



HAL
open science

Nouvelles paramétrisations de l'interaction nucléaire effective de Gogny

Frédéric Chappert

► **To cite this version:**

Frédéric Chappert. Nouvelles paramétrisations de l'interaction nucléaire effective de Gogny. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Paris Sud - Paris XI, 2007. Français. NNT : . tel-00177379

HAL Id: tel-00177379

<https://theses.hal.science/tel-00177379>

Submitted on 8 Oct 2007

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.

UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD XI

Thèse

présentée par

Frédéric CHAPPERT

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Paris-Sud XI

Spécialité : **Physique Théorique**

N° d'ordre : **8672**

**Nouvelles paramétrisations de
l'interaction nucléaire effective
de Gogny**

Soutenue publiquement le **19 Juin 2007**

Après avis de :

- M. **Jacques Meyer**, professeur, Université Claude Bernard Lyon 1
- M. **Thomas Duguet**, professeur assistant, Michigan State University

Devant la commission d'examen formée de :

- | | |
|----------------------------------|--------------------|
| M. Hubert Flocard , | Directeur de Thèse |
| M. Jacques Meyer , | Rapporteur |
| M. Thomas Duguet , | Rapporteur |
| M. Peter Ring , | Examineur |
| M. Daniel Gogny , | Examineur |
| M. Jean-François Berger , | Examineur |

Thèse préparée au sein du Service de Physique Nucléaire,
CEA/DAM Bruyères-Le-Châtel

Résumé :

L'interaction effective entre les nucléons est un ingrédient essentiel des calculs microscopiques de structure nucléaire. L'une des formes utilisée depuis les années 1970 est la force effective phénoménologique proposée par D. Gogny. Cette force donne d'excellents résultats dans les noyaux à l'approximation du champ moyen. La présence de composantes de contact ne permet pas cependant de l'employer en toute généralité pour décrire les corrélations au-delà du champ moyen qui se manifestent fréquemment dans les noyaux. Dans ce travail, nous étudions des extensions de la force de Gogny, notamment une généralisation où le terme dépendant de la densité de portée nulle est remplacé par un terme de portée finie. Les paramètres intervenant dans la forme analytique de la force sont ajustés sur les propriétés de la matière nucléaire infinie symétrique et de la matière neutronique, et sur les observables globales de quelques noyaux stables, en particulier celles associées aux corrélations d'appariement. Nous présentons la méthode permettant d'inclure ce type de force dans les codes de calcul Hartree-Fock-Bogoliubov et nous analysons les résultats obtenus dans de nombreux noyaux. Les nouvelles versions de la force de Gogny apparaissent reproduire la structure nucléaire avec une qualité égale ou supérieure à la version traditionnelle.

Mots-clés :

structure nucléaire, interaction effective de Gogny, méthodes de champ moyen, approximation Hartree-Fock-Bogoliubov, matière nucléaire, noyaux atomiques

Abstract :

The effective interaction between nucleons is the basic input to microscopic calculations in nuclear structure. One of the forms used since the 1970's is the phenomenological effective force proposed by D. Gogny. This force gives excellent results in nuclei at the mean-field approximation. The presence of contact terms does not allow, however, to use it for the description of beyond mean-field correlations present in nuclei.

In this work, we investigate some extensions of the Gogny force, and especially a generalization in which the zero range density dependent term has been replaced by a finite range term. The parameters occurring in the analytical form of the force have been adjusted on symmetric infinite nuclear matter and neutron matter properties, and on some selected observables for stable nuclei, especially those related to pairing correlations. We present the method to include this kind of force in Hartree-Fock-Bogoliubov calculations and we analyze the results obtained for various nuclei. The new versions of the Gogny force allow to reproduce nuclear structure properties with improved accuracy as compared to the former version.

Keywords :

nuclear structure, Gogny effective interaction, mean-field methods, Hartree-Fock-Bogoliubov approximation, nuclear matter, atomic nuclei

Thèse accessible au format *PDF* sur le serveur TEL (thèses-en-ligne)

http://tel.archives-ouvertes.fr

Remerciements

Tout au long de ces trois années de thèse, j'ai eu la chance de cheminer sur un parcours passionnant. Au fur et à mesure de l'avancement des travaux, mon enthousiasme n'a cessé de grandir et les obstacles rencontrés se sont révélés autant de défis stimulants qu'il a fallu surmonter à force d'imagination. Mes discussions avec chacun des membres du groupe de Structure Nucléaire Théorique ont fortement contribué aux progrès de ce travail. Leurs réactions et leurs remarques face aux problèmes de Physique, de Mathématiques ou d'Informatique que je leur exposais m'ont toujours permis de réorienter mon approche des difficultés et, bien souvent, de les résoudre. En ce sens, cette thèse reste d'abord le fruit d'une collaboration étroite avant d'être l'oeuvre d'une personne.

Je souhaite remercier en premier lieu Monsieur D. Vanderhaegen, chef du Département de Physique Théorique et Appliquée, ainsi que Monsieur J.-L. Sida, chef du Service de Physique Nucléaire, pour m'avoir permis de réaliser, dans d'aussi excellentes conditions de travail, cette thèse au Commissariat à l'Energie Atomique de Bruyères-le-Châtel.

Je remercie profondément Monsieur H. Flocard, directeur du Centre de Spectrométrie Nucléaire et de Spectrométrie de Masse à Orsay, pour son investissement en tant que directeur de thèse. Nos rencontres étaient l'occasion d'explorer de nouvelles pistes de recherche qui m'ont incité à élargir le spectre de ce travail.

Je remercie également l'ensemble des autres membres de mon jury de thèse. Par leurs remarques pertinentes et avisées, Messieurs J. Meyer et T. Duguet, rapporteurs de ce travail, ont contribué à l'élaboration finale du manuscrit. J'exprime toute ma gratitude à Messieurs P. Ring, D. Gogny et J.-F. Berger pour leur participation au jury en tant qu'examineurs.

C'est avec grand plaisir que j'adresse mes plus chaleureux remerciements à Monsieur M. Girod. Son accompagnement constant tout au long de ces trois années de recherche s'est révélé déterminant dans la conduite du projet de thèse. Je suis resté très sensible aux innombrables heures qu'il a accepté de consacrer pour m'expliquer le fonctionnement des codes informatiques que je devais utiliser ou faire évoluer.

Je voudrais tout particulièrement remercier Monsieur J.-F. Berger pour son fort investissement dans ce projet. Au cours des nombreuses discussions que nous avons pu avoir, j'ai pris un réel plaisir à approfondir mes connaissances en Mécanique Quantique et, plus

généralement, en Physique Théorique. Par ses fins talents de pédagogue, il a su me faire apprécier les subtilités du formalisme inhérent aux techniques du champ moyen nucléaire. Sa collaboration a été capitale dans la résolution des problèmes théoriques les plus difficiles que j'ai pu rencontrer.

Je souhaite présenter mes remerciements les plus vifs à Monsieur D. Gogny pour son accueil très cordial au laboratoire national de Livermore (Etats-Unis, Californie). Au cours de ce séjour outre-Atlantique, il m'a fait partager sa compréhension profonde de la Physique Théorique pour interpréter les résultats de mes recherches, notamment ceux relatifs aux paramètres de Landau et à l'énergie de surface.

J'aimerais tout spécialement remercier Madame M.-G. Porquet avec qui j'ai collaboré sur différents projets de recherche relatifs à la structure nucléaire. Au cours de nos échanges, j'ai pu profiter de sa connaissance précise des techniques expérimentales pour mieux appréhender les conditions de confrontation Théorie-Expérience.

La première année de thèse a été marquée par la rencontre de Madame M. Oertel et Monsieur R. Lazauskas. Ces deux post-doctorants m'ont énormément appris sur les méthodes de définition d'un champ moyen relativiste à partir d'un Lagrangien effectif décrivant les interactions mésons-nucléon, ainsi que sur les méthodes numériques de résolution de l'équation de Schrödinger dans un maillage de l'espace de configuration. C'est avec bonheur que je leur exprime ici toute ma reconnaissance.

Je souhaite manifester mes remerciements les plus soutenus à l'ensemble des membres du groupe de Structure Nucléaire Théorique. Merci à Mademoiselle N. Pillet avec qui j'ai beaucoup travaillé sur les éléments de matrice de l'interaction nucléaire, à Madame S. Péru qui s'est maintes fois rendue disponible pour répondre à mes questions sur la théorie de la "Random Phase Approximation" et ses extensions, à Madame H. Goutte pour son sens des responsabilités et ses qualités relationnelles, à Monsieur B. Ducomet si disposé à répondre à toutes mes questions relatives à l'Algèbre matricielle, l'Analyse numérique ou d'autres disciplines des Mathématiques, à Monsieur J.-P. Delaroche pour son ouverture scientifique et ses conseils précieux dans la recherche de références expérimentales, à Monsieur S. Hilaire qui a assuré la gestion informatique nécessaire au calcul de tous les isotopes stables des éléments de la table de Mendeleïev, à Monsieur V. Rotival qui a su m'initier au logiciel graphique *DISLIN* à partir duquel j'ai réalisé la quasi-totalité des figures présentées dans ce manuscrit, et à Monsieur N. Dubray pour son aide technique d'une efficacité rare sur nombre de subtilités informatiques.

Un grand merci également à Madame V. Diodovich, secrétaire du service de Physique Nucléaire, pour son soutien dévoué dans toutes les tâches administratives relatives au contrat de thèse et aux missions à l'étranger.

Il m'est très agréable enfin de remercier tous les autres membres du service, expérimentateurs et théoriciens, avec lesquels j'ai pu partager, pendant ces trois années de thèse, ma passion pour la description physique du noyau atomique.

Table des matières

Remerciements	I
Introduction	1
I L’ajustement de l’interaction de Gogny	7
I.1 Les approches HF et HFR	9
I.2 Ajustement des propriétés globales	12
I.3 Ajustement des propriétés d’appariement	20
I.4 Ajustement de l’énergie de symétrie	27
I.5 Schéma global de l’ajustement	31
II L’interaction D1N	33
II.1 Matière neutronique et interaction de Gogny	33
II.1.1 L’équation d’état de la matière neutronique	33
II.1.1.1 La méthode Monte-Carlo variationnelle et les interactions réalistes	33
II.1.1.2 La méthode Hartree-Fock et les interactions effectives . . .	35
II.1.2 L’ajustement de l’interaction D1N	37
II.1.2.1 La méthode d’ajustement de la matière neutronique . . .	37
II.1.2.2 L’interaction D1N et les propriétés de la matière nucléaire	41
II.2 Structure des noyaux finis avec D1N	54
II.2.1 Masse effective et états à une particule	54
II.2.1.1 Dans la matière nucléaire	54

II.2.1.2	Dans les noyaux finis	55
II.2.2	La caractérisation des corrélations d'appariement	58
II.2.2.1	Par l'oscillation de masses pair-impair	58
II.2.2.2	Par les moments d'inertie	63
II.2.3	La description des énergies de liaison	66
II.2.3.1	Avec la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov	66
II.2.3.2	Avec la méthode de l'Hamiltonien de Bohr	70
III	L'interaction de Gogny avec un terme densité de portée finie	73
III.1	Forme fonctionnelle du terme densité	75
III.1.1	Limitations d'un terme densité de portée nulle	75
III.1.2	Trois extensions possibles vers une portée finie	76
III.1.3	La nouvelle forme analytique du terme densité	78
III.2	La nouvelle procédure de détermination des paramètres de l'interaction	81
III.2.1	Le premier système de contraintes	82
III.2.2	Le second système de contraintes	83
III.3	Les premières interactions, D2G ₁ et D2G ₂	86
III.4	La paramétrisation D2A	95
III.5	La paramétrisation D2B	105
III.6	Paramètres de Landau	109
IV	Propriétés des noyaux finis avec les paramétrisations D2A et D2B	115
IV.1	Algorithme de calcul des champs avec un terme densité de portée finie	115
IV.1.1	Position du problème	115
IV.1.1.1	Cas $G(r) = e^{-r^2/p^2}$, $F[\rho] = 1$	117
IV.1.1.2	Cas $G(r) = e^{-r^2/p^2}$, $F[\rho] = \frac{1}{2}(\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2))$	117
IV.1.2	Traitement numérique du terme densité de portée finie	122
IV.1.2.1	Introduction de la méthode par un cas simple	122
IV.1.2.2	Application au cas du terme de champ $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$	125

IV.2	Structure des noyaux finis	129
IV.2.1	Les noyaux sphériques	129
IV.2.1.1	Masses effectives et états à une particule	129
IV.2.1.2	La chaîne isotopique de l'Étain	133
IV.2.1.3	La chaîne isotopique du Plomb	140
IV.2.2	Les propriétés relatives à la déformation des noyaux	144
IV.2.2.1	Moments d'inertie de quelques terres rares et actinides	144
IV.2.2.2	Les barrières de fission	146
IV.2.3	La description des énergies de liaison	148
Conclusions		153
A Matière Nucléaire Infinie Asymétrique		155
A.1	Fonctions d'onde	155
A.2	Densité	155
A.3	Paramètre d'asymétrie	156
A.4	Energie	156
A.4.1	Energie cinétique	156
A.4.2	Energie potentielle	156
A.4.2.1	Eléments de matrice spatiaux	158
A.4.2.2	Energie potentielle	159
A.4.2.3	Terme de portée nulle	160
A.4.2.4	Cas particuliers	161
A.5	Incompressibilité	162
A.6	Energie de symétrie	163
A.7	Masse effective	164
B		167
B.1	Rappels sur la représentation de l'OH sphérique	167
B.2	Eléments de matrice de l'interaction	168

B.2.1	Composante d'espace $\langle r_a r_b G^{(i)} r_c r_d \rangle$	168
B.2.1.1	Cas $G^{(i)} = G^{(1)}$	169
B.2.1.2	Cas $G^{(i)} = G^{(2)}$	169
B.2.1.3	Cas $G^{(i)} = G^{(3)}$	170
B.2.2	Composante de spin-isospin $\langle \alpha_a \alpha_b W_{SI}^{(i)} \alpha_c \alpha_d \rangle$	170
B.2.2.1	Cas $W_{SI}^{(i)} = W_{SI}^{(1)} = W_{SI}^{(3)}$	171
B.2.2.2	Cas $W_{SI}^{(i)} = W_{SI}^{(2)}$	171
B.3	Energies des états à une particule	171
B.3.1	Contribution du terme cinétique $\langle a t a \rangle$	172
B.3.2	Contribution du champ Hartree-Fock $\Gamma_{aa}^{(i)}$	172
B.3.2.1	Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(1)}$	172
B.3.2.2	Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(2)}$	173
B.3.2.3	Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(3)}$	173
B.3.3	Contribution du champ de réarrangement $\partial \Gamma_{aa}^{(i)}$	174
B.3.4	Application : étude de la différence $\Delta \varepsilon = \varepsilon_{2s_{1/2}}' - \varepsilon_{2s_{1/2}}^\pi$ entre les énergies des états $2s_{1/2}$, neutron et proton, dans le ^{48}Ca	174
B.3.4.1	Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(1)}$	175
B.3.4.2	Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(2)}$	175
B.3.4.3	Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(3)}$	175
B.4	Energie de liaison totale	175
B.4.1	Energie cinétique	176
B.4.2	Energie potentielle $V^{(i)}$	176
B.4.2.1	Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(1)}$	176
B.4.2.2	Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(2)}$	177
B.4.2.3	Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(3)}$	177

C Champs Hartree-Fock-Bogoliubov avec un terme densité de portée finie 179

C.1	Rappels sur la représentation de l'OH axial	179
-----	---	-----

C.2	HFB statique en symétrie axiale	180
C.3	Champ Γ	183
C.3.1	Cas $m_a=m_c=m$	184
C.3.2	Cas $m_a=m, m_c=m+1$	186
C.3.3	Eléments de matrice spatiaux	187
C.4	Champ $\partial\Gamma$	190
C.5	Champ Δ	195
C.6	Champ $\partial\Delta$	197
C.7	Appendices	199
C.7.1	Fonctions de l'oscillateur harmonique et fonctions génératrices . . .	199
C.7.2	Expression des T en axial	200
C.7.2.1	Expression des T radiaux	201
C.7.2.2	Expression des T relatif à z	203
C.7.3	Expression des $G_{m_\mu\nu_\mu}(\vec{r})$	204
C.7.4	Cas où $F(\rho) = 1$	206
C.7.5	Cas où $G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$	213
C.7.6	Coefficients de Moshinsky en symétrie axiale	216

Introduction

L'un des grands défis de la physique nucléaire théorique depuis plus de 50 ans est d'expliquer la structure des noyaux et les phénomènes qui les font intervenir en terme de leurs constituants de base – les nucléons – et de leurs interactions mutuelles. Une telle description “microscopique” des noyaux possède évidemment de nombreux avantages puisqu'elle propose un cadre unifié permettant en principe de déduire les propriétés de toutes les systèmes nucléaires imaginables, y compris les nuclides les plus exotiques et les états des noyaux inaccessibles aux mesures expérimentales. D'un autre côté, les difficultés d'une telle entreprise sont bien connues. Tout d'abord, l'interaction entre les nucléons n'est pas de nature fondamentale et il est nécessaire de déterminer dans un premier temps la forme à employer dans le problème nucléaire à N corps. D'autre part, la résolution du problème nucléaire à N corps quantique lui-même est un problème notoirement difficile.

Les travaux réalisés depuis les années 1950 montrent que l'approche théorique fondée sur la théorie du champ moyen et ses extensions constitue probablement l'une des méthodes les plus puissantes et les plus fructueuses pour parvenir à cet objectif. Cette approche théorique est fondée sur une hiérarchie d'approximations successives, l'ordre le plus bas consistant à déterminer le champ moyen du noyau dans un cadre variationnel. Sa justification historique est la théorie de Brueckner-Hartree-Fock (BHF) et le développement en amas couplés de Goldstone [1]. La théorie de Brueckner donne le moyen de construire une interaction effective régularisée – la matrice de réaction “ G ” – qui intègre les corrélations à courte portée entre les nucléons provenant de la forte répulsion à petite distance de l'interaction nucléon-nucléon libre. Cette interaction effective est ensuite utilisée pour construire un champ moyen nucléaire auto-cohérent avec la procédure Hartree-Fock et définir l'interaction résiduelle qui intervient dans le développement de Goldstone.

Dans la pratique, cependant, la théorie du champ moyen a été rarement appliquée aux noyaux sous la forme proposée par la théorie de BHF et le développement de Goldstone. La raison première est la difficulté d'implémenter ces théories dans les noyaux réels, notamment dans les noyaux lourds. Une autre raison, plus préoccupante, est notre méconnaissance de l'interaction élémentaire entre deux nucléons, le point de départ de toute la méthode. Les résultats des techniques dites “ab initio” : méthodes de Faddeev-Yakubovsky [2], techniques Monte Carlo [3], modèle en couches sans coeur [4], qui résolvent l'équation de Schrödinger à N corps exactement pour les noyaux les plus légers illustrent cette déficience. Les potentiels locaux les plus récents entre deux nucléons libres ajustés sur les

déphasages de la diffusion nucléon-nucléon et les propriétés du deutéron, par exemple le potentiel d'Argonne, ne permettent pas de retrouver l'énergie de liaison et les spectres des noyaux de masses $A < 10$ [5]. Afin de remédier à ce problème, les potentiels nucléon-nucléon classiques (Argonne par exemple) sont complétés par des potentiels à trois corps phénoménologiques [6]. Il est clair cependant que cette difficulté provient du fait que les éléments de matrice de ces potentiels hors de la couche d'énergie ne sont pas contraints. Les théories effectives de l'interaction nucléaire, notamment celles fondées sur la théorie de perturbations chirale, constituent une voie prometteuse qui devrait permettre, à terme, de construire des potentiels nucléon-nucléon effectifs plus fiables que ceux dérivés des interactions réalistes classiques.

Etant donnée cette situation, la théorie du champ moyen a été appliquée en postulant pour l'interaction nucléaire effective une forme empirique inspirée de la théorie de Brueckner et contenant des paramètres ajustés directement sur les propriétés connues des noyaux. Cette méthode heuristique a conduit notamment aux deux forces nucléaires effectives les plus employées de nos jours dans les approches de champ moyen : la force de Skyrme[7] et la force de Gogny[8]. Ces interactions effectives phénoménologiques se présentent comme des potentiels d'interaction à deux corps, mais dépendant fortement de la densité du milieu où interagissent les deux nucléons. Elles retiennent de l'interaction effective décrite par la matrice G de Brueckner des symétries fondamentales comme l'invariance par rotation et l'indépendance de charge. Elles comportent également une forte dépendance vis-à-vis de la densité du milieu où interagissent les deux nucléons, une propriété qui découle de la théorie de Brueckner.

Les très nombreux travaux réalisés dans le cadre de la théorie du champ moyen avec les interactions effectives phénoménologiques de Skyrme et de Gogny démontrent l'efficacité de cette approche. Elles ont pu être appliquées à tous les noyaux, y compris les plus lourds et ont permis d'interpréter un nombre considérable de résultats expérimentaux. Leur utilisation dans la description microscopique des noyaux possède cependant le désavantage de rompre le lien entre la théorie du champ moyen et la série de perturbation qui permet de calculer les corrections d'ordre supérieur à cette théorie. Or, dans la plupart des noyaux, l'approximation de champ moyen la plus simple, celle fondée sur une fonction d'onde de particules indépendantes et la procédure Hartree-Fock (HF), n'est pas suffisante. Il est pratiquement toujours nécessaire de tenir compte des corrélations de longue portée entre les nucléons engendrées par l'interaction résiduelle. Parmi ces corrélations, les plus fréquentes sont les corrélations d'appariement qui se manifestent dans tous les noyaux à couche – proton et/ou neutron – ouverte et les corrélations de longue portée qui proviennent des oscillations collectives du champ moyen. Afin de les inclure, des extensions spécifiques de la théorie du champ moyen sont employées, consistant à appliquer le principe variationnel avec une forme de fonction d'onde plus générale qu'un état de particules indépendantes. Les plus courantes sont la théorie de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) en ce qui concerne les corrélations d'appariement, les techniques RPA ("Random Phase Approximation") et QRPA ("Quasi-particle Random Phase Approximation") pour décrire les oscillations collectives de faible amplitude du champ moyen et la Méthode de la Coor-

donnée Génératrice (GCM) dans le cas des oscillations collectives de grande amplitude [9]. On peut ajouter à cette liste les techniques de projection permettant de restaurer les symétries brisées par le champ moyen, ainsi que les méthodes permettant d'inclure des corrections d'ordre supérieur au mouvement des nucléons comme celles décrivant le couplage particule-vibration [9].

