yasuoka and T.Ebisuzaki, Phys. Rev. C68 (2003) 035806
- [Wat04] G.Watanabe, K.Sato, K.Yasuoka and T.Ebisuzaki, Phys. Rev. C69 (2004) 055805
- [Wen98] W.P.Wen et al., Nucl. Phys. A637 (1998) 15-27
- [Wir88] R.B.Wiringa, V.Fiks and A.Fabrocini, Phys. Rev. C38 (1988) 1010
- [Wir93] R.B.Wiringa, Rev. Mod. Phys. 65 (1993) 231
- [Xu85] H.S.Xu et al., Phys. Rev. Lett. 85 (2000) 716.

Résumé : La matière nucléaire présente une transition de phase du type liquide-gaz. Ce caractère bien connu est dû au profil de l'interaction nucléaire (attractive à moyenne portée et répulsive à courte portée). Ainsi, la thermodynamique de la matière nucléaire symétrique est analogue à celle d'un fluide de Van der Waals. L'étude se révèle plus complexe dans le cas de la matière asymétrique, composée de neutrons et protons en proportion arbitraire. L'isospin, qui distingue les deux constituants, donne une mesure de cette proportion. Dans l'étude de la matière asymétrique, il s'agit d'un degré de liberté supplémentaire, ajoutant une dimension à l'espace des observables à considérer.

La transition liquide-gaz nucléaire est associée au phénomène de multi-fragmentation observé dans les collisions d'ions lourds, ainsi qu'à la physique des étoiles compactes : les systèmes concernés sont riches en neutrons, donc affectés par le degré de liberté d'isospin.

Le travail présenté ici est une étude théorique des effets d'isospin apparaissant dans la transition liquide-gaz de la matière nucléaire asymétrique. Une approche de champ moyen est employée, avec une interaction nucléaire effective de type Skyrme. Nous démontrons la présence d'une transition du premier ordre pour la matière asymétrique, et étudions le phénomène de distillation d'isospin qui l'accompagne. Le cas d'une séparation de phase à l'équilibre thermodynamique est comparé à celui d'une décomposition spinodale. Les effets de taille finie sont abordés, ainsi que l'influence du gaz d'électrons présent dans le contexte astrophysique.

<u>Title</u> : Role of isospin in nuclear-matter liquid-gas phase transition

<u>Abstract</u>: Nuclear matter presents a phase transition of the liquid-gas type. This well-known feature is due to the nuclear interaction profile (mean-range attractive, short-range repulsive). Symmetric-nuclear-matter thermodynamics is thus analogous to that of a Van der Waals fluid. The study shows up to be more complex in the case of asymmetric matter, composed of neutrons and protons in an arbitrary proportion. Isospin, which distinguishes both constituents, gives a measure of this proportion. Studying asymmetric matter, isospin is an additional degree of freedom, which means one more dimension to consider in the space of observables.

The nuclear liquid-gas transition is associated with the multi-fragmentation phenomenon observed in heavy-ion collisions, and to compact-star physics : the involved systems are neutron rich, so they are affected by the isospin degree of freedom.

The present work is a theoretical study of isospin effects which appear in the asymmetricnuclear-matter liquid-gas phase transition. A mean-field approach is used, with a Skyrme nuclear effective interaction. We demonstrate the presence of a first-order phase transition for asymmetric matter, and study the isospin distillation phenomenon associated with this transition. The case of phase separation at thermodynamic equilibrium is compared to spinodal decomposition. Finite size effects are addressed, as well as the influence of the electron gas which is present in the astrophysical context.

<u>Mots-clés</u> : Matière nucléaire; Physique statistique; Transitions de phase; Equilibre chimique; Interactions d'ions lours; Hartree-Fock, Méthode d'approximation; Etoiles à neutrons; Supernovae.

Discipline : constituants élémentaires

GANIL BP 55027 - 14076 CAEN cdex 5