Ces différentes extensions de la théorie du champ moyen peuvent être vues comme un moyen heuristique de simuler les ordres supérieurs de la théorie de Goldstone. Elles posent cependant le problème de savoir quel type d'interaction doit être introduit dans le hamiltonien effectif qui détermine l'interaction résiduelle responsable des corrélations introduites. En fait, les études réalisées avec l'interaction de Gogny montrent que cette interaction est capable de rendre compte avec précision à la fois du champ moyen du noyau, des corrélations d'appariement et des corrélations provenant des oscillations collectives à l'approximation de la RPA. L'une des conditions pour y parvenir a été d'introduire dans la paramétrisation de cette interaction des composantes de portée non nulle de façon à ce que les éléments de matrice de l'interaction entre les configurations particule-trou excitées décroissent en fonction du moment de transfert.

Dans des cas plus généraux, notamment dans la théorie de la GCM, la dépendance en densité de l'interaction pose un problème. Il n'est en effet pas évident de savoir quelle densité utiliser dans le calcul des éléments de matrice de l'interaction entre deux états de champ moyen différents. Une analyse approfondie de ce problème et une solution permettant de le résoudre a été proposée par T. Duguet[10].

L'objectif de ce travail de thèse a été de procéder à une réanalyse de l'interaction de Gogny dans deux directions différentes.

La première a consisté à déterminer un nouveau jeu de paramètres de l'interaction dans le but d'améliorer ses propriétés dans le degré de liberté d'isospin. Cette étude vise à donner une description améliorée des noyaux exotiques, et plus particulièrement des noyaux riches en neutrons qui en constituent la grande majorité. Pour ce faire, de nouvelles contraintes sur les paramètres ont été imposées à la lumière des données nouvelles disponibles ces dernières années, notamment de l'équation d'état de la matière neutronique calculée avec les techniques de Monte-Carlo et l'interaction d'Argonne [11]. Cette étude a été conduite dans le même esprit que celle réalisée par le Groupe IPN-Lyon-Saclay il y a quelques années et qui a conduit à la version SLy4 de l'interaction de Skyrme[12, 13]. La version nouvelle de l'interaction de Gogny qui en a résulté a été dénommée D1N. Ses propriétés dans la matière nucléaire et dans les noyaux finis sont analysées dans ce travail et comparées aux versions anciennes D1 et D1S. Notons que l'interaction D1 a été mise au point au début des années 1970 et la version D1S au début des années 1980.

La seconde étude s'est proposée de mettre au point une nouvelle paramétrisation de l'interaction de Gogny dans laquelle tous les termes de l'interaction sont de portée finie. Les raisons qui ont conduit à cette nouvelle extension sont essentiellement au nombre de deux.

La première repose sur l'observation qu'une interaction de portée finie possède des propriétés fondamentalement différentes de celles d'une force de contact, ceci déjà à l'approximation du champ moyen. En particulier, une force de portée nulle conduit à un champ moyen local, tandis qu'une force de portée finie produit une composante non-locale – le champ d'échange – qui affecte notablement la structure des états à une particule. Il convient également de signaler que la portée finie de la force nucléaire effective joue également un rôle dans l'intensité et la structure des corrélations de longue portée qui président aux propriétés de déformations des noyaux [8].

La seconde raison se situe dans la perspective de l'utilisation de la force effective de Gogny dans les approches au-delà du champ moyen. Dans l'esprit d'une approche entièrement microscopique de la structure des noyaux, il apparaît logique – bien qu'il n'existe aucune justification fondamentale pour cela – de chercher à construire l'interaction résiduelle responsable des corrélations au-delà du champ moyen en employant la même force nucléaire que celle utilisée pour le champ moyen. Compte tenu de ce qui a été dit plus haut, ceci n'est possible que si les éléments de matrice à deux corps de l'interaction nucléaire décroissent en fonction du moment transféré, c'est-à-dire si l'interaction effective est de portée non nulle.

La force de Gogny traditionnelle contient deux termes de portée nulle : la composante spin-orbite et celle dépendant de la densité. Des indications existent montrant qu'il serait souhaitable d'introduire, déjà au niveau du champ moyen, une portée finie dans la composante spin-orbite. Cette extension permettrait notamment d'améliorer la dépendance du champ spin-orbite vis-à-vis de l'isospin, en autorisant son action à la fois dans les sous-espaces $T=0$ et $T=1$ des états à deux nucléons. En ce qui concerne la contribution de cette composante à l'interaction résiduelle, il apparaît qu'elle peut en première approximation être négligée. En effet, elle intervient faiblement dans le champ d'appariement des noyaux et son influence sur les éléments de matrice particule-trou des approches RPA et QRPA est petite en valeur relative.

La composante de la force effective dépendant de la densité se comporte de façon très différente vis-à-vis des corrélations au delà du champ moyen. Concernant les corrélations d'appariement, des arguments théoriques indiquent que, au premier ordre, la partie de l'interaction résiduelle qui les génère n'est pas renormalisée par les effets de milieu. On s'attend donc à ce qu'elle soit pratiquement indépendante de la densité. Par conséquent la composante dépendant de la densité de la force effective devrait très peu contribuer aux corrélations d'appariement. En revanche, on sait que cette composante est essentielle dans la description des corrélations de type RPA et QRPA [8]. On s'attend à ce qu'elle joue un rôle également très important dans les corrélations plus générales de type particule-vibration qui renormalisent les états à une particule du champ moyen, ainsi que dans les noyaux impairs.

Dans les paramétrisations traditionnelles D1, D1S et D1N de l'interaction de Gogny, l'action de la composante dépendant de la densité a été limitée au sous-espace triplet pair des états à deux nucléons afin que seules les composantes de portées finies de la force interviennent dans l'interaction d'appariement entre nucléons de même type. Cette limitation était nécessaire afin d'être en mesure d'appliquer la méthode de HFB sans avoir

à tronquer artificiellement l'espace des états à une particule susceptibles de s'apparier. Une telle restriction apparaît cependant excessive lorsqu'il s'agit de décrire les corrélations autres que l'appariement. Dans ce cas, il est souhaitable que la composante dépendant de la densité soit en mesure d'agir dans d'autres sous-espaces des états à deux nucléons que le seul espace triplet-pair. Dans ces conditions, comme nous l'avons souligné, il est nécessaire que cette composante soit de portée finie afin que les éléments de matrice de l'interaction possèdent un comportement non pathologique.

Etant donnée le rôle prépondérant joué dans les approches au-delà du champ moyen par la composante dépendant de la densité, nous nous sommes concentrés dans ce travail de thèse à l'extension à une portée finie de cette seule composante, laissant pour le futur une généralisation similaire de la composante spin-orbite.

Le mémoire est divisé en quatre chapitres. Dans le premier sont exposés le détail de la méthode et les observables utilisées pour ajuster les paramètres des interactions de Gogny traditionnelles D1 et D1S. Le second chapitre présente la version D1N de la force, la technique qui a permis de la construire ainsi que ses propriétés dans la matière nucléaire infinie et dans les noyaux finis. Les chapitres III et IV sont consacrés à la nouvelle version de l'interaction de Gogny incluant un terme densité de portée finie. Le choix de la forme fonctionnelle de ce terme et la procédure adoptée pour en ajuster les paramètres sont exposés dans le chapitre III. Deux versions dénommées D2A et D2B sont obtenues dont les propriétés d'appariement sont légèrement différentes. Le chapitre IV commence par présenter la méthode employée pour parvenir à évaluer les champs d'échange et d'appariement avec la nouvelle forme du terme densité sans accroissement excessif des temps de calcul. Les résultats obtenus avec les interactions D2A et D2B dans divers noyaux sont ensuite décrits et comparés avec ceux des paramétrisations D1S et D1N et avec les données expérimentales. Cette analyse conduit à privilégier l'une des deux versions de la force qui est finalement proposée sous le nom de D2.

Chapitre I

L'ajustement de l'interaction de Gogny

L'interaction nucléaire effective postulée par D. Gogny a la forme analytique suivante :

$$\begin{aligned} V(1, 2) = & \sum_{j=1,2} e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_j^2}} (W_j + B_j P_\sigma - H_j P_\tau - M_j P_\sigma P_\tau) \\ & + t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left[\rho \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \right]^\alpha \\ & + i W_{ls} \overleftarrow{\nabla}_{12} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \overrightarrow{\nabla}_{12} \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \end{aligned} \quad (\text{I.1})$$

Cette forme analytique contient un ensemble de paramètres ajustables que nous notons $\{V_{12}^{Gogny}\}$:

$$\{V_{12}^{Gogny}\} = \{W_1, B_1, H_1, M_1, \mu_1, W_2, B_2, H_2, M_2, \mu_2, t_0, x_0, \alpha, W_{ls}\}.$$

Pour définir complètement l'interaction, il reste à déterminer les valeurs de ces paramètres. Ce chapitre a pour but de répondre à la question suivante :

Comment faut-il déterminer les valeurs des paramètres de l'interaction $\{V_{12}^{Gogny}\}$ pour décrire au mieux les propriétés nucléaires dans le cadre des théories de champ moyen ?

La procédure représentée sur la Fig. I.1 est une première proposition de réponse. Elle permet de sélectionner les valeurs des paramètres de l'interaction en fonction de l'accord entre les résultats théoriques et les données expérimentales. Plus précisément, cette procédure affecte un premier ensemble de valeurs aux paramètres $\{V_{12}^{Gogny}\}$ de l'interaction, c'est l'étape [1]. L'interaction, alors complètement définie, peut être utilisée dans des codes de calculs basés sur les méthodes HF, HF+BCS, HFB, RPA, GCM, C'est l'étape [2]. Ces codes permettent de calculer de nombreuses observables ou *données théoriques* dont quelques-unes sont mentionnées à l'étape [3] de la Fig. I.1 : les rayons neutron et proton du noyau, son énergie de liaison, les probabilités de transition quadrupolaire électrique B(E2), les énergies des états excités

L'étape [4] compare ces *données théoriques* aux *données expérimentales*. La taille ou le rayon d'un noyau sont accessibles à l'expérience, en particulier le rayon de charge peut être mesuré par diffusion d'électrons [14]. Pour les énergies de liaison, la compilation de résultats expérimentaux la plus utilisée est celle d'Audi-Wapstra [15, 16]. Enfin, les probabilités de transition quadripolaire électrique $B(E2)$ et les énergies des premiers états 2^+ ont été mesurées dans de nombreux noyaux pair-pair [17].

Si les résultats théoriques reproduisent ces données expérimentales avec une bonne précision, alors l'interaction est validée. Dans le cas contraire, les valeurs affectées aux paramètres de l'interaction sont modifiées et les calculs de l'étape [2] sont relancés avec cette nouvelle interaction. Le cycle recommence ...

Cette première procédure propose donc de faire varier les paramètres de l'interaction $\{V_{12}^{Gogny}\}$ en générant ainsi un certain nombre d'interactions, et de garder celle qui reproduit le mieux les données expérimentales.

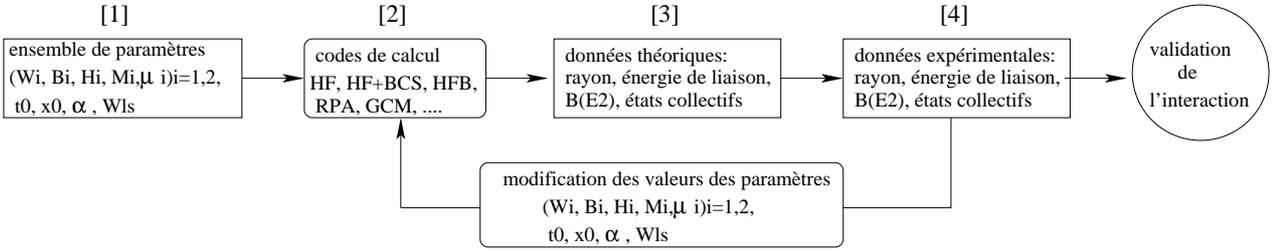


FIG. I.1 – Première procédure de détermination des paramètres $(W_i, B_i, H_i, M_i, \mu_i)_{i=1,2}, t_0, x_0, \dots$ de l'interaction.

Une procédure plus astucieuse consisterait à contraindre directement les paramètres de l'interaction à partir d'un ensemble de données expérimentales. Cette deuxième approche est schématisée sur la Fig. I.2. Cette fois-ci, ce sont les données expérimentales qui sont prises pour point de départ (étape [1]). Elles permettent de contraindre les valeurs des données théoriques. Par exemple, on demande à ce que le rayon et l'énergie de liaison théoriques du ^{208}Pb reproduisent exactement les valeurs expérimentales. Cette étape [2] permet donc de définir les valeurs des données théoriques à partir des données expérimentales. Pour remonter aux paramètres de l'interaction, il faut être capable, en troisième étape, d'inverser les méthodes de calcul de type champ moyen. Cette inversion permet de déterminer les valeurs des paramètres de l'interaction $\{V_{12}^{Gogny}\}$ à partir des données théoriques. Cette deuxième procédure donne donc la possibilité de déduire les paramètres de l'interaction d'un ensemble de données expérimentales.

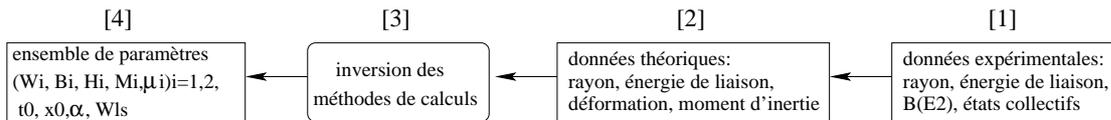


FIG. I.2 – Deuxième procédure de détermination des paramètres $(W_i, B_i, H_i, M_i, \mu_i)_{i=1,2}, t_0, x_0, \dots$ de l'interaction.

L'inversion des méthodes de calcul (étape [3]) n'est possible que si la relation entre les données théoriques et les paramètres de l'interaction est analytique. Autrement dit, pour réaliser cette inversion, il faut pouvoir écrire chaque donnée théorique comme une fonction analytique des paramètres de l'interaction.

Les méthodes de calcul de type champ moyen (HF, HFB, ...) sont de nature itérative et ne se prêtent pas à une écriture analytique. Nous le montrons au début de la partie III.1 avec le cas de la méthode HF. Il est alors nécessaire de définir une méthode de calcul des données théoriques qui soit une fonction analytique des paramètres de l'interaction. De plus, cette méthode doit simuler le mieux possible les méthodes itératives initiales telle que la méthode HF par exemple. La solution existe avec la méthode HF restreint (HFR).

I.1 Les approches HF et HFR

Si on prend les nucléons comme degrés de liberté élémentaires, le noyau peut être considéré comme un système de A nucléons en interaction. En tenant compte seulement des interactions à deux corps, l'Hamiltonien de ce système s'écrit :

$$H = \sum_{\alpha,\beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(a)} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma}, \quad (\text{I.2})$$

où

- c_{α}^{\dagger} , c_{α} sont les opérateurs de création et de destruction d'une particule dans l'état de base $|\varphi_{\alpha}\rangle$,
- $t_{\alpha\beta}$ est l'élément de matrice de l'opérateur énergie cinétique t entre les états $|\varphi_{\alpha}\rangle$ et $|\varphi_{\beta}\rangle$: $t_{\alpha\beta} = \langle \varphi_{\alpha} | t | \varphi_{\beta} \rangle$,
- $V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(a)}$ est l'élément de matrice antisymétrisé de l'interaction V_{12} :

$$V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(a)} = \langle \varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} | V_{12} | \varphi_{\gamma} \varphi_{\delta} \rangle - \langle \varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} | V_{12} | \varphi_{\delta} \varphi_{\gamma} \rangle.$$

Si on appelle $|\Psi\rangle$ la fonction d'onde du système de A nucléons et E l'énergie correspondante, l'équation de Schrödinger s'écrit $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$. Cette équation est équivalente à l'équation variationnelle $\delta E[\Psi] = 0$ avec $E[\Psi] = \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$. Pour résoudre cette équation, la méthode HF propose d'approximer la fonction d'onde $|\Psi\rangle$ par un déterminant de Slater $|\Phi\rangle$. Ce déterminant de Slater s'écrit comme le produit antisymétrisé de A fonctions d'onde individuelles $|\varphi_a^{HF}\rangle$, $a = 1, \dots, A$, qui sont les nouvelles inconnues du problème. A l'approximation HF, l'équation variationnelle précédente prend donc la forme $\delta E^{HF}[\Phi] = 0$ avec $E^{HF}[\Phi] = \langle \Phi | H | \Phi \rangle$ et $\langle \Phi | \Phi \rangle = 1$. Ainsi, la méthode HF consiste à minimiser la fonctionnelle de l'énergie $E^{HF}[\Phi]$ dans l'espace des déterminants de Slater. La procédure de minimisation permet de déterminer les fonctions d'onde individuelles $|\varphi_a^{HF}\rangle$, $a = 1, \dots, A$, qui constituent le déterminant de Slater. En pratique ces fonctions d'onde $|\varphi_a^{HF}\rangle$, $a = 1, \dots, A$, sont développées sur une base de fonctions connues. On peut choisir, par exemple, la base des fonctions propres de l'OH de fréquence $\hbar\omega$, $|\Phi_{\alpha}^{OH}(\hbar\omega)\rangle$, où α est un indice entier qui repère les nombres quantiques de l'OH. Le développement

des fonctions d'onde $|\varphi_a^{HF}\rangle$, $a = 1, \dots, A$, sur cette base s'écrit alors :

$$|\varphi_a^{HF}\rangle = \sum_{\alpha=1}^{+\infty} U_{a\alpha}(\hbar\omega) |\Phi_\alpha^{OH}(\hbar\omega)\rangle, \quad a = 1, \dots, A. \quad (\text{I.3})$$

Déterminer les fonctions d'onde individuelles $|\varphi_a^{HF}\rangle_{a=1, \dots, A}$ revient alors à déterminer les coefficients du développement $U_{a\alpha}(\hbar\omega)$.

Un développement avec un nombre infini de termes tel que celui de l'équation (I.3) n'est pas traitable numériquement et doit donc être tronqué à un ordre n fini :

$$|\varphi_a^{HF}(\hbar\omega)\rangle = \sum_{\alpha=1}^n U_{a\alpha}(\hbar\omega) |\Phi_\alpha^{OH}(\hbar\omega)\rangle, \quad a = 1, \dots, A. \quad (\text{I.4})$$

Les fonctions d'onde individuelles $|\varphi_a^{HF}\rangle_{a=1, \dots, A}$ ne sont alors plus développées sur une base complète. Par conséquent, elles deviennent dépendantes de la fréquence $\hbar\omega$ de l'OH, d'où la nouvelle notation $|\varphi_a^{HF}(\hbar\omega)\rangle_{a=1, \dots, A}$ dans l'équation (I.4). Le choix de la fréquence $\hbar\omega$ de l'OH devient maintenant crucial puisque le résultat du calcul HF en dépend.

La méthode HF est basée sur la minimisation de la fonctionnelle de l'énergie $E^{HF}[\Phi] = \langle \Phi | H | \Phi \rangle$. Le choix le plus naturel est donc d'utiliser la fréquence $\hbar\omega$ pour laquelle l'énergie est minimale. C'est ainsi que la valeur de $\hbar\omega$ est déterminée dans les codes HF de Bruyères-le-Châtel.

La résolution des équations HF est basée sur la donnée du Hamiltonien H de l'équation (I.2) dans lequel intervient l'interaction effective V_{12} . Les coefficients $U_{a\alpha}(\hbar\omega)$, solutions des équations HF, vont donc dépendre de cette interaction effective, on les notera dorénavant $U_{a\alpha}(\hbar\omega, \{V_{12}\})$. Cette dépendance est non-analytique à cause de la nature itérative de la méthode de résolution des équations HF. Dans cette étude, nous utilisons l'interaction effective de Gogny V_{12}^{Gogny} dont la forme a été rappelée en début de chapitre avec l'équation (I.1). Elle est caractérisée par un ensemble de 14 paramètres que nous avons déjà noté $\{V_{12}^{Gogny}\} = \{W_1, B_1, H_1, \dots\}$. La dépendance non-analytique des coefficients

$U_{a\alpha}$ dans les paramètres de l'interaction sera donc notée $U_{a\alpha}(\hbar\omega, \{V_{12}^{Gogny}\})$.

Développons maintenant l'expression de l'énergie HF :

$$\begin{aligned} E^{HF} &= \langle \Phi | H | \Phi \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \beta} t_{\alpha\beta} \langle \Phi | c_\alpha^+ c_\beta | \Phi \rangle + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(a)} \langle \Phi | c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\delta c_\gamma | \Phi \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \beta} t_{\alpha\beta} \rho_{\beta\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(a)} \rho_{\gamma\alpha} \rho_{\delta\beta}, \end{aligned} \quad (\text{I.5})$$

où l'on a défini la matrice densité à un corps $\rho_{\alpha\beta} = \langle \Phi | c_\beta^+ c_\alpha | \Phi \rangle$.

N.B. : Nous avons utilisé le théorème de Wick pour exprimer la quantité $\langle \Phi | c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\delta c_\gamma | \Phi \rangle$ en fonction de la matrice densité à un corps ρ .

Cette matrice densité peut être développée sur les coefficients $U_{a\alpha}$ comme suit :

$$\rho_{\alpha\beta} = \sum_{a=1}^A U_{\beta a}^* \left(\hbar\omega, \{V_{12}^{Gogny}\} \right) U_{a\alpha} \left(\hbar\omega, \{V_{12}^{Gogny}\} \right). \quad (\text{I.6})$$

L'expression (I.5) de l'énergie HF fait donc intervenir deux types de dépendance dans les paramètres de l'interaction $\left\{V_{12}^{Gogny}\right\}$:

- une dépendance analytique portée par l'élément de matrice antisymétrisé $V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(a)}$:

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(a)} &= \langle \varphi_\alpha \varphi_\beta | V_{12} | \varphi_\gamma \varphi_\delta \rangle - \langle \varphi_\alpha \varphi_\beta | V_{12} | \varphi_\delta \varphi_\gamma \rangle \\ &= f_{\alpha\beta\gamma\delta} \left(\left\{ V_{12}^{Gogny} \right\} \right) \end{aligned}$$

où $f_{\alpha\beta\gamma\delta}$ est une fonction analytique des paramètres de l'interaction,

- une dépendance non-analytique portée par les coefficients $U_{a\alpha} \left(\hbar\omega, \left\{ V_{12}^{Gogny} \right\} \right)$ qui interviennent dans la matrice densité à un corps ρ (équation (I.6)).

Le seul moyen d'écrire les observables physiques telle que l'énergie HF comme des fonctions analytiques des paramètres de l'interaction $\left\{V_{12}^{Gogny}\right\}$ est de se débarrasser de la dépendance non-analytique introduite par les coefficients $U_{a\alpha} \left(\hbar\omega, \left\{ V_{12}^{Gogny} \right\} \right)$. C'est ici qu'intervient la méthode HF restreint (HFR).

La méthode HFR réduit les coefficients $U_{a\alpha}$ à des symboles de Kronecker $\delta_{a\alpha}$:

$$U_{a\alpha} = \delta_{a\alpha} = \begin{cases} 1 & \text{si } a = \alpha \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{I.7})$$

Les coefficients $U_{a\alpha}$ ne dépendent donc plus des paramètres de l'interaction $\left\{V_{12}^{Gogny}\right\}$. La dépendance dans la fréquence de l'OH $\hbar\omega$ est également supprimée.

Avec la relation (I.7), le développement (I.4) se réduit à $|\varphi_a^{HF}(\hbar\omega)\rangle = |\varphi_a^{OH}(\hbar\omega)\rangle$, $a = 1, \dots, A$. Autrement dit, les fonctions d'onde individuelles HF $|\varphi_a^{HF}(\hbar\omega)\rangle$ ne sont autres que les fonctions propres de l'OH $|\varphi_a^{OH}(\hbar\omega)\rangle$.

La forme (I.6) de la matrice densité à un corps devient très simple :

$$\rho_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\alpha} \text{ avec } \rho_{\alpha\alpha} = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha \leq A \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Avec la méthode HFR, la matrice densité à un corps est diagonale dans la base des fonctions propres de l'OH. La valeur des éléments diagonaux $\rho_{\alpha\alpha}$ représente le taux d'occupation, 0 ou 1, de chaque état propre de l'OH.

L'expression (I.5) de l'énergie peut alors s'écrire comme une fonction analytique F des paramètres de l'interaction :

$$\begin{aligned} E^{HFR} &= \sum_{\alpha} t_{\alpha\alpha} \rho_{\alpha\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta\alpha\beta}^{(a)} \rho_{\alpha\alpha} \rho_{\beta\beta} \\ &= \sum_{\alpha} t_{\alpha\alpha} \rho_{\alpha\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha\beta\alpha\beta} \left(\left\{ V_{12}^{Gogny} \right\} \right) \rho_{\alpha\alpha} \rho_{\beta\beta} \\ &= F \left(\left\{ V_{12}^{Gogny} \right\} \right). \end{aligned} \quad (\text{I.8})$$

Il devient alors possible d'inverser cette relation pour exprimer les paramètres de l'interaction en fonction de l'énergie HFR, ce qui s'écrit symboliquement

$$\left\{ V_{12}^{Gogny} \right\} = F^{-1} (E^{HFR}).$$

Cet exemple illustre l'étape [3] de la Fig. I.2 : en inversant les méthodes de calcul (F^{-1}), on peut déterminer les paramètres de l'interaction ($\left\{ V_{12}^{Gogny} \right\}$) à partir de données théoriques (E^{HFR}).

Pour réaliser des calculs avec la méthode HF, on choisissait la fréquence de l'OH, $\hbar\omega$, qui rendait l'énergie minimale. Cette prescription est maintenue dans le cas de la méthode HFR, elle impose l'équation :

$$\frac{dE^{HFR}}{d(\hbar\omega)} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{dE^{HFR}}{db} = 0$$

avec $b = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}$ le paramètre d'oscillateur et M la masse du nucléon.

Pour expliciter complètement la procédure schématisée sur la Fig. I.2, il ne reste plus qu'à choisir les données expérimentales et théoriques (étapes [1] et [2]) destinées à contraindre les paramètres de l'interaction $\left\{ V_{12}^{Gogny} \right\}$. Les quatre premières données que l'on se propose d'étudier sont l'énergie et le rayon de charge de deux noyaux, l' ^{16}O et le ^{90}Zr .

I.2 Ajustement des propriétés globales

L'expression (I.8) de l'énergie HFR, E^{HFR} , se compose d'une énergie cinétique T et d'une énergie potentielle V , $E^{HFR} = T + V$, de la forme :

$$\begin{aligned} T &= \sum_{\alpha} t_{\alpha\alpha} \rho_{\alpha\alpha} \\ V &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha\beta\alpha\beta}^{(a)} \rho_{\alpha\alpha} \rho_{\beta\beta}. \end{aligned}$$

L'énergie cinétique T peut être évaluée avec le théorème du Viriel [18]. Dans le cas de l' ^{16}O , elle vaut :

$$T [^{16}\text{O}] = \frac{9}{8} \frac{\hbar^2}{M b_O^2},$$

avec b_O le paramètre d'oscillateur choisi pour l' ^{16}O et M la masse du nucléon.

L'énergie potentielle V contient les contributions de chaque terme de l'interaction de Gogny : $V = V_{\mu} + V_0$. V_{μ} représente la contribution du terme central de portée finie de l'interaction, V_0 correspond à celle du terme densité de portée nulle et l'on a négligé la

contribution du terme spin-orbite.

Pour l' ^{16}O , ces contributions s'écrivent :

$$\begin{aligned} V_\mu [^{16}\text{O}] &= \sum_{i=1,2} F_i^D [^{16}\text{O}] (b_O) (4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i) \quad \text{Terme Direct} \\ &+ \sum_{i=1,2} F_i^E [^{16}\text{O}] (b_O) (4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i) \quad \text{Terme Echange} \\ V_0 [^{16}\text{O}] &= G [^{16}\text{O}] (t_0, x_0, \alpha, b_O). \end{aligned}$$

Les fonctions $F_{i=1,2}^D [^{16}\text{O}]$, $F_{i=1,2}^E [^{16}\text{O}]$ et $G [^{16}\text{O}]$ sont définies par les expressions (B.20), (B.21) et (B.22) de l'Annexe B.

Finalement, dans le cas de ^{16}O , l'expression (I.8) de l'énergie HFR prend la forme :

$$\begin{aligned} E^{HFR} [^{16}\text{O}] &= T [^{16}\text{O}] + V [^{16}\text{O}] \\ &= T [^{16}\text{O}] + V_\mu [^{16}\text{O}] + V_0 [^{16}\text{O}] \\ &= \frac{9 \hbar^2}{8 M b_O^2} \\ &+ \sum_{i=1,2} F_i^D [^{16}\text{O}] (b_O) (4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i) \\ &+ \sum_{i=1,2} F_i^E [^{16}\text{O}] (b_O) (4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i) \\ &+ G [^{16}\text{O}] (t_0, x_0, \alpha, b_O). \end{aligned}$$

La valeur du paramètre d'oscillateur b doit correspondre au minimum de l'énergie, ce qui impose la condition : $\frac{dE^{HFR}}{db} = 0$, que l'on écrira aussi $E'^{HFR} = 0$ avec la notation $f' \equiv \frac{df}{db}$. Appliquée au cas de ^{16}O , cette condition prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} E'^{HFR} [^{16}\text{O}] &= -\frac{9 \hbar^2}{4 M b_O^3} \\ &+ \sum_{i=1,2} F_i'^D [^{16}\text{O}] (b_O) (4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i) \\ &+ \sum_{i=1,2} F_i'^E [^{16}\text{O}] (b_O) (4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i) \\ &+ G' [^{16}\text{O}] (t_0, x_0, \alpha, b_O) \\ &= 0. \end{aligned}$$

L'étude du noyau de ^{90}Zr fait intervenir le même type d'équations :

$$\begin{aligned} E^{HFR} [^{90}\text{Zr}] &= \frac{71 \hbar^2}{36 M b_{Zr}^2} \\ &+ \sum_{i=1,2} F_i^D [^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) (4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i) \\ &+ \sum_{i=1,2} F_i^E [^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) (4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i) \\ &+ G [^{90}\text{Zr}] (t_0, x_0, \alpha, b_{Zr}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E'^{HFR} [{}^{90}\text{Zr}] &= -\frac{71}{18} \frac{\hbar^2}{Mb_{Zr}^3} \\
 &+ \sum_{i=1,2} F_i'^D [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) (4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i) \\
 &+ \sum_{i=1,2} F_i'^E [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) (4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i) \\
 &+ G' [{}^{90}\text{Zr}] (t_0, x_0, \alpha, b_{Zr}) \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Ces quatre équations peuvent être formulées sous la forme matricielle $Ax = f$, où A est une matrice 4-4 et x et f sont des vecteurs colonnes.

$$A = \begin{bmatrix} F_1^D [{}^{16}\text{O}] (b_O) & F_2^D [{}^{16}\text{O}] (b_O) & F_1^E [{}^{16}\text{O}] (b_O) & F_2^E [{}^{16}\text{O}] (b_O) \\ F_1'^D [{}^{16}\text{O}] (b_O) & F_2'^D [{}^{16}\text{O}] (b_O) & F_1'^E [{}^{16}\text{O}] (b_O) & F_2'^E [{}^{16}\text{O}] (b_O) \\ F_1^D [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) & F_2^D [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) & F_1^E [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) & F_2^E [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) \\ F_1'^D [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) & F_2'^D [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) & F_1'^E [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) & F_2'^E [{}^{90}\text{Zr}] (b_{Zr}) \end{bmatrix}$$

$$x = \begin{bmatrix} 4W_1 + 2B_1 - 2H_1 - M_1 \\ 4W_2 + 2B_2 - 2H_2 - M_2 \\ 4M_1 + 2H_1 - 2B_1 - W_1 \\ 4M_2 + 2H_2 - 2B_2 - W_2 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad f = \begin{bmatrix} E^{HFR} [{}^{16}\text{O}] - \frac{9}{8} \frac{\hbar^2}{Mb_O^2} - G [{}^{16}\text{O}] (t_0, x_0, \alpha, b_O) \\ \frac{9}{4} \frac{\hbar^2}{Mb_O^3} - G' [{}^{16}\text{O}] (t_0, x_0, \alpha, b_O) \\ E^{HFR} [{}^{90}\text{Zr}] - \frac{71}{36} \frac{\hbar^2}{Mb_{Zr}^2} - G [{}^{90}\text{Zr}] (t_0, x_0, \alpha, b_{Zr}) \\ \frac{71}{18} \frac{\hbar^2}{Mb_{Zr}^3} - G' [{}^{90}\text{Zr}] (t_0, x_0, \alpha, b_{Zr}) \end{bmatrix}$$

Les composantes du vecteur x correspondent à 4 combinaisons linéaires des paramètres de l'interaction que l'on peut déterminer par inversion de la matrice $A : x = A^{-1}f$. Cette étude de l' ${}^{16}\text{O}$ et du ${}^{90}\text{Zr}$ à l'approximation HFR n'est autre qu'un exemple d'application de la procédure présentée sur la Fig. I.2. Les *données théoriques* (étape [2]) sont ici représentées par les paramètres d'oscillateur b_O et b_{Zr} , ainsi que par les énergies $E^{HFR} [{}^{16}\text{O}]$ et $E^{HFR} [{}^{90}\text{Zr}]$ de l' ${}^{16}\text{O}$ et du ${}^{90}\text{Zr}$. L'étape [3] associée à l'*inversion des méthodes de calcul* revient ici à inverser la matrice A . L'*ensemble des paramètres de l'interaction* déduit, à l'étape [4], de l'*inversion des méthodes de calcul* correspond ici aux composantes du vecteur x . La Fig. I.2 qui schématisait la procédure de détermination des paramètres de l'interaction prend donc ici la forme particulière de la Fig. I.3.

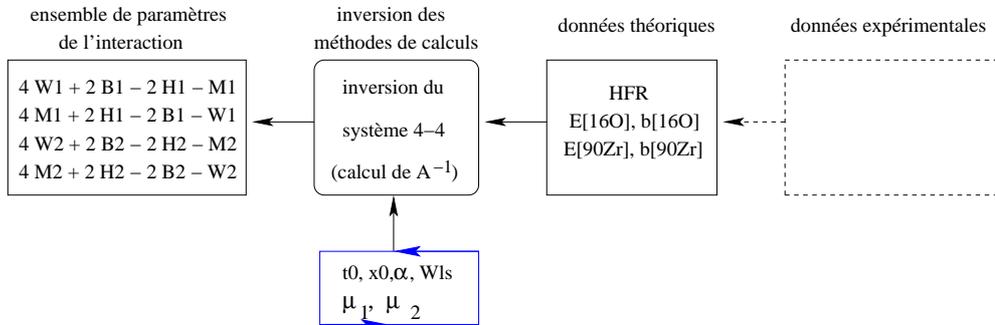


FIG. I.3 – Procédure de détermination de 4 combinaisons linéaires des paramètres de l'interaction à partir d'un ensemble de données théoriques de type HFR.

L'inversion du système 4-4 permet de contraindre les valeurs des 4 combinaisons suivantes de paramètres $(4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i)_{i=1,2}$ et $(4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i)_{i=1,2}$. Elle ne donne cependant aucune information sur les valeurs des autres paramètres de l'interaction, t_0 , x_0 , α , μ_1 et μ_2 . Ces 5 paramètres doivent par ailleurs être connus puisqu'ils interviennent dans la construction de la matrice A et du vecteur f . La solution consiste donc à affecter des valeurs pré-déterminées à ces 5 paramètres. Ces valeurs ne sont pas figées, mais décrivent des intervalles entre une valeur initiale (I) et finale (F) : $t_0 \in [t_0^I; t_0^F]$, $\mu_1 \in [\mu_1^I; \mu_1^F]$, Cette "boucle" sur les valeurs des paramètres t_0 , x_0 , α , μ_1 et μ_2 est représentée par le rectangle bleu sur la Fig. I.3.

Le schéma de la Fig. I.3 n'est cependant pas complet. Nous n'avons pas précisé les *données expérimentales* nécessaires pour contraindre les *données théoriques* de type HFR. Le problème est que, pour le paramètre d'oscillateur b , il n'existe pas d'équivalent expérimental : on ne "mesure" pas un paramètre d'oscillateur. La solution à ce problème passe par le rayon de charge. A l'approximation HFR, le théorème du Viriel [18] permet de relier le rayon de charge d'un noyau au paramètre d'oscillateur :

$$R_c^{HFR} [^{16}O] = \frac{\sqrt{15}}{2} b_O \quad \text{pour } ^{16}O, \quad (I.9)$$

$$R_c^{HFR} [^{90}Zr] = \frac{\sqrt{25}}{2} b_{Zr} \quad \text{pour le } ^{90}Zr. \quad (I.10)$$

Ainsi, à l'approximation HFR, connaître le paramètre d'oscillateur b d'un noyau revient à connaître son rayon de charge R_c . Or les rayons de charge sont accessibles par l'expérience et ont été mesurés dans de nombreux noyaux [19]. On propose donc de contraindre les rayons de charge théoriques à l'approximation HFR, R_c^{HFR} , par les rayons de charge expérimentaux, R_c^{exp} , ce qui s'écrit $R_c^{HFR} = R_c^{exp}$. De la valeur du rayon de charge HFR (R_c^{HFR}) ainsi déterminée, on déduit le paramètre d'oscillateur b avec les équations (I.9) et (I.10).

L'énergie HFR qui est la deuxième donnée théorique se déduit directement de l'énergie de liaison expérimentale $E^{HFR} = E^{exp}$. Les valeurs expérimentales des énergies de liaison que nous utilisons sont tirées de la Ref. [20].

Ces contraintes des rayons de charge expérimentaux R_c^{exp} et des énergies de liaison expérimentales E^{exp} sur les paramètres d'oscillateur b et les énergies de liaison théoriques E^{HFR} à l'approximation HFR sont schématisées sur la Fig. I.4.

Cette procédure de contraintes n'est pas tout à fait celle que nous allons appliquer. En effet, il n'est pas adapté de déterminer les données de type HFR directement à partir des données expérimentales comme cela est fait sur la Fig. I.4. Pour décrire correctement les noyaux magiques comme ^{16}O ou le ^{90}Zr , il convient d'utiliser la méthode HF "complète". La version "restreinte" de cette méthode (HFR) ne permet pas une description suffisamment précise de ces noyaux pour être comparée à l'expérience. Ce sont donc plutôt les données théoriques de type HF que nous allons déduire des données expérimentales : $R_c^{HF} = R_c^{exp}$ et $E^{HF} = E^{exp}$. Cette nouvelle procédure est présentée sur la Fig. I.5. Pour remonter aux paramètres de l'interaction, il faut que les données théoriques puissent être écrites comme des fonctions analytiques de ces paramètres. L'approximation HF ne permet pas une telle écriture analytique, il faut alors revenir à l'approximation HFR. En

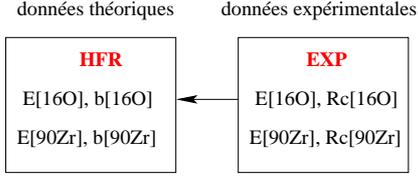


FIG. I.4 – Schéma de contraintes des données expérimentales sur les données théoriques de type HFR.

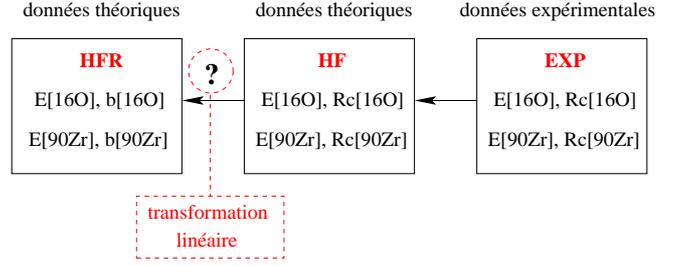


FIG. I.5 – Schéma de contraintes des données expérimentales sur les données théoriques de type HF. Les données théoriques de type HFR sont ensuite déduites par transformation linéaire.

d'autres termes, il faut être capable de contraindre les données théoriques (paramètres d'oscillateur ou rayons de charge et énergies de liaison) de type HFR par les données théoriques de type HF. Cette contrainte, encore inconnue, est symbolisée sur la Fig. I.5 par une flèche surmontée d'un point d'interrogation (?). Pour lever cette inconnue, il faut établir le lien qui existe entre les données HF et HFR. Nous allons montrer que ce lien correspond à une *transformation linéaire*.

On commence par étudier le lien entre les rayons de charge HF et HFR dans l' ^{16}O et le ^{90}Zr . Pour cela on génère 9 interactions, c'est à dire 9 ensembles de paramètres $\{V_{12}^{Gogny}\}_1, \{V_{12}^{Gogny}\}_2, \dots, \{V_{12}^{Gogny}\}_9$, avec la notation habituelle $\{V_{12}^{Gogny}\} = \{W_1, B_1, H_1, M_1, \mu_1, W_2, B_2, H_2, M_2, \mu_2, t_0, x_0, \alpha, W_{ls}\}$. On calcule pour chaque interaction i , i allant de 1 à 9, le rayon de charge de l' ^{16}O à l'approximation HF ($R_{c,i}^{HF} [^{16}\text{O}]$) et à l'approximation HFR ($R_{c,i}^{HFR} [^{16}\text{O}]$). On définit ainsi 9 points de coordonnées ($R_{c,i}^{HF} [^{16}\text{O}], R_{c,i}^{HFR} [^{16}\text{O}]$), avec $i = 1, \dots, 9$, tracés sur la Fig. I.6(a). La même étude est faite pour les rayons de charge HF et HFR du ^{90}Zr , la Fig. I.6(b) rassemble les points de coordonnées ($R_{c,i}^{HF} [^{90}\text{Zr}], R_{c,i}^{HFR} [^{90}\text{Zr}]$), $i = 1, \dots, 9$. On constate que, pour l' ^{16}O comme pour le ^{90}Zr , la relation entre les rayons de charge HF et HFR est presque linéaire :

$$R_c^{HFR} [^{16}\text{O}] \simeq 0.878 R_c^{HF} [^{16}\text{O}] + 0.306 \text{ fm} \quad (\text{I.11})$$

$$R_c^{HFR} [^{90}\text{Zr}] \simeq 1.175 R_c^{HF} [^{90}\text{Zr}] - 0.766 \text{ fm} \quad (\text{I.12})$$

Les relations (I.11) et (I.12) permettent, une fois connu le rayon de charge HF, d'en déduire le rayon de charge HFR. C'est exactement l'opération que l'on souhaitait réaliser et que l'on avait représentée sur la Fig. I.5 par la flèche surmontée du point d'interrogation (?). Le point d'interrogation n'a plus lieu d'être puisqu'on sait maintenant que l'on peut passer des rayons de charge HF aux rayons de charge HFR par *transformation linéaire* (équations (I.11) et (I.12)).

En ce qui concerne les rayons de charge, on peut résumer la procédure de la Fig. I.5 par le Tab. I.1. La donnée de départ est le rayon de charge expérimental R_c^{exp} égal à 2.7013 fm pour l' ^{16}O et 4.2696 fm pour le ^{90}Zr . Ces valeurs sont représentées par les traits pointillés verts sur les Fig. I.6(a) et I.6(b).

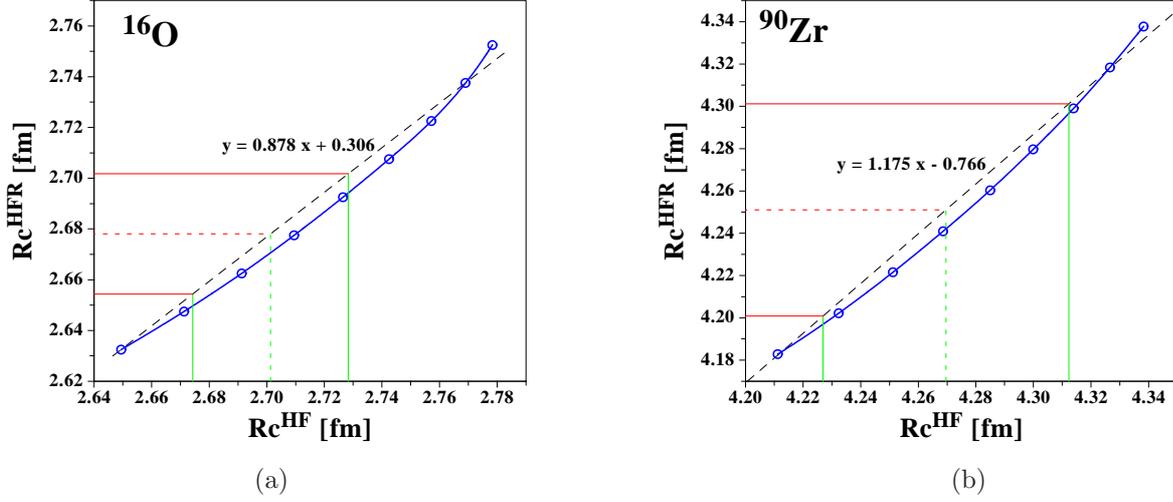


FIG. I.6 – Relation entre les rayons de charge calculés, avec 9 ensembles de paramètres de l'interaction de Gogny, à l'approximation HF (R_c^{HF}) et HFR (R_c^{HFR}).

	^{16}O	^{90}Zr
R_c^{exp} [fm]	2.7013	4.2696
R_c^{HF} [fm]	2.6743 \rightarrow 2.7283	4.2269 \rightarrow 4.3123
R_c^{HFR} [fm]	2.6543 \rightarrow 2.7018	4.2008 \rightarrow 4.3012
b^{HFR} [fm]	1.7695 \rightarrow 1.8012	2.1693 \rightarrow 2.2211

TAB. I.1 – Limites sur les rayons de charge à l'approximation HF (R_c^{HF}) déterminées de façon à reproduire, avec une précision de 1%, la valeur expérimentale (R_c^{exp}). A l'approximation HFR, les limites sur les rayons de charge (R_c^{HFR}) et les paramètres d'oscillateur (b^{HFR}) sont déduites des précédentes par transformation linéaire.

Si l'on demande que le rayon de charge HF corresponde à la valeur expérimentale avec une précision de 1%, cela impose les limites suivantes :

$$R_c^{HF} [^{16}\text{O}] \in [2.6743; 2.7283] \text{ et } R_c^{HF} [^{90}\text{Zr}] \in [4.2269; 4.3123] \text{ en fm.}$$

Ces limites sont reprises dans le Tab. I.1 et sont indiquées par les traits continus verts sur les Fig. I.6(a) et I.6(b). Les transformations linéaires (I.11) et (I.12) permettent finalement de déterminer les limites sur les rayons de charge HFR à partir de celles imposées sur les rayons de charge HF. On trouve les limites suivantes :

$$R_c^{HFR} [^{16}\text{O}] \in [2.6543; 2.7018] \text{ et } R_c^{HFR} [^{90}\text{Zr}] \in [4.2008; 4.3012] \text{ en fm,}$$

aussi représentées par les traits continus rouges sur les Fig. I.6(a) et I.6(b). Les limites sur les paramètres d'oscillateur de ^{16}O et du ^{90}Zr s'obtiennent en inversant les relations (I.9) et (I.10). Indiquées dans le Tab. I.1, elles valent :

$$b_{\text{O}} \in [1.7695; 1.8012] \text{ et } b_{\text{Zr}} \in [2.1693; 2.2211] \text{ en fm.}$$

Il est donc possible d'imposer des limites aux valeurs des paramètres d'oscillateur b_O et b_{Zr} à partir des rayons de charge expérimentaux de l' ^{16}O et du ^{90}Zr . Cette étude des rayons de charge permet d'illustrer la procédure schématisée sur la Fig. I.5. Cette procédure concerne également les énergies de liaison.

Les 9 interactions introduites pour établir le lien entre les rayons de charge HF et HFR sont reprises ici pour étudier la relation entre les énergies HF et HFR. Les Fig. I.7(a) et I.7(b) montrent que les énergies HF et HFR se déduisent l'une de l'autre par une transformation pratiquement linéaire :

$$E^{HFR} [^{16}\text{O}] \simeq E^{HF} [^{16}\text{O}] , \quad (\text{I.13})$$

$$E^{HFR} [^{90}\text{Zr}] \simeq 0.89 E^{HF} [^{90}\text{Zr}] - 162 \text{ MeV}. \quad (\text{I.14})$$

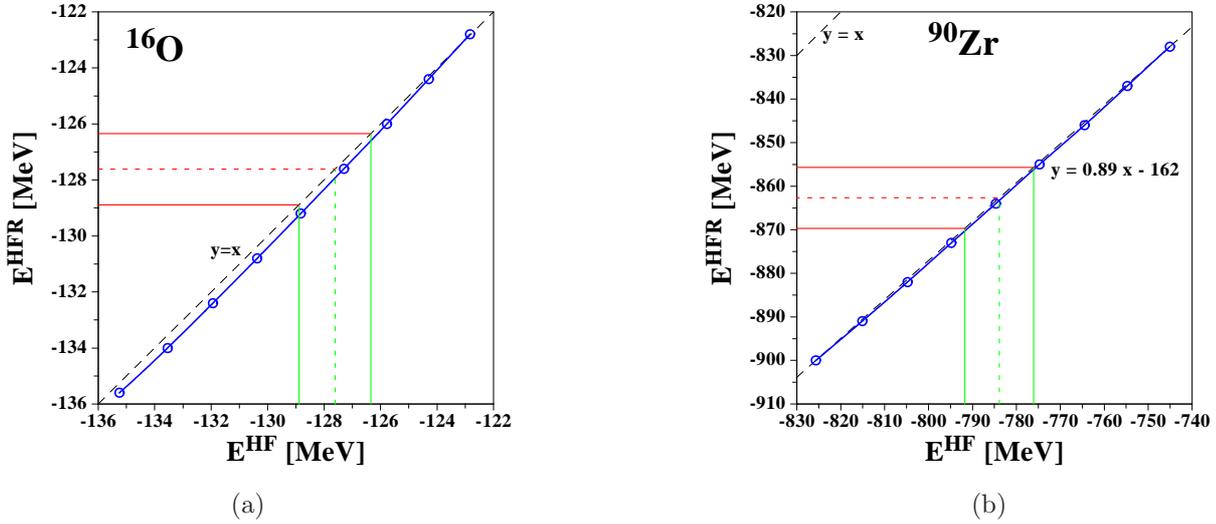


FIG. I.7 – Relation entre les énergies calculées, avec 9 ensembles de paramètres de l'interaction de Gogny, à l'approximation HF (E^{HF}) et HFR (E^{HFR}).

La procédure de la Fig. I.5 se commente donc ainsi pour les énergies de liaison. A partir des énergies de liaison expérimentales de l' ^{16}O et du ^{90}Zr , on contraint les énergies de liaison HF. Par exemple, on impose que les énergies de liaison HF reproduisent à 1% près les valeurs expérimentales. L'énergie de liaison expérimentale de l' ^{16}O étant de -127.616 MeV et celle du ^{90}Zr de -783.891 MeV, on trouve les limites suivantes pour les énergies de liaison HF :

$$E^{HF} [^{16}\text{O}] \in [-128.892; -126.340] \text{ et } E^{HF} [^{90}\text{Zr}] \in [-791.730; -776.052] \text{ en MeV}.$$

Ces limites sont représentées par les traits continus verts sur les Fig. I.7(a) et I.7(b). Les transformations linéaires (I.13) et (I.14) permettent alors de remonter aux limites sur les énergies HFR :

$$E^{HFR} [^{16}\text{O}] \in [-128.892; -126.340] \text{ et } E^{HFR} [^{90}\text{Zr}] \in [-868.509; 854.511] \text{ en MeV}.$$

Ces valeurs limites correspondent aux traits continus rouges sur les Fig. I.7(a) et I.7(b).

Ces données sur les énergies de liaison expérimentales et théoriques (HF et HFR) sont reprises dans le Tab. I.2.

	^{16}O	^{90}Zr
E^{exp} [MeV]	-127.616	-783.891
E^{HF} [MeV]	-128.892 \rightarrow -126.340	-791.730 \rightarrow -776.052
E^{HFR} [MeV]	-128.892 \rightarrow -126.340	-868.509 \rightarrow -854.511

TAB. I.2 – Limites sur les énergies à l’approximation HF (E^{HF}) déterminées de façon à reproduire, avec une précision de 1%, la valeur expérimentale (E^{exp}). A l’approximation HFR, les limites sur les énergies (E^{HFR}) sont déduites des précédentes par transformation linéaire.

Ce Tab. I.2 résume la procédure de la Fig. I.5. Il montre que l’énergie de liaison expérimentale E^{exp} contraint l’énergie de liaison HFR E^{HFR} sur un intervalle bien défini. Maintenant que la procédure présentée sur la Fig. I.5 a été complètement définie, aussi bien pour les rayons de charge que pour les énergies de liaison, on peut la raccorder à la procédure de la Fig. I.3. La procédure finale est schématisée sur la Fig. I.8.

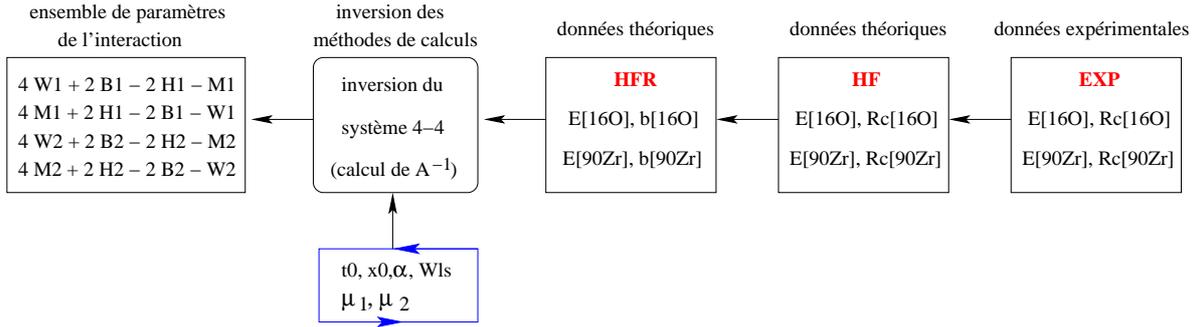


FIG. I.8 – Procédure de détermination de 4 combinaisons linéaires des paramètres de l’interaction à partir d’un ensemble de données expérimentales sur les énergies et les rayons de charge de deux noyaux, l’ ^{16}O et le ^{90}Zr .

Cette dernière version montre le schéma global des contraintes qui permet de déterminer les 4 combinaisons linéaires $(4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i)_{i=1,2}$ et $(4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i)_{i=1,2}$ à partir d’un ensemble de 4 données expérimentales, les énergies et les rayons de charge de l’ ^{16}O et du ^{90}Zr .

A l’issue de cette procédure, 10 des 14 paramètres de l’interaction de Gogny ont été contraints. Les 6 paramètres $t_0, x_0, \alpha, W_{ls}, \mu_1$ et μ_2 ont été affectés de valeurs pré-déterminées qui décrivent des intervalles bornés choisis par l’utilisateur. Quatre combinaisons des paramètres $\{W_1, B_1, H_1, M_1, W_2, B_2, H_2, M_2\}$ sont déduites par inversion d’un système 4-4 construit avec les énergies de liaison et les rayons de charge de l’ ^{16}O et du ^{90}Zr . Il reste donc 4 paramètres à déterminer. Ceux-ci seront également déduits de l’inversion de 4 nouvelles équations. Deux de ces équations sont obtenues en calculant deux éléments de matrice de l’interaction recouplés à un spin total nul ($S=0$) et un isospin total

égal à 1 (T=1). Ces deux éléments de matrice contrôlent les propriétés d'appariement de l'interaction, on les qualifiera d'« éléments de matrice de l'appariement ».

I.3 Ajustement des propriétés d'appariement

Il y a de nombreux faits expérimentaux qui suggèrent l'existence de corrélations d'appariement dans les noyaux. Quelques exemples sont donnés ci-dessous.

1. Le spin (moment angulaire total) de l'état fondamental des noyaux pair-pair est nul. Ceci suggère l'existence d'une force qui couple les nucléons par paires de façon à ce que leur moment angulaire s'annule.
2. Les énergies de liaison par nucléon des noyaux pair-pair sont plus grandes que celles des noyaux pair-impair voisins. Ceci montre que le gain d'énergie de liaison par particule est plus grand quand un nucléon est ajouté à un noyau impair que lorsque un nucléon est ajouté à un noyau pair. Le couplage des nucléons par paires est donc favorable énergétiquement.
3. L'énergie du premier état excité non collectif est beaucoup plus grande (au-delà du MeV) dans les noyaux pair-pair que dans les noyaux impairs. Ce phénomène est lié à l'énergie supplémentaire qu'il faut fournir pour briser les corrélations entre nucléons appariés dans les noyaux pair-pair. La première interprétation de cet effet a été donnée par A. Bohr, B.R. Mottelson et D. Pines[21].
4.

Ces différents points montrent que l'interaction d'appariement joue un rôle central dans la description de la structure nucléaire. En physique théorique, il existe différentes prescriptions pour modéliser cette interaction d'appariement. La plus simple consiste à utiliser une interaction G constante. D'autres prescriptions décrivent l'appariement avec des interactions de contact qui peuvent intégrer une dépendance en densité. Un exemple de ce type est l'interaction proposée par Bertsch et Esbensen [22] de la forme :

$$V_{12}^{app}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V_0 \left[1 - \eta \left(\frac{\rho \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right)}{\rho_0} \right)^\alpha \right] \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2).$$

V_0 , η et α sont des paramètres ajustables et ρ_0 correspond à la densité normale (0.16 fm^{-3}). Ces formes d'interaction sont exclusivement utilisées pour simuler les corrélations d'appariement. Il leur est souvent associé des forces de Skyrme destinées à décrire la partie champ moyen [23].

D. Gogny a choisi de développer une interaction effective capable de décrire, à la fois, le champ d'appariement et le champ moyen. L'interaction d'appariement que nous utilisons est donc simplement l'interaction de Gogny. Elle peut être décomposée en 4 canaux caractérisés par le spin S et l'isospin T de la paire de nucléons en interaction : (S=0, T=0), (S=0, T=1), (S=1, T=0) et (S=1, T=1). L'appariement T=0 est délicat à traiter car il fait intervenir une matrice densité, non plus réelle, mais complexe. Les calculs les plus significatifs incluant ce type d'appariement dans les noyaux finis ont été réalisés

par Goodman [24]. Dans les codes actuels utilisant la force de Gogny, seul l'appariement $T=1$ a été implémenté. L'interaction d'appariement se décompose donc sur les deux seuls canaux ($S=0, T=1$) et ($S=1, T=1$). De plus, lorsque deux nucléons forment une paire, la configuration où leurs spins sont opposés est favorisée. Cette configuration correspond à la composante $S=0$ du spin total de la paire. Pour étudier l'interaction d'appariement, nous allons par conséquent nous limiter au canal singulet-pair ($S=0, T=1$).

La manière la plus exhaustive de caractériser l'interaction dans ce canal est d'explorer l'ensemble de ses éléments de matrice recouplés à $S=0$ et $T=1$. D. Gogny a choisi d'en sélectionner seulement deux : les éléments de matrice dans les états $1s$ et $2s$ de l'oscillateur harmonique, $\langle 1s\ 1s|V_{12}^{Gogny}|1s\ 1s\rangle_{(S=0,T=1)}$ et $\langle 2s\ 2s|V_{12}^{Gogny}|2s\ 2s\rangle_{(S=0,T=1)}$. Dans le canal ($S=0, T=1$), ces éléments de matrice ne font intervenir que la partie centrale de portée finie de l'interaction de Gogny et s'expriment :

$$\langle 1s\ 1s|V_{12}^{Gogny}|1s\ 1s\rangle_{(S=0,T=1)} = \sum_{i=1,2} f_i^{1s} (W_i - B_i - H_i + M_i) = V_{1s}, \quad (\text{I.15})$$

$$\langle 2s\ 2s|V_{12}^{Gogny}|2s\ 2s\rangle_{(S=0,T=1)} = \sum_{i=1,2} f_i^{2s} (W_i - B_i - H_i + M_i) = V_{2s}. \quad (\text{I.16})$$

Les quantités f_i^{1s} et f_i^{2s} pour $i = 1, 2$ sont définies par

$$f_i^{1s} = G_i^{-3/2}$$

$$f_i^{2s} = G_i^{-3/2} \left(\frac{41}{64} - \frac{79}{48}G_i^{-1} + \frac{385}{96}G_i^{-2} - \frac{175}{48}G_i^{-3} + \frac{105}{64}G_i^{-4} \right)$$

avec $G_i = 1 + 2b^2/\mu_i^2$ et b est le paramètre d'oscillateur.

En affectant les valeurs V_{1s} et V_{2s} à ces deux éléments de matrice, on obtient un système de deux équations dont les inconnues sont les deux combinaisons linéaires de paramètres ($W_1 - B_1 - H_1 + M_1$) et ($W_2 - B_2 - H_2 + M_2$). Si l'on applique le schéma de contraintes général de la Fig. I.2 à ce cas particulier, on obtient la procédure présentée sur la Fig. I.9.

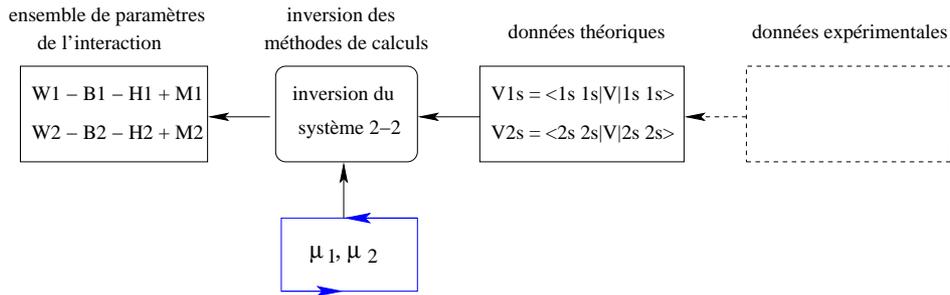


FIG. I.9 – Procédure de détermination de deux combinaisons linéaires des paramètres de l'interaction à partir de deux éléments de matrice de l'interaction (données théoriques).

Les *données théoriques* sont constituées des deux valeurs V_{1s} et V_{2s} des éléments de matrice $\langle 1s\ 1s|V_{12}^{Gogny}|1s\ 1s\rangle_{(S=0,T=1)}$ et $\langle 2s\ 2s|V_{12}^{Gogny}|2s\ 2s\rangle_{(S=0,T=1)}$. Le système d'équations (I.15)-(I.16) peut alors être inversé pour déterminer les valeurs des deux combinaisons linéaires de paramètres de l'interaction.

Les portées μ_1 et μ_2 de l'interaction entrent dans la définition des fonctions $f_{i=1,2}^{1s}$ et $f_{i=1,2}^{2s}$ par l'intermédiaire des fonctions G . Comme dans le cas de la procédure précédente (Fig. I.8), on leur affecte des valeurs pré-déterminées qui peuvent être variées sur des intervalles définis par l'utilisateur. Cette "boucle" sur les valeurs de μ_1 et μ_2 est représentée par le rectangle bleu sur la Fig. I.9.

Pour compléter la procédure, il reste à préciser les *données expérimentales* dont on va déduire les valeurs des éléments de matrice V_{1s} et V_{2s} . Les éléments de matrice de l'interaction nucléaire ne peuvent pas être mesurés expérimentalement. On ne peut donc espérer contraindre les valeurs de V_{1s} et V_{2s} directement à partir de l'expérience. Il faut alors faire appel à d'autres critères comme, par exemple, l'absence d'appariement dans les noyaux magiques (^{16}O , ^{40}Ca , ^{208}Pb , ...).

L'appariement est créé par la diffusion de paires de nucléons vers les états inoccupés au-dessus du niveau de Fermi. Dans les noyaux magiques, l'écart en énergie au niveau de Fermi est suffisamment important pour que cette diffusion ne soit pas active. L'énergie d'appariement doit donc s'annuler dans ces noyaux. Nous étudions ici le cas de ^{16}O . La procédure est la suivante. Nous générons un ensemble de 12 interactions dont les paramètres sont notés, comme précédemment, $\{V_{12}^{\text{Gogny}}\}_{i=1,\dots,12}$. Avec chacune de ces interactions, nous réalisons deux calculs. Le premier est le calcul de l'élément de matrice d'appariement $\langle 1s\ 1s | V_{12}^{\text{Gogny}} | 1s\ 1s \rangle_{(S=0, T=1)}$. Les valeurs calculées avec les 12 interactions décrivent l'intervalle $V_{1s, i=1,\dots,12} \in [-5.3, -4.1]$ MeV. Le deuxième calcul est un calcul Hartree-Fock-Bogoliubov dans ^{16}O . Il permet d'évaluer l'énergie d'appariement $E_{app, i=1,\dots,12}$ obtenue dans ce noyau avec chacune des 12 interactions. Ces deux calculs permettent de définir 12 points de coordonnées $(V_{1s, i}, E_{app, i})_{i=1,\dots,12}$ représentés sur la Fig. I.10.

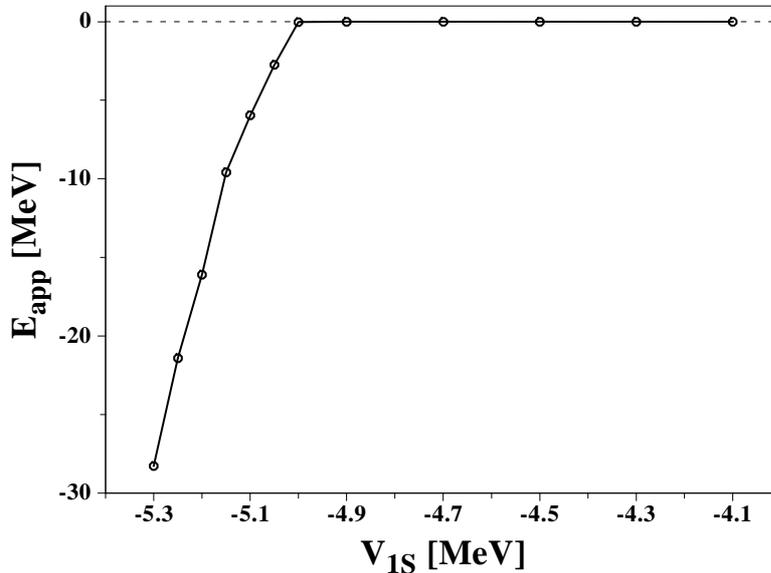


FIG. I.10 – Relation entre l'énergie d'appariement E_{app} dans ^{16}O et la valeur V_{1s} de l'élément de matrice de l'interaction entre les états $1s$. Sur la figure, les 12 points correspondent aux couples $(V_{1s, i}, E_{app, i})_{i=1,\dots,12}$ calculés avec 12 ensembles de paramètres de l'interaction de Gogny.

Les interactions associées à des valeurs de V_{1s} trop négatives, typiquement $V_{1s} \leq -5.0$ MeV, génèrent de l'appariement dans l' ^{16}O . De plus, la transition de phase vers l'état superfluide est très brutale : en augmentant l'attraction de l'élément de matrice V_{1s} de seulement 300 keV (de -5.0 à -5.3 MeV), on gagne 30 MeV d'énergie d'appariement. Si l'on impose que l'énergie d'appariement soit nulle dans les noyaux magiques comme l' ^{16}O , cela limite les valeurs de V_{1s} au domaine $V_{1s} > -5.0$ MeV. Cette discussion dépend de la valeur V_{2s} du second élément de matrice, ici nous avons imposé $V_{2s} = V_{1s} + 2.750$ MeV. Les moments d'inertie des noyaux qui développent des corrélations d'appariement permettent d'affiner notre contrainte sur la valeur de V_{1s} .

Le moment d'inertie \mathfrak{S}_k d'un noyau peut être calculé en résolvant les équations HFB dans un référentiel en rotation autour de l'axe k . Le moment d'inertie ainsi défini contient les contributions de réarrangement dynamiques introduites par Thouless-Valatin [25] et sera noté \mathfrak{S}_k^{TV} . A l'approximation où ces contributions sont négligées, le moment d'inertie se réduit à l'expression standard de Inglis-Belyaev (IB) [26, 27] :

$$\mathfrak{S}_k^{IB} = 2\hbar^2 \sum_{\mu\nu} \frac{|\langle \mu\nu | \hat{I}_k | \Phi \rangle|^2}{(E_\mu + E_\nu)},$$

avec

- Φ : le vide de quasi-particule statique,
- μ, ν : les états de quasi-particule créés sur le vide Φ ,
- E_μ, E_ν : les énergies de quasi-particule associées aux états μ et ν ,
- \hat{I}_k : la composante k de l'opérateur de moment angulaire.

Cette définition conduit à des valeurs trop faibles du moment d'inertie. Il a été montré [28] qu'il fallait la multiplier par 1.33 pour reproduire la valeur du moment d'inertie Thouless-Valatin :

$$\mathfrak{S}_k^{TV} \simeq 1.33 \mathfrak{S}_k^{IB}.$$

Dans cette étude, nous allons travailler avec l'expression Inglis-Belyaev du moment d'inertie \mathfrak{S}_k^{IB} , plus facile à évaluer que l'expression exacte de Thouless-Valatin \mathfrak{S}_k^{TV} . Nous multiplierons ensuite nos résultats par le facteur 1.33 pour reproduire la valeur du moment d'inertie Thouless-Valatin.

Nous nous intéressons ici au noyau de ^{158}Sm qui présente une déformation rigide $\beta = 0.35$. Les corrélations d'appariement qui peuvent se développer dans ce noyau réagissent sur la valeur du moment d'inertie. Si l'appariement est fort, le noyau deviendra superfluide en entraînant une diminution du moment d'inertie. Au contraire, en l'absence d'appariement, le noyau peut être assimilé à un rotor rigide, le moment d'inertie sera alors plus grand. La Fig. I.10 montre que la valeur V_{1s} de l'élément de matrice $\langle 1s \ 1s | V_{12}^{Gogny} | 1s \ 1s \rangle$ a une influence sur l'énergie d'appariement. On s'attend donc à ce qu'elle ait aussi une influence sur les valeurs du moment d'inertie. Pour établir ce lien entre la valeur de V_{1s} et le moment d'inertie du ^{158}Sm , nous pouvons réutiliser les 12 interactions, $\left\{ V_{12}^{Gogny} \right\}_{i=1,\dots,12}$, définies précédemment. Il leur était associé des valeurs $V_{1s,i=1,\dots,12}$ comprises dans l'intervalle $V_{1s,i=1,\dots,12} \in [-5.3, -4.1]$ MeV. Nous calculons, avec chacune de ces interac-

tions i ($i = 1, \dots, 12$), le moment d'inertie $\mathfrak{S}_{k,i}^{IB}$ du ^{158}Sm . Les points de coordonnées $(V_{1s,i}, \mathfrak{S}_{k,i}^{IB})_{i=1,\dots,12}$ sont représentés sur la Fig. I.11.

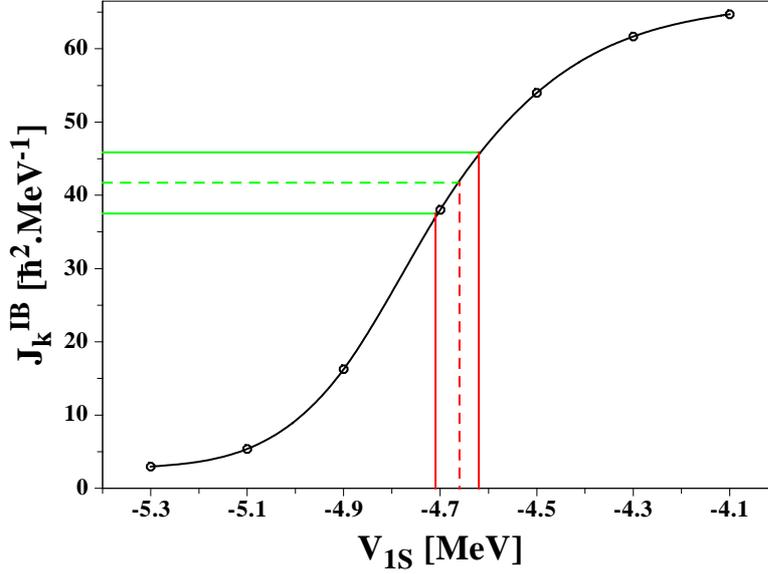


FIG. I.11 – Relation entre le moment d'inertie \mathfrak{S}_k^{IB} dans le ^{158}Sm et la valeur V_{1s} de l'élément de matrice de l'interaction entre les états 1s. Sur la figure, les 12 points correspondent aux couples $(V_{1s,i}, \mathfrak{S}_{k,i}^{IB})_{i=1,\dots,12}$ calculés avec 12 ensembles de paramètres de l'interaction de Gogny.

L'expérience n'a pas directement accès aux valeurs des moments d'inertie. En revanche, on peut mesurer le spectre des états excités de spin I et leurs énergies correspondantes $E_{exp}^*(I)$. Dans le cas du ^{158}Sm , ces énergies sont bien reproduites par la loi en $I(I+1)$:

$$E_{exp}^*(I) \simeq \frac{I(I+1)}{2\mathfrak{S}_{exp}}, \quad (\text{I.17})$$

et ce jusqu'à des valeurs de spin I élevées ($I \leq 10$). Le noyau est alors qualifié de rotationnel, son moment d'inertie \mathfrak{S}_{exp} peut se déduire de l'énergie du premier état 2^+ . Pour le ^{158}Sm , $E_{exp}^*(2^+) = 72$ keV [17], d'où l'on déduit de la formule (I.17) $\mathfrak{S}_{exp} \simeq 41.7\hbar^2 \cdot \text{MeV}^{-1}$. Cette valeur est représentée par le trait pointillé vert sur la Fig. I.11, elle correspond à $V_{1s} = -4.66$ MeV (trait pointillé rouge). Si l'on souhaite reproduire la valeur expérimentale à 10% près, le moment d'inertie doit être compris entre les deux traits continus verts de la Fig. I.11, ce qui impose les limites en traits continus rouges sur les valeurs de V_{1s} : $V_{1s} \in [-4.71, -4.62]$ MeV. Les moments d'inertie déduits des spectres d'énergie expérimentaux permettent donc de préciser la contrainte sur la valeur V_{1s} de l'élément de matrice d'appariement $\langle 1s \ 1s | V_{12}^{Gogny} | 1s \ 1s \rangle_{(S=0, T=1)}$.

Pour expliciter complètement la procédure de la Fig. I.9, il reste à déterminer la valeur V_{2s} du second élément de matrice $\langle 2s \ 2s | V_{12}^{Gogny} | 2s \ 2s \rangle_{(S=0, T=1)}$. Celle-ci peut se déduire de la valeur Δ_{2-1} de la différence $\Delta_{2-1} = V_{2s} - V_{1s}$ si la valeur de V_{1s} est connue. L'étude

des moments d'inertie nous a permis de contraindre la valeur de V_{1s} entre -4.71 et -4.62 MeV. Nous fixons ici sa valeur à -4.65 MeV.

Pour la différence Δ_{2-1} , nous décrivons les énergies comprises entre 2.150 et 3.350 MeV par pas de 200 keV. On définit ainsi un ensemble de 7 valeurs pour Δ_{2-1} :

$$\Delta_{2-1,1} = 2.150, \Delta_{2-1,2} = 2.350, \dots, \Delta_{2-1,7} = 3.350 \text{ MeV},$$

dont on déduit les 7 valeurs de V_{2s} correspondantes sachant que $V_{1s} = -4.65$ MeV. Les 7 couples $(V_{1s,i}, V_{2s,i})_{i=1,\dots,7}$ ainsi obtenus

$$(V_{1s,1}, V_{2s,1}) = (-4.65, -2.50), \dots, (V_{1s,7}, V_{2s,7}) = (-4.65, -1.30) \text{ MeV}, \quad (\text{I.18})$$

conduisent après inversion des équations (I.15) et (I.16) à 7 solutions différentes que l'on note $(W_1 - B_1 - H_1 + M_1)_{i=1,\dots,7}$ et $(W_2 - B_2 - H_2 + M_2)_{i=1,\dots,7}$. Les 7 interactions correspondantes sont alors complètement définies dans le canal singulet-pair (S=0, T=1) :

$$V_{12,i}^{S=0,T=1}(r) = (W_1 - B_1 - H_1 + M_1)_i e^{-r^2/\mu_1^2} + (W_2 - B_2 - H_2 + M_2)_i e^{-r^2/\mu_2^2},$$

où r représente la distance inter-nucléons et on a imposé les portées $\mu_1 = 0.7$ fm et $\mu_2 = 1.2$ fm. Leurs formes spatiales sont représentées sur la Fig. I.12, les valeurs de Δ_{2-1} correspondantes sont indiquées.

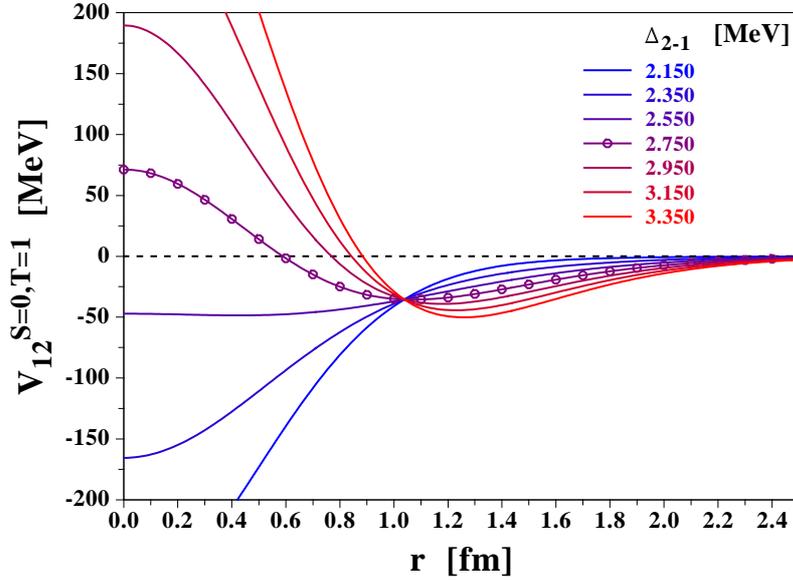


FIG. I.12 – Forme spatiale de l'interaction dans le sous-espace singulet-pair, S=0, T=1. Sept paramétrisations, obtenues pour sept valeurs différentes de Δ_{2-1} , sont représentées. Parmi elles, la paramétrisation D1S est marquée par des cercles.

Les potentiels $V_{12,i=1,2,3}^{S=0,T=1}(r)$ correspondants aux trois plus faibles valeurs de Δ_{2-1} sont attractifs quelle que soit la distance r entre les nucléons. L'attraction maximale est obtenue pour $r = 0$, lorsque les deux nucléons sont en contact. Ces formes de potentiel ne sont pas adaptées pour simuler l'interaction d'appariement dans les noyaux. Les noyaux

magiques, en particulier, sont mal décrits. Ils développent des corrélations d'appariement importantes consécutives à l'attraction pathologique des potentiels $V_{12,i=\{1,2,3\}}^{S=0,T=1}(r)$.

Les potentiels $V_{12,i=\{4,5,6,7\}}^{S=0,T=1}(r)$, associés aux valeurs de Δ_{2-1} supérieures à 2.750 MeV, sont répulsifs lorsque la distance r entre les nucléons devient inférieure à 0.5 fm. Ils ressemblent aux potentiels de Van-der-Waals utilisés en physique moléculaire, répulsifs aux courtes distances puis attractifs aux plus grandes valeurs de r . Ces formes de potentiel sont beaucoup plus appropriées à la description des corrélations d'appariement. Notamment, le potentiel $V_{12,i=4}^{S=0,T=1}(r)$, labellé par des cercles sur la Fig. I.12 et correspondant à la différence $\Delta_{2-1} = 2.750$ MeV, permet de reproduire correctement les propriétés d'appariement dans les isotopes de l'Etain.

Les 3 derniers potentiels, $V_{12,i=\{5,6,7\}}^{S=0,T=1}(r)$ présentent une répulsion trop importante à courte portée et n'autorisent donc pas un développement suffisant des corrélations d'appariement dans les noyaux.

Cette analyse, basée sur la structure spatiale du potentiel d'appariement, montre que la différence $\Delta_{2-1} = V_{2s} - V_{1s}$ doit rester proche de 2.750 MeV.

Nous avons donc pu contraindre les valeurs V_{1s} et V_{2s} des éléments de matrice $\langle 1s\ 1s | V_{12}^{Gogny} | 1s\ 1s \rangle_{(S=0,T=1)}$ et $\langle 2s\ 2s | V_{12}^{Gogny} | 2s\ 2s \rangle_{(S=0,T=1)}$ assez précisément :

$$\begin{aligned} V_{1s} &\simeq -4.65 \text{ MeV}, \\ V_{2s} &\simeq -1.90 \text{ MeV}. \end{aligned}$$

Ces contraintes ont été établies en prenant en compte 3 critères :

1. l'énergie d'appariement dans les noyaux magiques,
2. les moments d'inertie des noyaux rotationnels,
3. la structure spatiale du potentiel d'appariement $V_{12}^{S=0,T=1}(r)$.

Dans la procédure de la Fig. I.9, ces critères jouent le rôle des *données expérimentales*, ils nous ont permis de déterminer les valeurs V_{1s} et V_{2s} des *données théoriques*. Cependant, le terme *données expérimentales* n'est pas vraiment approprié à ces critères. Par exemple, le 1^{er} critère se base sur l'énergie d'appariement qui n'est pas une observable physique et ne peut donc être accessible expérimentalement. Pour cette raison, nous utiliserons plutôt le terme *données initiales* pour qualifier les 3 critères qui nous ont permis de contraindre les valeurs de V_{1s} et V_{2s} .

La procédure complète qui permet de déterminer les combinaisons linéaires de paramètres $(W_i - B_i - H_i + M_i)_{i=1,2}$ est schématisée sur la Fig. I.13.

Les *données initiales* sont constituées par 3 critères qui permettent de déterminer les valeurs V_{1s} et V_{2s} des *données théoriques*. En affectant des valeurs aux portées μ_1 et μ_2 au sein d'une "boucle", on peut définir les fonctions $f_{i=1,2}^{1s}$ et $f_{i=1,2}^{2s}$ qui interviennent dans les équations (I.15) et (I.16). Ce système de 2 équations peut alors être inversé pour remonter aux valeurs des 2 combinaisons linéaires de paramètres $(W_1 - B_1 - H_1 + M_1)$ et $(W_2 - B_2 - H_2 + M_2)$.

Les procédures des Fig. I.13 et I.8 permettent donc de contraindre les valeurs de 6 combinaisons linéaires des paramètres $W_1, B_1, H_1, M_1, W_2, B_2, H_2$ et M_2 . Pour déterminer complètement ces 8 paramètres, il reste à établir 2 équations. L'une d'elles se base sur les énergies des états $2s_{1/2}$, neutron et proton, du ^{48}Ca .

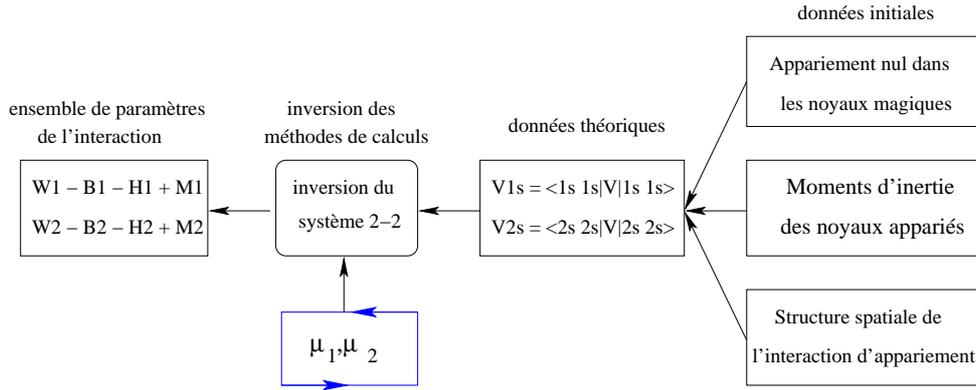


FIG. I.13 – Procédure de détermination de deux combinaisons linéaires des paramètres de l'interaction à partir de deux éléments de matrice de l'interaction (données théoriques) dont les valeurs sont contraintes par trois critères (données initiales).

I.4 Ajustement de l'énergie de symétrie

Dans cette partie, notre but est de déterminer un ensemble de paramètres $\{V_{12}^{Gogny}\}$ de l'interaction de Gogny capable de décrire correctement les observables dépendantes de l'isospin $T_z = \frac{N-Z}{2}$ (N et Z représentent les nombres de neutrons et de protons du noyau de masse A). Parmi ces observables, on compte l'énergie de liaison $B(N, Z)$. Sa dépendance dans l'isospin T_z est explicite dans la formule semi-empirique proposée par Bethe et Weizsäcker [29, 30] :

$$B(N, Z) = a_V A + a_S A^{2/3} + a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} + a_\tau \frac{4T_z^2}{A} + \dots \quad (\text{I.19})$$

Cette formule montre que, pour obtenir une bonne reproduction des énergies de liaison expérimentales lorsque l'isospin T_z varie, il faut choisir correctement la valeur du coefficient a_τ , aussi connu sous le nom d'énergie de symétrie. Les meilleurs fits de formule de masse [31, 32, 33, 34, 35] sont obtenus pour des valeurs de a_τ comprises entre 28 et 32 MeV.

Dans la procédure schématisée sur la Fig. I.2, il s'agirait alors de contraindre les paramètres de l'interaction $\{V_{12}^{Gogny}\}$ par l'énergie de symétrie a_τ qui interviendrait dans les *données théoriques* et les *données expérimentales*.

Ce n'est cependant pas cette contrainte que D. Gogny a choisi d'utiliser pour ajuster les propriétés d'isospin de son interaction. Il a préféré travailler avec les énergies $\varepsilon_{2s_{1/2}}^\nu$ et $\varepsilon_{2s_{1/2}}^\pi$ des états $2s_{1/2}$, neutron et proton, du ^{48}Ca . À l'approximation HFR, la différence $\Delta\varepsilon$ de ces énergies s'écrit :

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon &= \varepsilon_{2s_{1/2}}^\nu - \varepsilon_{2s_{1/2}}^\pi \\ &= \sum_{i=1,2} g_D(\mu_i) (2H_i + M_i) + g_E(\mu_i) (2B_i + W_i) + h(t_0, x_0, \alpha). \end{aligned} \quad (\text{I.20})$$

Les fonctions g_D , g_E et h sont définies par les expressions (B.15) et (B.16) en Annexe B. Cette contrainte sur la différence d'énergie $\Delta\varepsilon$ est en fait équivalente à la contrainte pro-

posée plus haut concernant l'énergie de symétrie a_τ . Pour le montrer, on construit 13 ensembles de paramètres notés $\left\{V_{12}^{Gogny}\right\}_{i=1,\dots,13}$ avec chacun desquels on calcule la différence $\Delta\varepsilon_{i=1,\dots,13}$ et l'énergie de symétrie $a_{\tau,i=1,\dots,13}$. Les 13 points de coordonnées $(\Delta\varepsilon_i, a_{\tau,i})_{i=1,\dots,13}$ sont représentés sur la Fig. I.14.

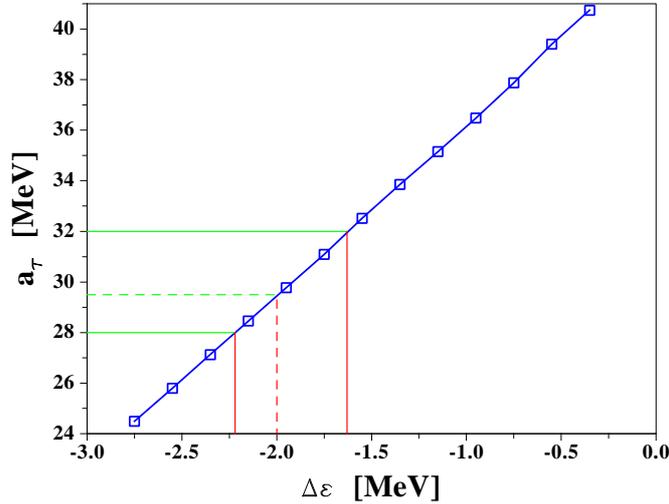


FIG. I.14 – Relation entre l'énergie de symétrie a_τ et la différence $\Delta\varepsilon$ définie entre les états $2s_{1/2}$, neutron et proton, du ^{48}Ca . Sur la figure, les 13 points correspondent aux couples $(\Delta\varepsilon_i, a_{\tau,i})_{i=1,\dots,13}$ calculés avec 13 ensembles de paramètres de l'interaction de Gogny.

La Fig. I.14 montre que la relation entre l'énergie de symétrie a_τ et la différence d'énergie $\Delta\varepsilon$ est linéaire. Il est donc équivalent d'imposer une contrainte sur l'une ou l'autre de ces quantités. Par exemple, contraindre l'énergie de symétrie a_τ entre 28 et 32 MeV revient à contraindre la différence d'énergie $\Delta\varepsilon$ entre -2.2 et -1.6 MeV.

L'étude de la dérive des énergies de liaison le long des chaînes isotopiques permet de préciser cette contrainte sur la valeur de la différence d'énergie $\Delta\varepsilon$. Cette étude consiste à tracer, pour une chaîne isotopique donnée, la différence ΔE entre les énergies de liaison théoriques E_{HFB} et expérimentales E_{EXP} ($\Delta E = E_{HFB} - E_{EXP}$) en fonction du nombre de neutrons N . Les énergies de liaison théoriques ont été notées E_{HFB} car elles sont évaluées à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB). La partie gauche de la Fig. I.15 montre les courbes obtenues dans la chaîne isotopique des Etains avec les 13 interactions $\left\{V_{12}^{Gogny}\right\}_{i=1,\dots,13}$ définies précédemment.

Pour chacune de ces interactions, nous avons renormalisé la courbe $\Delta E(N)$ de façon à ce qu'elle s'annule au nombre magique de 82 neutrons, $\Delta E(N = 82) = 0$. Nous allons principalement discuter les deux noyaux magiques correspondants aux nombres de neutrons $N = 50$ et $N = 82$, c'est à dire l' ^{100}Sn et l' ^{132}Sn . En effet, on s'attend à ce que les énergies de liaison des noyaux doublement magiques, donc rigides, soient correctement décrites à l'approximation HFB alors que ce n'est pas le cas pour les autres noyaux de cette chaîne isotopique. Pour ceux-ci, il est nécessaire d'inclure les corrélations dans l'état fondamental associées, notamment, aux vibrations quadrupolaires du noyau.

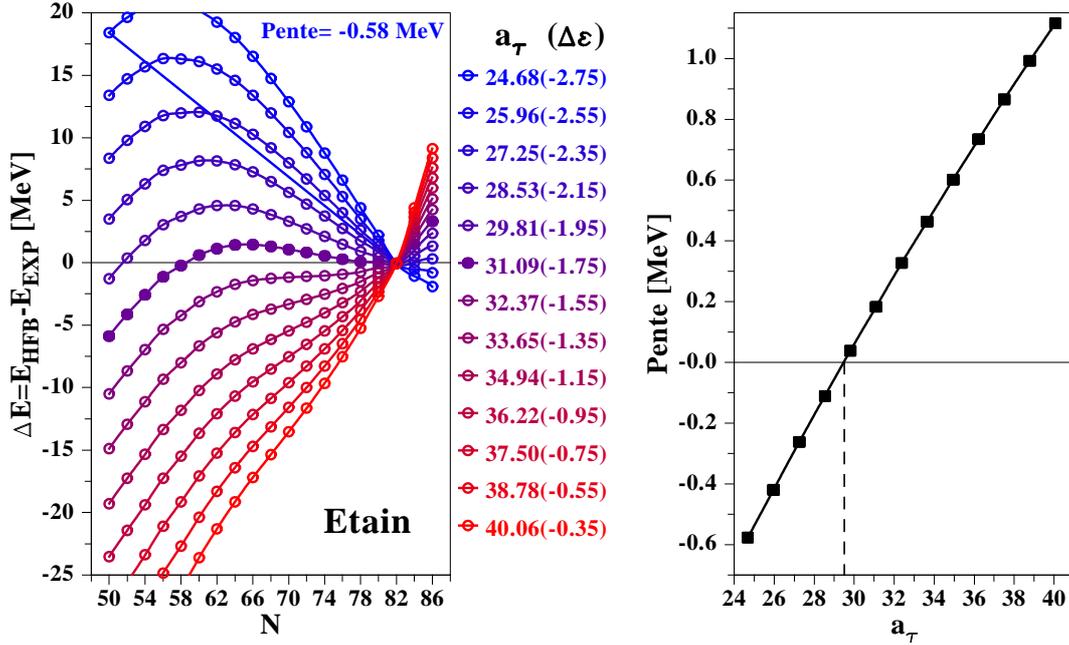


FIG. I.15 – Partie gauche : Différence $\Delta E = E_{HFB} - E_{EXP}$ entre les énergies de liaison théoriques E_{HFB} (approximation Hartree-Fock-Bogoliubov) et expérimentales E_{EXP} représentée en fonction du nombre de neutrons N , dans la chaîne isotopique des Etains. Chaque courbe correspond à une paramétrisation différente de l'interaction dont l'énergie de symétrie a_τ (et la différence $\Delta\varepsilon$ définie dans le ^{48}Ca) sont indiquées en MeV. La courbe obtenue avec la paramétrisation D1S est marquée par des cercles pleins.

Partie droite : Valeur de la pente, définie entre l' ^{100}Sn et l' ^{132}Sn , représentée en fonction de l'énergie de symétrie a_τ . Chacun des 13 points est associé à une des courbes $\Delta E(N)$ de la partie gauche.

En reliant par une droite les deux noyaux magiques ^{100}Sn et ^{132}Sn , on peut mettre en évidence ce que l'on appelle la dérive des énergies de liaison. Pour la première des 13 interactions, correspondant à une énergie de symétrie $a_{\tau,1} = 24.68$ MeV ou encore à $\Delta\varepsilon_1 = -2.75$ MeV, la dérive est négative avec une pente de -0.58 MeV. Lorsque la valeur de l'énergie de symétrie a_τ augmente, cette dérive négative diminue. On obtient d'ailleurs une pente presque nulle avec la cinquième interaction d'énergie de symétrie $a_{\tau,5} = 29.81$ MeV. Pour les énergies de symétrie supérieures, la pente devient positive. Le cas de l'interaction D1S est symbolisé par des cercles pleins. Avec une énergie de symétrie $a_{\tau,6} = 31.09$ MeV, cette interaction présente une dérive positive de l'ordre de 5 MeV entre l' ^{100}Sn et l' ^{132}Sn , ce qui correspond à une pente de 0.2 MeV. Si, pour l' ^{100}Sn et l' ^{132}Sn , la théorie HFB était capable de reproduire exactement les énergies de liaison expérimentales, on aurait $\Delta E(N = 50) = \Delta E(N = 82) = 0$. Ce comportement idéal des énergies de liaison correspond à une pente nulle de la droite reliant l' ^{100}Sn et l' ^{132}Sn . Les valeurs des pentes obtenues avec chacune des 13 interactions sont représentées en fonction de l'énergie de symétrie a_τ sur la partie droite de la Fig. I.15. La pente nulle idéale est obtenue pour une énergie de symétrie $a_\tau = 29.5$ MeV. Sur la Fig. I.14, le trait pointillé montre que cette énergie de symétrie correspond à $\Delta\varepsilon \simeq -2.0$ MeV. Cette étude de la dérive des énergies de liaison nous a permis de préciser la contrainte sur $\Delta\varepsilon$.

La procédure générale de la Fig. I.2 prend alors la forme plus particulière schématisée sur la Fig. I.16.

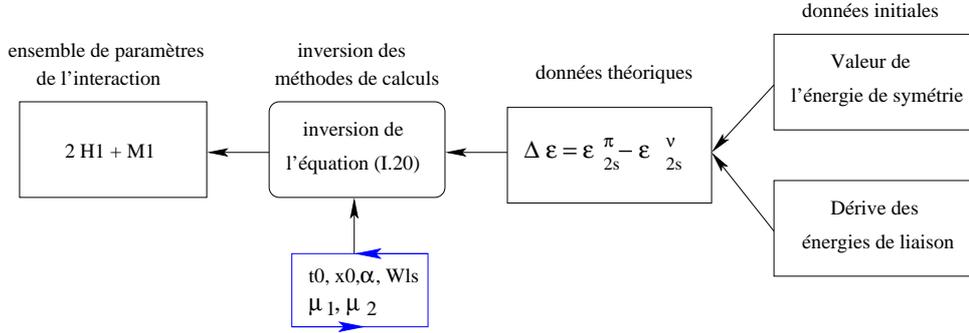


FIG. I.16 – Procédure de détermination d'une combinaison linéaire des paramètres de l'interaction à partir de la différence $\Delta\varepsilon$ définie dans le ^{48}Ca (données théoriques) dont la valeur est contrainte par deux critères (données initiales).

Les *données initiales* sont constituées par :

- la valeur empirique de l'énergie de symétrie a_τ comprise entre 28 et 32 MeV,
- les énergies de liaison expérimentales le long des chaînes isotopiques.

La valeur empirique de l'énergie de symétrie a_τ permet de contraindre grossièrement la différence $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{2s1/2}^\nu - \varepsilon_{2s1/2}^\pi$ entre les énergies $\varepsilon_{2s1/2}^\nu$ et $\varepsilon_{2s1/2}^\pi$ des états $2s_{1/2}$, neutron et proton, dans le ^{48}Ca . La Fig. I.14 montre que cette première contrainte permet de restreindre la valeur de $\Delta\varepsilon$ dans l'intervalle $\Delta\varepsilon \in [-2.2, -1.6]$ MeV.

Les énergies de liaison expérimentales le long des chaînes isotopiques permettent de contrôler le comportement des énergies de liaison théoriques en fonction du nombre de neutrons N . Comme nous l'avons montré avec la Fig. I.15, elles imposent une contrainte plus précise sur la valeur de $\Delta\varepsilon$, $\Delta\varepsilon \simeq -2.0$ MeV.

La valeur de la *donnée théorique* $\Delta\varepsilon$ est alors précisément déterminée. De plus, les valeurs des paramètres t_0 , x_0 , α , μ_1 et μ_2 sont connues. Elles décrivent des intervalles, définis par l'utilisateur, au sein d'une boucle représentée par le rectangle bleu sur la Fig. I.16. L'équation (I.20) ne contient alors plus que quatre inconnues, $(2H_1 + M_1)$, $(2H_2 + M_2)$, $(2B_1 + W_1)$ et $(2B_2 + W_2)$. Par inversion de cette équation, on peut donc exprimer une combinaison linéaire de paramètres, $(2H_1 + M_1)$ par exemple, en fonction des trois autres :

$$2H_1 + M_1 = \frac{1}{g_D(\mu_1)} [\Delta\varepsilon - g_D(\mu_2)(2H_2 + M_2) - h(t_0, x_0, \alpha) - g_E(\mu_1)(2B_1 + W_1) - g_E(\mu_2)(2B_2 + W_2)]. \quad (\text{I.21})$$

En ce qui concerne les valeurs des 8 paramètres, W_1 , B_1 , H_1 , M_1 , W_2 , B_2 , H_2 et M_2 , l'équation (I.21) constitue la septième contrainte. Il ne reste donc plus qu'une seule équation à établir pour déterminer complètement ces 8 paramètres. Cette dernière équation consiste simplement à affecter une valeur arbitraire B_c au coefficient B_1 . Pour plus de souplesse, cette valeur de B_c est autorisée à varier, au sein d'une boucle, entre une valeur initiale B_c^I et une valeur finale B_c^F , $B_c \in [B_c^I, B_c^F]$.

Maintenant que les 8 équations qui permettent de déterminer les 8 paramètres $(W_i, B_i, H_i, M_i)_{i=1,2}$ ont été définies, on peut présenter le schéma général de contraintes sur les paramètres de l'interaction.

I.5 Schéma global de l'ajustement

Pour établir ce schéma, il suffit de rassembler les procédures de contraintes schématisées sur les Fig. I.8, I.13 et I.16. On obtient alors la procédure globale représentée sur la Fig. I.17.

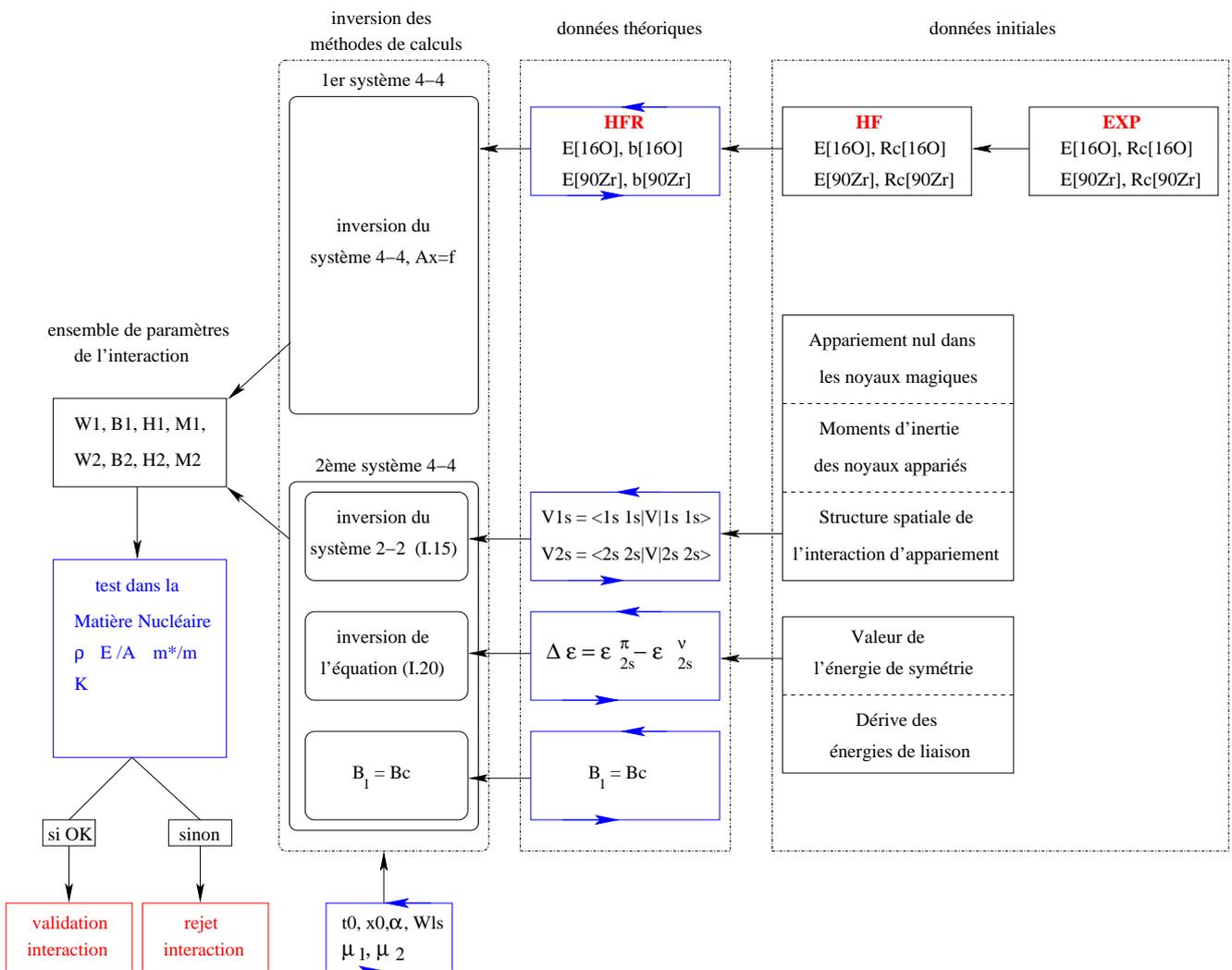


FIG. I.17 – Procédure globale de détermination des paramètres de l'interaction par inversion d'un ensemble d'équations relatives à un ensemble de données théoriques. Ces dernières sont elles-même contraintes par des données dites initiales, le plus souvent constituées par des critères empiriques.

Comme l'ont montré les parties précédentes, les valeurs standards des *données théoriques* se déduisent des *données initiales* issues, pour la plupart, de l'expérience. Toutefois, pour que la procédure soit moins rigide, on autorise les *données théoriques* à décrire des valeurs autres que ces valeurs standards. On définit alors des intervalles de variation autour des valeurs standards. Ces "boucles" sur les valeurs des *données théoriques* sont représentées par les flèches bleues sur la Fig. I.17.

Les valeurs ainsi définies des *données théoriques* interviennent dans les équations de deux systèmes 4-4. Les paramètres t_0 , x_0 , α , μ_1 et μ_2 sont quant à eux "bouclés" sur des intervalles de valeurs définis par l'utilisateur. Les seules inconnues restantes dans les équations des deux systèmes 4-4 sont les 8 paramètres $(W_i, B_i, H_i, M_i)_{i=1,2}$ qui peuvent être déterminés par inversion. Tous les paramètres sont alors connus et l'interaction est complètement définie.

Pour valider cette interaction, on teste finalement ses propriétés dans la matière nucléaire infinie. Les quantités qui nous intéressent sont la position du point de saturation définie par la densité d'équilibre ρ_0 et l'énergie par particule E_0 , la masse effective m^*/m , l'incompressibilité K et l'énergie de symétrie a_τ . Si, pour ces quantités, les valeurs obtenues avec l'interaction correspondent aux valeurs empiriques alors l'interaction est validée, sinon elle est rejetée.

Comme on vient de le dire, la plupart des quantités ajustées ne sont pas contraintes à des valeurs standards fixées de façon immuable. On les autorise à appartenir à un certain intervalle de valeurs. Ceci a pour conséquence que les paramètres de l'interaction ne sont pas complètement fixés. Plusieurs jeux de paramètres sont en général trouvés qui correspondent à des interactions dont les propriétés sont voisines. Il est alors possible de mettre à profit cette latitude pour essayer d'introduire de nouvelles contraintes. C'est ce que nous tentons de faire dans le chapitre suivant. Aux contraintes mentionnées plus haut, nous ajoutons celle de reproduire l'équation d'état de la matière neutronique. Comme nous allons le voir, cette nouvelle contrainte permet de trouver un nouveau jeu de paramètres qui fournit une nouvelle interaction de Gogny que nous appellerons DIN.

Chapitre II

L'interaction D1N

Dans ce chapitre, nous allons faire évoluer la procédure de détermination des paramètres de l'interaction de Gogny présentée sur la Fig. I.17. Nous allons notamment ajouter une contrainte sur l'équation d'état de la matière neutronique.

II.1 Matière neutronique et interaction de Gogny

II.1.1 L'équation d'état de la matière neutronique

La matière neutronique est un milieu homogène (invariant par translation) et isotrope (invariant par rotation) constitué par un nombre infini de neutrons en interaction forte. Pour caractériser ce milieu, on représente l'énergie par particule en fonction de la densité, c'est ce que l'on appelle l'équation d'état de la matière neutronique. Nous exposons dans la suite deux méthodes de calcul de cette équation d'état. La première se fonde sur les interactions réalistes, c'est la méthode Monte-Carlo variationnelle, notée VMC (Variational Monte-Carlo). La seconde est basée sur les interactions effectives, c'est la méthode Hartree-Fock.

II.1.1.1 La méthode Monte-Carlo variationnelle et les interactions réalistes

La matière neutronique est décrite comme un ensemble de nucléons ponctuels régis par l'équation de Schrödinger non-relativiste et interagissant par un potentiel à deux corps. Le Hamiltonien du système comprend la somme des énergies cinétiques de toutes les particules et la somme des interactions à deux corps :

$$H^{\text{réa}} = \sum_{i=1}^A T_i + \sum_{i<j}^A V_{ij}^{\text{réa}}, \quad (\text{II.1})$$

avec T_i : énergie cinétique du nucléon i ,
 $V_{ij}^{\text{réa}}$: interaction réaliste agissant entre les nucléons i et j .

L'interaction $V_{ij}^{\text{réa}}$ n'est autre qu'un potentiel réaliste reproduisant les données de diffusion nucléon-nucléon de basse énergie et les propriétés du deutéron.

L'invariance par translation de la matière neutronique simplifie beaucoup les méthodes de calcul. Ainsi, le calcul de l'équation d'état de la matière neutronique a pu être abordé avec les interactions réalistes $V_{ij}^{\text{réa}}$ les plus modernes et les plus sophistiquées [36, 37]. Ce calcul s'appuie sur la méthode variationnelle dont le point de départ est une fonction d'onde d'essai $|\Psi\rangle$ de la forme :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= F|\Phi\rangle, \\ \text{avec } |\Phi\rangle & \quad : \text{ la fonction d'onde du gaz de Fermi libre (sans interactions),} \\ F &= \prod_{i < j}^A f(r_{ij}) \quad : \text{ le produit des fonctions de corrélations à deux corps } f(r_{ij}). \end{aligned}$$

La fonction de corrélations à deux corps $f(r_{ij})$ dépend de la distance r_{ij} entre les nucléons i et j . Elle est paramétrisée sous une forme donnée et, à cause du coeur répulsif de l'interaction, s'annule pour les petites valeurs de r_{ij} . Dans le cas d'une interaction nucléaire réaliste, la forme de la fonction de corrélations à deux corps doit être généralisée : la force tenseur, la force spin-orbite et d'autres types de corrélations doivent être pris en compte. L'opérateur de corrélations F alors défini permet de calculer l'énergie variationnelle E_{var} à partir du Hamiltonien $H^{\text{réa}}$:

$$\begin{aligned} E_{var} &= \frac{\langle \Psi | H^{\text{réa}} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \\ &= \frac{\langle \Phi | F^+ H^{\text{réa}} F | \Phi \rangle}{\langle \Phi | F^+ F | \Phi \rangle}. \end{aligned}$$

L'équation d'état est alors obtenue en calculant l'énergie variationnelle E_{var} à différentes densités de matière. En pratique, la fonction de corrélations $f(r_{ij})$ contient plusieurs paramètres que l'on fait *varier* pour minimiser l'énergie E_{var} à chaque densité. C'est la raison pour laquelle l'énergie E_{var} est qualifiée de *variationnelle*. Les calculs variationnels les plus récents utilisent les interactions réalistes d'Argonne [36, 37] et ont été réalisés par Friedman et Pandharipande [11], Wiringa et Fiks [38] ou encore Akmal, Pandharipande et Ravenhall [39]. Les prédictions de tous ces auteurs sont très similaires aux basses densités ; par conséquent, nous nous référons uniquement à l'équation d'état prédite par Friedman et Pandharipande (FP).

Les corrélations entre les nucléons peuvent être divisées en deux catégories [40], celles de courte portée et celles de longue portée. La méthode variationnelle offre l'avantage de traiter explicitement ces deux types de corrélations avec un seul et même outil : la fonction de corrélations $f(r_{ij})$ entre les nucléons i et j . Dans les approches de type champ moyen, le traitement des corrélations est différent. Notamment, les corrélations de courte portée ne sont pas prises en compte explicitement. Elles doivent donc être incluses de manière effective dans l'interaction utilisée, dans notre cas l'interaction effective de Gogny. Les corrélations de plus longue portée sont, quant à elles, traitées explicitement par la théorie. Elles sont, pour leur plus grande partie, simulées par le champ moyen Hartree-Fock. Les corrélations restantes peuvent être prises en compte en développant la théorie au-delà

de la méthode Hartree-Fock. Les corrélations d'appariement, par exemple, peuvent être traitées avec la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov. Quant aux corrélations associées aux fluctuations de densité du milieu (phonons), elles peuvent être étudiées avec la RPA (Random Phase Approximation).

Dans la partie suivante, nous décrivons l'équation d'état de la matière neutronique, non plus avec la méthode variationnelle, mais avec l'archétype des approches de champ moyen : la méthode Hartree-Fock.

II.1.1.2 La méthode Hartree-Fock et les interactions effectives

Comme dans le cas de la méthode variationnelle, la matière neutronique est décrite comme un ensemble de nucléons ponctuels obéissant à l'équation de Schrödinger non-relativiste et interagissant par un potentiel à deux corps. Cependant, ce potentiel entre deux nucléons i et j n'est plus décrit par une interaction réaliste mais par une interaction effective notée V_{ij}^{eff} . Le Hamiltonien du système s'écrit alors :

$$H^{\text{eff}} = \sum_{i=1}^A T_i + \sum_{i<j}^A V_{ij}^{\text{eff}},$$

avec T_i : énergie cinétique du nucléon i ,
 V_{ij}^{eff} : interaction effective agissant entre les nucléons i et j .

L'invariance par translation du système détermine complètement les états Hartree-Fock, ce sont les états propres $|\vec{k}\rangle$ de l'opérateur impulsion \vec{P} :

$$\vec{P}|\vec{k}\rangle = \hbar\vec{k}|\vec{k}\rangle.$$

A l'approximation Hartree-Fock, la fonction d'onde $|\Phi\rangle$ du système correspond donc au déterminant de Slater construit sur les états propres $|\vec{k}\rangle$ de l'opérateur impulsion. Cette définition est aussi celle de la fonction d'onde du gaz de Fermi libre. Ainsi, la fonction d'onde Hartree-Fock d'un système invariant par translation n'est autre que la fonction d'onde du gaz de Fermi libre. Une fois connue la fonction d'onde Hartree-Fock $|\Phi\rangle$ du système, le calcul de l'énergie correspondante E_{HF} est immédiat :

$$E_{HF} = \frac{\langle \Phi | H^{\text{eff}} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}.$$

L'expression de E_{HF} obtenue avec l'interaction effective de Gogny est complètement explicitée dans la partie A.4 de l'Annexe A. Le calcul de l'énergie Hartree-Fock E_{HF} pour différentes valeurs de la densité de matière permet de représenter l'équation d'état de la matière neutronique.

Nous avons donc présenté deux moyens d'accès à l'équation d'état de la matière neutronique, par la méthode variationnelle avec des interactions réalistes et par la méthode Hartree-Fock avec des interactions effectives.

Pour la méthode variationnelle, l'équation d'état prédite par Friedman et Pandharipande (FP) avec l'interaction réaliste AV14 est représentée par la courbe noire sur la Fig. II.1. Sur la même figure, les calculs Hartree-Fock basés sur l'interaction effective de Gogny D1S correspondent à la courbe bleue.

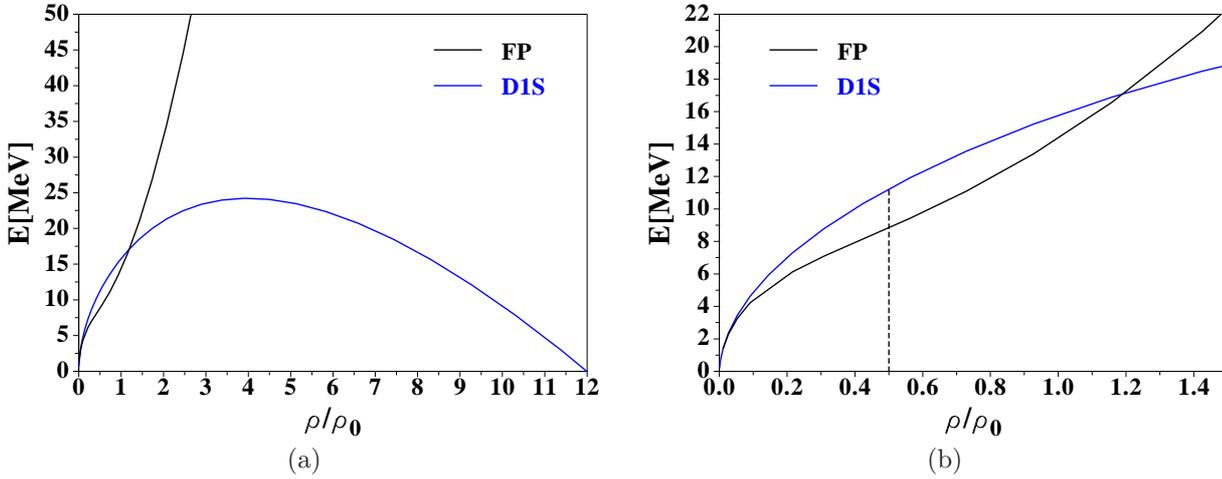


FIG. II.1 – Equation d'état de la matière neutronique : énergie par particule E en fonction de la densité ρ (exprimée en unité de la densité de saturation ρ_0). Notre calcul réalisé avec la méthode Hartree-Fock et l'interaction D1S (courbe bleue) est comparé aux prédictions de Friedman et Pandharipande (FP) [11] obtenues avec la méthode variationnelle et une interaction réaliste (courbe noire).

Comme cela a déjà été mentionné à la fin de la partie II.1.1.1, la méthode variationnelle avec interactions réalistes et la méthode Hartree-Fock avec interactions effectives ne traitent pas de la même manière les corrélations entre les nucléons. Cependant, dans l'hypothèse où ces deux méthodes prennent en compte la partie la plus significative des corrélations entre les nucléons, elles peuvent être comparées et devraient donner des résultats similaires. La Fig. II.1 montre que ce n'est pas le cas, l'équation d'état obtenue avec la méthode variationnelle est très différente de celle calculée avec la méthode Hartree-Fock et l'interaction D1S.

La différence la plus frappante concerne le domaine des densités neutron ρ supérieures à quatre fois la densité normale ρ_0 , $\rho > 4\rho_0$. Dans ce domaine, l'équation d'état calculée avec la méthode Hartree-Fock et l'interaction D1S devient décroissante, puis négative pour $\rho > 12\rho_0$. Le calcul variationnel de Friedman et Pandharipande prédit, quant à lui, une équation d'état qui est croissante et positive à toutes les densités.

Dans le domaine des densités plus faibles, les prédictions variationnelle et Hartree-Fock pour l'équation d'état sont en meilleur accord. La Fig. II.1(b) montre que, pour $\rho \leq \rho_0$, leur différence reste inférieure à 3 MeV par particule. Cette différence, qui semble a priori mineure, ne doit cependant pas être négligée car elle peut avoir un effet sur la description de la structure nucléaire, notamment pour les noyaux très riches en neutrons.

Notre but, dans la partie suivante, est d'élaborer une nouvelle paramétrisation, appelée D1N, de l'interaction de Gogny. L'interaction D1N devra reproduire aux basses densités

l'équation d'état de la matière neutronique prédite par le calcul variationnel de Friedman et Pandharipande. Cette même contrainte imposée aux interactions de Skyrme a permis de définir la paramétrisation Sly4 [12, 13], aujourd'hui très largement utilisée dans les calculs de structure nucléaire.

II.1.2 L'ajustement de l'interaction D1N

II.1.2.1 La méthode d'ajustement de la matière neutronique

Il faut d'abord parler de la précision avec laquelle on souhaite reproduire l'équation d'état variationnelle de la matière neutronique. La partie de basse densité ($\rho \leq \rho_0$) de l'équation d'état intervient dans la description de la structure des noyaux. Aussi, elle doit être reproduite avec une très bonne précision. Pour la partie de plus haute densité ($\rho > \rho_0$), la reproduction du calcul variationnel de Friedman et Pandharipande pourra être moins précise sans grandes conséquences pour la structure nucléaire.

Concrètement, on travaille avec huit valeurs de la densité neutron $\{\rho_i\}_{i=1,\dots,8}$. Les cinq premières valeurs ($i \leq 5$) appartiennent au domaine des basses densités ($\rho_{i \leq 5} \leq \rho_0$), les trois dernières à celui des plus hautes densités ($\rho_{i > 5} > \rho_0$). Pour chaque valeur de la densité neutron, $\{\rho_i\}_{i=1,\dots,8}$, le Tab. II.1 indique l'énergie variationnelle correspondante calculée par Friedman et Pandharipande, $\{E_{FP,i}\}_{i=1,\dots,8}$, ainsi que la précision associée, $\{p_i\}_{i=1,\dots,8}$.

i	Basses densités					Hautes densités		
	$\rho_i \leq \rho_0$					$\rho_i > \rho_0$		
i	1	2	3	4	5	6	7	8
ρ_i/ρ_0	0.027	0.091	0.308	0.562	0.928	1.425	5.836	11.40
$E_{FP,i}$ [MeV]	2.294	4.229	7.082	9.417	13.40	20.93	178.6	537.1
p_i	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.4	0.6	0.8

TAB. II.1 – Energie par particule $E_{FP,i}$ dans la matière neutronique prédite par Friedman et Pandharipande en 8 points de densité ρ_i (l'unité est ρ_0). Pour chacun des points, p_i indique la précision avec laquelle l'énergie variationnelle doit être reproduite.

Les six premiers points $(\rho_i/\rho_0, E_{FP,i})_{i=1,\dots,6}$ sont marqués par des cercles noirs sur la Fig. II.2(a). Les barres d'erreur indiquent le degré de précision avec lequel chacun de ces points doit être reproduit. Les extrémités inférieures, $\{E_{<,i}\}_{i=1,\dots,8}$, et supérieures, $\{E_{>,i}\}_{i=1,\dots,8}$, de ces barres d'erreur se déduisent des valeurs $\{p_i\}_{i=1,\dots,8}$ de la précision demandée :

$$\begin{aligned} E_{<,i} &= E_{FP,i} (1 - p_i) \\ E_{>,i} &= E_{FP,i} (1 + p_i) , \quad i = 1, \dots, 8. \end{aligned}$$

L'équation d'état calculée avec la méthode HF et l'interaction D1S est représentée en bleu sur la Fig. II.2(a). Cette équation d'état ne vérifie pas les critères de précision que nous nous sommes imposés, elle passe à l'extérieur des barres d'erreur associées aux trois points $(\rho_i/\rho_0, E_{FP,i})_{i=\{3,4,5\}}$.

Nous souhaitons donc introduire une nouvelle paramétrisation de l'interaction de Gogny, appelée D1N, capable de reproduire l'équation d'état variationnelle de Friedman et Pandharipande avec la précision indiquée par les barres d'erreur. La question qui se pose alors est : comment déterminer les valeurs des 14 paramètres $W_1, B_1, H_1, M_1, \mu_1, W_2, B_2, H_2, M_2, \mu_2, t_0, x_0, \alpha$ et W_{ls} de cette nouvelle interaction D1N ?

Un élément de réponse est donné par l'approximation parabolique. Cette approximation stipule que l'énergie par particule dans la matière nucléaire asymétrique peut se déduire de celle calculée dans la matière nucléaire symétrique si l'énergie de symétrie est connue :

$$\frac{E}{A}(\rho, \beta) = \frac{E}{A}(\rho, 0) + E_{sym}(\rho) \beta^2, \quad (\text{II.2})$$

- avec :
- $\rho = \rho_n + \rho_p$: densité totale de nucléons, somme des densités neutron ρ_n et proton ρ_p ,
 - $\beta = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho}$: asymétrie du milieu,
 - $\frac{E}{A}(\rho, \beta)$: énergie par particule dans la matière nucléaire de densité ρ et d'asymétrie β ,
 - $E_{sym}(\rho)$: énergie de symétrie à la densité ρ .

Appliquée au cas de la matière neutronique ($\beta = 1$), l'approximation parabolique (II.2) s'écrit :

$$\frac{E}{A}(\rho, 1) = \frac{E}{A}(\rho, 0) + E_{sym}(\rho). \quad (\text{II.3})$$

La relation (II.3) montre que, pour agir sur la forme de l'équation d'état de la matière neutronique $E/A(\rho, 1)$ et obtenir un meilleur accord avec les prédictions variationnelles de Friedman et Pandharipande, il suffirait de pouvoir contrôler le comportement de l'énergie de symétrie en fonction de la densité, $E_{sym}(\rho)$. Un tel contrôle de l'énergie de symétrie à toutes les densités est délicat. Par contre, il est possible de jouer sur la valeur de l'énergie de symétrie à une densité particulière, la densité de saturation ρ_0 . A cette densité, l'énergie de symétrie est souvent notée a_τ , $a_\tau = E_{sym}(\rho_0)$. La Fig. I.14 du chapitre I montre que la relation entre le coefficient a_τ et le paramètre $\Delta\varepsilon$ est linéaire. Pour rappel, la quantité $\Delta\varepsilon$ représente la différence des énergies $\varepsilon_{2s_{1/2}}^\nu$ et $\varepsilon_{2s_{1/2}}^\pi$ des états $2s_{1/2}$ neutron et proton dans le ^{48}Ca . En jouant sur la valeur du paramètre $\Delta\varepsilon$, on peut donc contrôler l'énergie de symétrie à la densité de saturation, $a_\tau = E_{sym}(\rho_0)$. On peut espérer que l'effet du paramètre $\Delta\varepsilon$ ne se limite pas à la densité de saturation ρ_0 mais influence l'énergie de symétrie $E_{sym}(\rho)$ aussi aux autres densités $\rho \neq \rho_0$. Si tel est le cas, et en vertu de la relation (II.3), la valeur du paramètre $\Delta\varepsilon$ devrait agir directement sur la forme de l'équation d'état de la matière neutronique $E/A(\rho, 1)$.

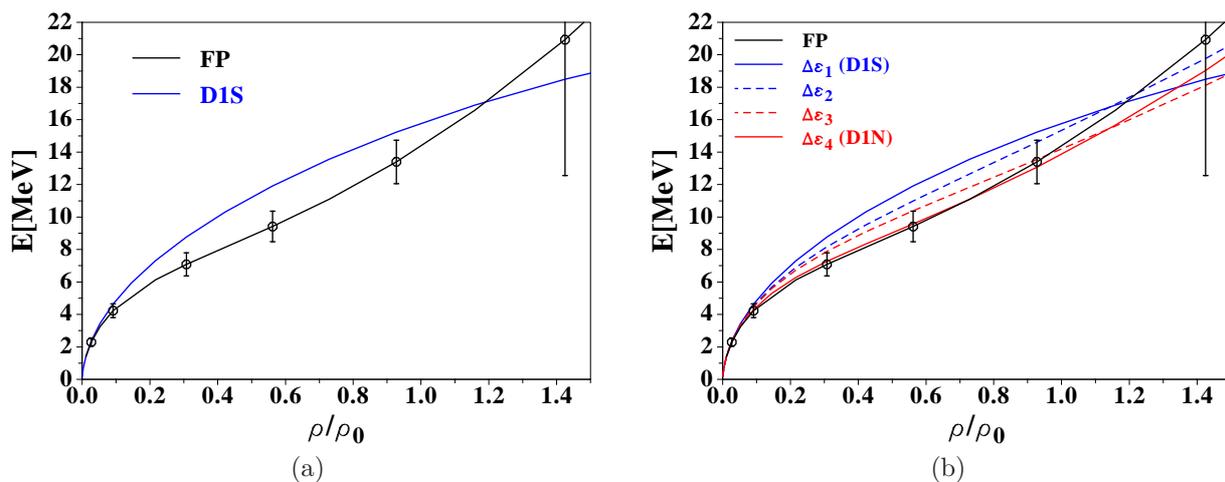


FIG. II.2 – Partie (a) : Equation d'état de la matière neutronique calculée avec l'interaction D1S (courbe bleue).

Partie (b) : Equations d'état de la matière neutronique calculées avec quatre paramétrisations de l'interaction de Gogny. Ces paramétrisations ont été obtenues pour des valeurs différentes du paramètre $\Delta\varepsilon$: $\Delta\varepsilon_1 = -1.75$ MeV, $\Delta\varepsilon_2 = -1.85$ MeV, $\Delta\varepsilon_3 = -2.10$ MeV et $\Delta\varepsilon_4 = -2.60$ MeV. La première de ces paramétrisations n'est autre que l'interaction D1S, la dernière correspond à la nouvelle interaction D1N.

Ces résultats, obtenus avec la méthode Hartree-Fock et différentes paramétrisations de l'interaction effective de Gogny, sont comparés aux prédictions variationnelles de Friedman et Pandharipande (FP) [11] (courbe noire). Les barres d'erreur indiquent la précision avec laquelle nous souhaitons reproduire l'équation d'état variationnelle.

Pour mettre en évidence cet effet du paramètre $\Delta\varepsilon$ sur l'équation d'état de la matière neutronique, nous construisons quatre paramétrisations de l'interaction de Gogny selon la procédure schématisée sur la Fig. I.17. Ces quatre paramétrisations ont été obtenues pour des valeurs différentes du paramètre $\Delta\varepsilon$: $\Delta\varepsilon_1 = -1.75$ MeV, $\Delta\varepsilon_2 = -1.85$ MeV, $\Delta\varepsilon_3 = -2.10$ MeV et $\Delta\varepsilon_4 = -2.60$ MeV. La première de ces paramétrisations qui correspond à $\Delta\varepsilon_1$ n'est autre que l'interaction D1S. La dernière, associée à $\Delta\varepsilon_4$, se révélera être la nouvelle interaction D1N.

Les équations d'état de la matière neutronique obtenues avec chacune de ces quatre paramétrisations sont représentées sur la Fig. II.2(b) par les courbes en trait plein ou pointillé colorées en bleu ou rouge. L'équation d'état variationnelle prédite par Friedman et Pandharipande correspond à la courbe noire. La diminution progressive du paramètre $\Delta\varepsilon$ depuis la valeur $\Delta\varepsilon_1 = -1.75$ MeV jusqu'à $\Delta\varepsilon_4 = -2.60$ MeV permet de nettement améliorer l'accord avec l'équation d'état variationnelle de Friedman et Pandharipande. Notamment, l'interaction D1N, associée à $\Delta\varepsilon_4 = -2.60$ MeV, permet de reproduire l'équation d'état de Friedman et Pandharipande dans les barres d'erreur correspondantes à la précision que nous avons imposée.

Dans les noyaux atomiques, la densité de neutrons reste inférieure à la densité de saturation ρ_0 . Ainsi, pour la description de la structure nucléaire, seule la partie de basse densité de l'équation d'état de la matière neutronique intervient. Pour cette raison, les Fig. II.2(a) et II.2(b) représentent cette équation d'état sur un domaine réduit de densité, $\rho \leq 1.5\rho_0$.

Cependant, dans la perspective d'applications astrophysiques futures, il est intéressant de connaître le comportement de l'équation d'état à des densités plus fortes. La Fig. II.3(a) permet d'explorer des densités de matière neutronique allant jusqu'à 12 fois la densité normale ($\rho \leq 12\rho_0$). Sur cette figure, nous avons repris les équations d'état de la matière neutronique calculées avec les interactions D1S (courbe bleue) et D1N (courbe rouge) que l'on compare au résultat variationnel de Friedman et Pandharipande (courbe noire).

Dans le domaine des hautes densités, l'équation d'état obtenue avec l'interaction D1S devient décroissante puis négative pour les densités supérieures à $12\rho_0$. Ce comportement est très différent de celui prédit par le calcul variationnel de Friedman et Pandharipande. Ces auteurs obtiennent en effet une équation d'état croissante et positive à toutes les densités. La nouvelle interaction D1N lève ce désaccord, elle donne, comme le résultat de Friedman et Pandharipande, une équation d'état qui reste croissante et positive, même aux très hautes densités.

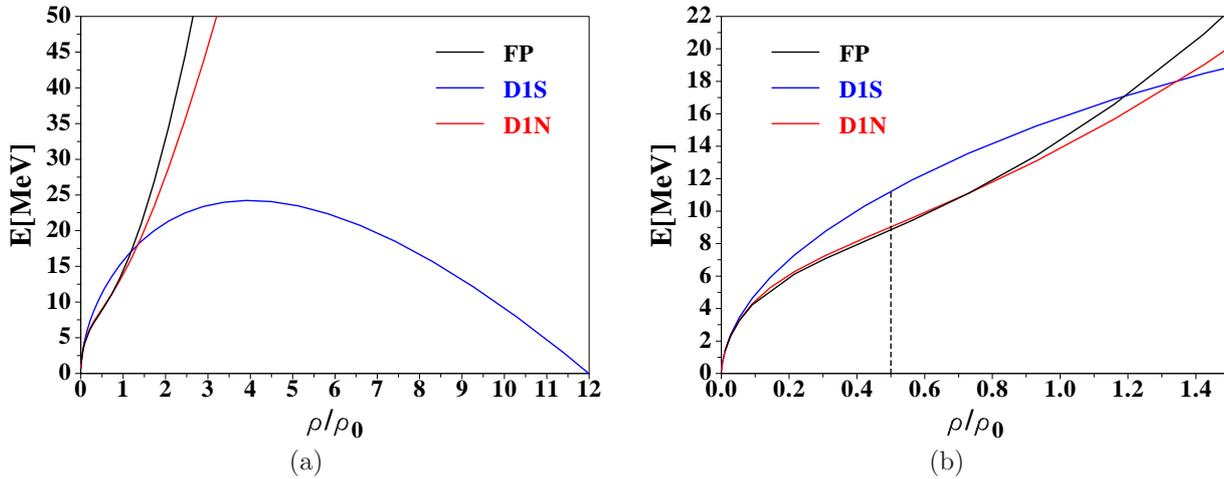


FIG. II.3 – Equations d'état de la matière neutronique calculées, à l'approximation Hartree-Fock, avec les interactions D1S (courbe bleue) et D1N (courbe rouge). Ces résultats sont comparés aux prédictions variationnelles de Friedman et Pandharipande (FP) [11] (courbe noire).

La Fig. II.3(b) présente les mêmes résultats sur un domaine de densités plus limité ($\rho \leq 1.5\rho_0$). La densité de neutrons typiquement rencontrée dans les noyaux, $\rho = \rho_0/2$, est indiquée par la ligne pointillée noire. A cette densité, l'équation d'état calculée avec l'interaction D1S surestime l'énergie par particule de 2.3 MeV par rapport au résultat variationnel de Friedman et Pandharipande. Cet écart a été réduit à moins de 100 keV avec la nouvelle interaction D1N.

Les valeurs des paramètres de la nouvelle interaction D1N sont données dans le Tab. II.2. Les paramétrisations D1 et D1S sont également rappelées dans ce tableau.

	i	μ_i [fm]	W_i [MeV]	B_i [MeV]	H_i [MeV]	M_i [MeV]	t_0 [MeV.fm ^{3($\alpha+1$)}]	x_0	α	W_{ls} [MeV.fm ⁵]
D1	1	0.7	-402.40	-100.00	-496.17	-23.561	1350.0	1	1/3	115
	2	1.2	-21.297	-11.772	37.270	-68.810				
D1S	1	0.7	-1720.3	1300.0	-1813.6	1397.6	1390.6	1	1/3	130
	2	1.2	103.63	-163.48	162.81	-223.92				
D1N	1	0.8	-2047.6	1700.0	-2414.9	1519.4	1609.5	1	1/3	115
	2	1.2	293.02	-300.78	414.59	-316.84				

TAB. II.2 – Valeurs des paramètres des interactions D1, D1S et D1N.

Dans la procédure de détermination des paramètres de l'interaction de Gogny schématisée sur la Fig. I.17, la validation d'une interaction passe par le test de ses propriétés dans la matière nucléaire. Ces dernières sont présentées et commentées dans la partie suivante pour l'interaction D1N.

II.1.2.2 L'interaction D1N et les propriétés de la matière nucléaire

Parmi les principales propriétés de la matière nucléaire (semi-)infinie, on compte les coordonnées du point de saturation, densité ρ_0 et énergie par particule E_0/A , l'énergie de surface a_S , l'énergie de symétrie a_τ , l'incompressibilité K_∞ et la masse effective m^*/m . On peut affecter à chacune de ces quantités une valeur ou un intervalle de valeurs que l'on qualifiera d'*empiriques*.

Pour la densité de saturation ρ_0 , la valeur empirique est déterminée à partir de la distribution de charge des noyaux lourds en prenant en compte les corrections dues à la répulsion Coulombienne et à la tension de surface [41, 42]. Les quantités telles que l'énergie par particule E_0/A (aussi notée a_V), l'énergie de surface a_S et l'énergie de symétrie a_τ interviennent dans la formule de masse semi-empirique (I.19). Leurs valeurs empiriques se déduisent donc des ajustements de cette formule de masse [31, 32, 33, 34, 35] sur les énergies de liaison expérimentales. Pour la valeur de l'incompressibilité K_∞ , une détermination microscopique a été proposée par Blaizot *et al.* [43] dans une étude réalisée avec différentes paramétrisations de l'interaction effective de Gogny. Ces auteurs parviennent à reproduire les données expérimentales des noyaux lourds, comme l'énergie du mode de respiration dans le ^{208}Pb par exemple, pour des valeurs de l'incompressibilité comprises entre 210 et 220 MeV. Cet intervalle de valeurs peut être élargi à 200-230 MeV sans altérer la qualité de reproduction des données expérimentales. Quant à la masse effective m^*/m , sa valeur empirique peut se déduire de l'analyse de la diffusion nucléon-noyau avec un potentiel optique [44]. Les différentes valeurs empiriques ainsi déterminées sont rassemblées dans la dernière colonne intitulée *Val. Emp.* du Tab. II.3.

Les trois premières colonnes de ce tableau indiquent les valeurs obtenues par le calcul avec la méthode Hartree-Fock et les trois paramétrisations de l'interaction effective de Gogny, D1, D1S et D1N. Le développement de ce calcul est complètement explicité en Annexe A.

	D1	D1S	D1N	Val. Emp.
ρ_0 (fm^{-3})	0.166	0.163	0.161	0.17 (± 0.02)
E_0/A (MeV)	-16.32	-16.02	-15.96	-16 (± 1)
a_S (MeV)	21.2	20.0	19.3	21 (± 2)
a_τ (MeV)	30.8	31.1	29.3	30 (± 2)
K_∞ (MeV)	228	210	230	215 (± 15)
m^*/m	0.67	0.70	0.74	0.70 (± 0.05)

TAB. II.3 – Propriétés de la matière nucléaire (semi-)infinie. Les valeurs calculées avec la méthode Hartree-Fock et les interactions D1, D1S et D1N sont confrontées aux valeurs empiriques (Val. Emp.).

Le Tab. II.3 montre que, pour chacune des trois interactions D1, D1S et D1N, les valeurs calculées des propriétés de la matière nucléaire sont en accord avec les valeurs empiriques. Si cela n'avait pas été le cas pour l'une de ces interactions, celle-ci aurait été rejetée par la procédure illustrée sur la Fig. I.17. Le test des propriétés de la matière nucléaire constitue en effet une condition nécessaire à la validation d'une interaction effective. Les trois parties suivantes ont pour but de commenter plus en détail ces propriétés de la matière nucléaire.

Dans la partie II.1.2.2 – a, nous discutons *l'équation d'état de la matière nucléaire symétrique*. Nous nous intéressons plus particulièrement au minimum de cette équation d'état dont les coordonnées définissent le point de saturation ($\rho_0, E_0/A$) et dont la courbure correspond à l'incompressibilité K_∞ .

Dans la matière nucléaire symétrique, les masses effectives neutron et proton sont égales. Leur valeur commune est notée m^*/m dans le Tab. II.3. En revanche, dans la matière asymétrique, ces masses effectives peuvent être différentes. On parle alors de *séparation des masses effectives neutron et proton en fonction de l'asymétrie*, c'est ce dont traite la partie II.1.2.2 – b.

Le Tab. II.3 donne la valeur de l'énergie de symétrie à la densité de saturation, $a_\tau = E_{sym}(\rho_0)$. Comment évolue cette quantité lorsqu'on s'éloigne de la densité de saturation? La partie II.1.2.2 – c permet de répondre à cette question en étudiant *la dépendance en densité de l'énergie de symétrie, $E_{sym}(\rho)$* .

II.1.2.2 – a La matière nucléaire symétrique

Deux méthodes permettent de calculer l'équation d'état de la matière nucléaire symétrique à partir des interactions réalistes. La première est la méthode variationnelle déjà présentée dans la partie II.1.1.1. La seconde est la méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone (BBG) dont on expose brièvement les idées maîtresses.

La méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone

La méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone est basée sur le développement de Goldstone [45] qui est une série de perturbation en clusters liés pour l'énergie de l'état fondamental. L'expression (II.1) du Hamiltonien $H^{\text{réa}}$ est réécrite sous la forme :

$$H^{\text{réa}} = H_0 + H_1^{\text{réa}} ,$$

$$\text{avec : } H_0 = \sum_{i=1}^A (T_i + U_i) \quad : \text{ le Hamiltonien non perturbé,}$$

$$H_1^{\text{réa}} = \sum_{i<j}^A V_{ij}^{\text{réa}} - \sum_{i=1}^A U_i \quad : \text{ la perturbation.}$$

Dans ces expressions, U est un potentiel à une particule que l'on peut choisir à notre convenance puisque le Hamiltonien total $H^{\text{réa}}$ n'en dépend pas. Cependant, comme l'énergie est calculée sous forme d'un développement en puissance de $H_1^{\text{réa}}$, la convergence de ce développement dépend du choix de U . Pour cette raison, le potentiel U est choisi de façon à ce que le développement de l'énergie converge suffisamment vite pour être exploité.

A cause de la forte répulsion entre les nucléons à courte distance, le développement de Goldstone est d'abord réécrit en introduisant la matrice de réaction G qui resomme toutes les diffusions possibles de deux nucléons vers des états inoccupés. Cette somme infinie de diagrammes en échelle est évaluée en résolvant l'équation intégrale de Bethe-Brueckner-Goldstone :

$$G(w) = V + V \frac{Q}{w - H_0} G(w) ,$$

avec Q : l'opérateur de Pauli qui projette sur les états à deux corps inoccupés,
 w : l'énergie de départ (starting energy).

La série de perturbation en puissances de G ne converge pas, mais les diagrammes en cluster peuvent être groupés en fonction du nombre de lignes de trous indépendantes. La convergence de ce développement en lignes de trous a été démontrée formellement par Brandow [46].

A l'ordre le plus bas, seule la contribution des diagrammes à deux lignes de trous intervient, et l'énergie par nucléon dans la matière nucléaire symétrique de densité équivalente au moment de Fermi k_F s'écrit :

$$\frac{E}{A} = \frac{1}{A} \sum_{m \leq k_F} \langle m | T | m \rangle + \frac{1}{2A} \sum_{m, n \leq k_F} \langle mn | G(w) | mn - nm \rangle.$$

On distingue deux types de choix pour le potentiel U , le choix *standard* [47, 48] qui produit une discontinuité du potentiel à la surface de Fermi et le choix *continu* [49, 50] qui, comme son nom l'indique, ne présente aucune discontinuité. Une étude récente [51] a montré que, lorsque les contributions des diagrammes à trois lignes de trous sont prises en compte, l'équation d'état résultante devient indépendante du choix, standard ou continu, pour le potentiel U .

Seules les grandes lignes de la théorie de Bethe-Brueckner-Goldstone ont été reprises ici. Pour bien comprendre cette approche, des détails complémentaires peuvent être trouvés dans de nombreux livres et articles de revue [1, 52, 53, 54, 50, 55, 56]. La forme explicite des expressions mises en jeu dans ce type de calculs, ainsi que les méthodes de leur traitement numérique sont présentées dans la Ref. [57].

L'équation d'état de la matière nucléaire symétrique calculée par le groupe de Catane [58] avec la méthode Bethe-Brueckner-Goldstone et l'interaction réaliste AV14 [36] est notée "BBG" et symbolisée par les triangles sur la Fig. II.4(a). Sur cette figure, la zone empirique de saturation, $\rho_0 = 0.17 \pm 0.02 \text{ fm}^{-3}$ et $E_0/A = -16 \pm 1 \text{ MeV}$, est représentée en jaune. Le point de saturation de l'équation d'état BBG, repéré par le triangle rouge, manque cette zone empirique à cause d'une densité de saturation surévaluée. Ce problème n'est pas spécifique à l'interaction AV14 mais apparait aussi pour les autres potentiels réalistes. La méthode Bethe-Brueckner-Goldstone appliquée à différents potentiels réalistes montre que les prédictions pour le point de saturation sont situées sur une bande étroite qui manque la zone empirique. Ce phénomène est connu sous le nom de *bande de Coester* [59, 60].

Dans la matière nucléaire, la contribution des interactions à trois corps n'est pas négligeable et doit être prise en compte. Le groupe d'Urbana [61, 62] a proposé un modèle réaliste permettant de décrire ces interactions à trois corps. Ce modèle comprend un terme attractif dû à l'échange de deux pions avec excitation d'une résonance Δ intermédiaire et un terme répulsif phénoménologique. Le formalisme de la méthode Bethe-Brueckner-Goldstone est basé sur les seules interactions à deux corps, il n'est donc pas possible d'inclure directement les interactions à trois corps. Cependant, en moyennant la position de la troisième particule selon la procédure de Lejeune *et al.* [63], l'interaction à trois corps peut être réduite en une interaction effective à deux corps dépendante de la densité. Il devient alors possible de tenir compte des effets de l'interaction à trois corps avec la méthode Bethe-Brueckner-Goldstone. La nouvelle équation d'état ainsi obtenue, notée "BBG+3C", est symbolisée par les carrés sur la Fig. II.4(a). Le point de saturation marqué par le carré rouge est cette fois contenu dans la zone empirique.

Enfin, l'équation d'état calculée par Friedman et Pandharipande [11] avec la méthode variationnelle correspond à la courbe avec les cercles. La prise en compte des interactions à trois corps dans la procédure variationnelle permet d'obtenir un point de saturation, indiqué par le cercle rouge, à l'intérieur de la zone empirique.

L'équation d'état calculée par la méthode Hartree-Fock et l'interaction effective de Gogny est représentée sur la Fig. II.4(b). Chacune des courbes correspond à une paramétrisation de l'interaction de Gogny, D1 (courbe verte), D1S (courbe bleue) et D1N (courbe rouge). Pour ces trois paramétrisations, les coordonnées du point de saturation ($\rho_0, E_0/A$) sont

bien comprises dans les limites empiriques matérialisées par les bords du rectangle jaune sur la Fig. II.4(b). Le Tab. II.3 montre que les incompressibilités obtenues avec les paramétrisations D1 et D1N sont presque égales, et supérieures à l'incompressibilité calculée avec la paramétrisation D1S : $K_{\infty}^{D1} \simeq K_{\infty}^{D1N} > K_{\infty}^{D1S}$. Cela se traduit, sur la Fig. II.4(b), par une remontée plus rapide en fonction de la densité des équations d'état calculées avec les paramétrisations D1 et D1N.

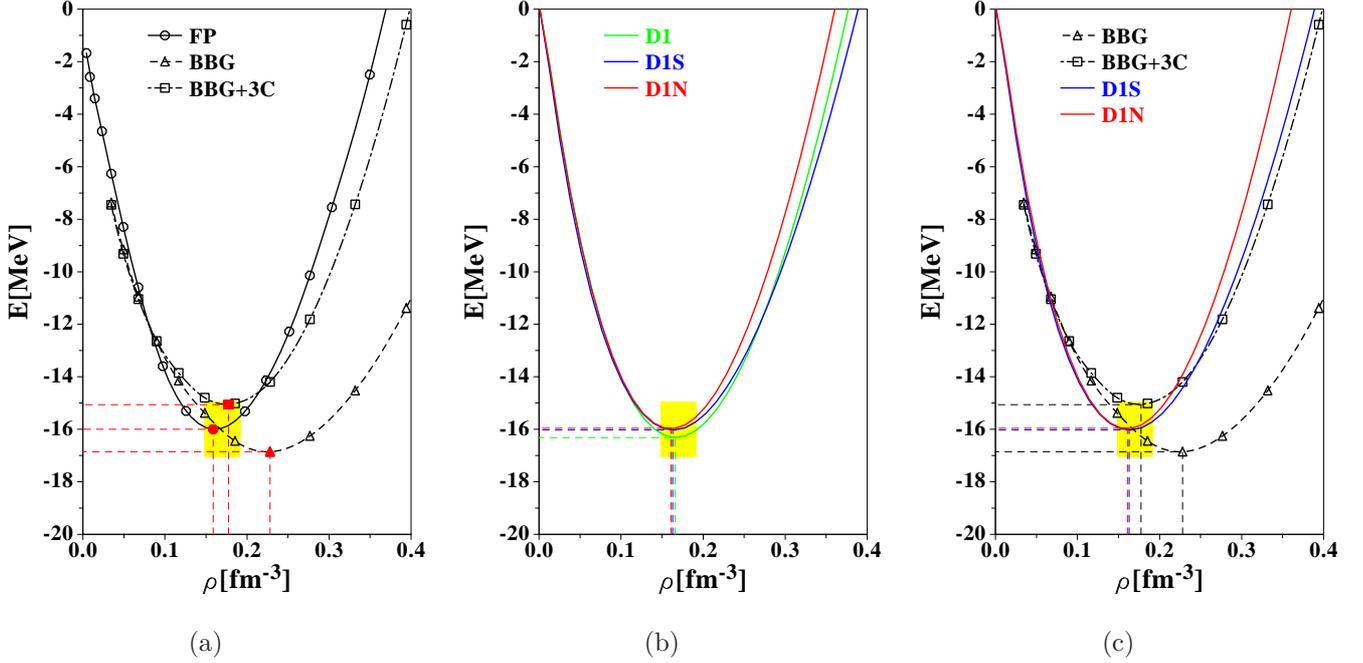


FIG. II.4 – Partie (a) : Equations d'état de la matière symétrique calculées par Friedman et Pandharipande [11] avec la méthode variationnelle (FP ou cercles) et par le groupe de Catane [58] avec la méthode Bethe-Brueckner-Goldstone (BBG ou triangles) qui peut inclure les effets des interactions à trois corps (BBG+3C ou carrés).

Partie (b) : Equations d'état de la matière symétrique calculées, à l'approximation Hartree-Fock, avec les interactions D1 (courbe verte), D1S (courbe bleue) et D1N (courbe rouge).

Partie (c) : Comparaison des équations d'état BBG, BBG+3C, D1S et D1N présentées sur les parties (a) et (b).

L'équation d'état montre comment évolue l'énergie par particule en fonction de la densité. Cette information, bien qu'intéressante, reste très générale. La séparation de l'énergie potentielle selon les sous-espaces de spin $S = 0, 1$ et d'isospin $T = 0, 1$ permet une analyse plus détaillée. Cette étude est réalisée sur les équations d'état calculées par la méthode Bethe-Brueckner-Goldstone sans et avec les interactions à trois corps, BBG et BBG+3C, et par la méthode Hartree-Fock avec les paramétrisations D1S et D1N. Ces quatre équations d'état sont reprises sur la Fig. II.4(c). Pour chacune de ces équations d'état, l'énergie par particule (E/A) se calcule comme la somme d'une contribution cinétique $(E/A)_{cin}$ et

d'une contribution potentielle $(E/A)_{pot}$,

$$\frac{E}{A} = \left(\frac{E}{A}\right)_{cin} + \left(\frac{E}{A}\right)_{pot}.$$

On peut développer la contribution potentielle $(E/A)_{pot}$ selon quatre composantes, notées $(E/A)_{pot}^{ST}$, caractérisées par les valeurs du spin S et de l'isospin T d'une paire de nucléons en interaction, $ST = 00, 01, 10, 11$. Ce développement prend la forme :

$$\left(\frac{E}{A}\right)_{pot} = \sum_{ST} \left(\frac{E}{A}\right)_{pot}^{ST}.$$

Les composantes $(E/A)_{pot}^{ST}$ sont représentées en fonction du moment de Fermi k_F sur la Fig. II.5 pour les quatre sous-espaces $ST = 00, 01, 10, 11$.

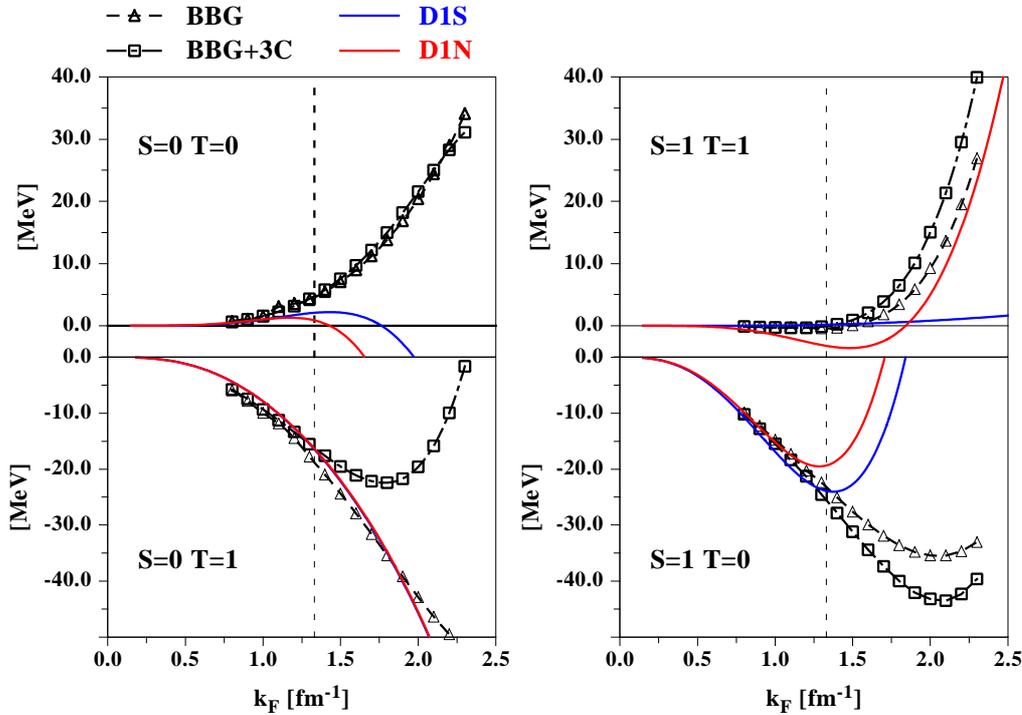


FIG. II.5 – Energie potentielle dans les différents sous-espaces ST pour D1S (courbe bleue) et D1N (courbe rouge). Les symboles (triangles et carrés) correspondent à des calculs de type Bethe-Brueckner-Goldstone sans et avec forces à 3 corps (BBG et BBG+3C). La ligne pointillée représente le point de saturation $k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$.

Dans le sous-espace $S=0, T=0$ (singulet-impair), les prédictions des calculs de type Bethe-Brueckner-Goldstone (BBG et BBG+3C) sont très similaires. La contribution des interactions à trois corps, prise en compte dans le calcul BBG+3C, est donc négligeable

dans ce sous-espace. Les courbes (BBG et BBG+3C) obtenues par la méthode Bethe-Brueckner-Goldstone présentent une légère répulsion, qui ne dépasse pas 40 MeV par particule à $k_F = 2.5 \text{ fm}^{-1}$. Les calculs Hartree-Fock réalisés avec l'interaction D1S prédisent une attraction à partir de $k_F = 1.8 \text{ fm}^{-1}$ en désaccord avec les contributions répulsives des calculs Bethe-Brueckner-Goldstone. Cette pathologie est aggravée avec l'interaction D1N, l'attraction apparaissant dès $k_F = 1.5 \text{ fm}^{-1}$.

Pour le sous-espace S=1, T=1 (triplet-impair), les résultats des calculs basés sur la méthode Bethe-Brueckner-Goldstone (BBG et BBG+3C) sont, encore une fois, très proches. Ils prédisent une contribution globalement répulsive dans ce sous-espace, sauf autour de la densité de saturation ($k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$) où une très légère attraction, inférieure à 500 keV par particule, est obtenue. La courbe calculée avec l'interaction D1S, légèrement répulsive à toutes les densités, est en accord qualitatif avec ces prédictions. Pour l'interaction D1N, la remontée de l'énergie potentielle observée au-delà de $k_F = 1.8 \text{ fm}^{-1}$ ressemble beaucoup aux prédictions des calculs de type Bethe-Brueckner-Goldstone. La contribution attractive de l'ordre de 3 MeV obtenue avec cette interaction à la densité de saturation ($k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$) est plus gênante. Elle est six fois plus forte que la légère attraction de 500 keV prédite par la méthode Bethe-Brueckner-Goldstone.

Le sous-espace S=0, T=1 (singulet-pair) permet de calibrer l'intensité de l'interaction d'appariement, il est donc de toute première importance. Les calculs de type Bethe-Brueckner-Goldstone sans interactions à trois corps (BBG) prédisent une attraction qui augmente avec la densité et atteint 15 MeV par particule à la saturation. Les calculs incluant l'effet des interactions à trois corps (BBG+3C) donnent un comportement attractif très similaire jusqu'à la densité de saturation. Au-delà de cette densité, la contribution des interactions à trois corps devient significative en produisant une répulsion d'autant plus forte que la densité augmente. C'est dans ce sous-espace que l'effet des interactions à trois corps sur les résultats Bethe-Brueckner-Goldstone est le plus net. Les contributions calculées avec les interactions D1S et D1N sont quasiment égales et les deux courbes correspondantes sur la Fig. II.5 sont confondues. Cela signifie que l'intensité de la force d'appariement est la même pour les interactions D1S et D1N. De plus, ces contributions sont relativement proches des prédictions de type Bethe-Brueckner-Goldstone sans interactions à trois corps (BBG).

Pour le sous-espace S=1, T=0 (triplet-pair), les résultats issus des calculs Bethe-Brueckner-Goldstone avec (BBG+3C) et sans (BBG) interactions à trois corps sont très ressemblants, ils prédisent une énergie potentielle attractive. Le comportement de cette énergie potentielle n'est pas monotone : décroissant jusqu'à $k_F = 2.1 \text{ fm}^{-1}$, il devient croissant au-delà. Ce changement de signe de la dérivée de l'énergie potentielle se produit bien avant, à $k_F = 1.3 \text{ fm}^{-1}$, avec les interactions D1S ou D1N. A la densité de saturation, l'interaction D1N donne une énergie potentielle de 4.8 MeV moins attractive que l'interaction D1S. Lorsqu'on somme les contributions des quatre sous-espaces, cette différence est en grande partie compensée par l'attraction supplémentaire que produit, autour de la densité de saturation, l'interaction D1N dans le canal S=1, T=1.

La différence principale entre les interactions D1S et D1N est que, pour la seconde, nous avons imposé une contrainte sur l'équation d'état de la matière neutronique. Comment cette différence se traduit-elle sur le comportement de l'énergie potentielle dans les quatre sous-espaces S,T ?

La matière neutronique ne contient qu'une seule espèce de particule, les neutrons. L'isospin total correspondant à une paire de neutrons en interaction vaut 1 ($T = 1$). L'isospin $T = 0$ est exclu car sa seule projection $M_T = 0$ fait intervenir deux particules différentes, un neutron et un proton. La contrainte sur l'équation d'état de la matière neutronique réagit donc sur les sous-espaces $T = 1$ seuls, S=0, T=1 et S=1, T=1.

La contribution dans le sous-espace S=0, T=1 est par ailleurs fixée par les exigences de l'appariement. Cela explique que, dans ce sous-espace, les contributions des interactions D1S et D1N soient proches au point d'être confondues sur la Fig. II.5.

Le sous-espace S=1, T=1 est donc le seul à être directement influencé par la contrainte sur l'équation d'état de la matière neutronique. Dans ce sous-espace, l'attraction de l'ordre de 3 MeV à la densité de saturation, ainsi que la forte remontée de l'énergie potentielle pour $k_F > 1.8 \text{ fm}^{-1}$, observées avec l'interaction D1N, sont des conséquences directes de la reproduction de l'équation d'état variationnelle (Friedman et Pandharipande) de la matière neutronique. Cette attraction de 3 MeV qui apparaît à la densité de saturation avec l'interaction D1N est en désaccord avec les contributions faibles (inférieures à 500 keV) prédites par les calculs de type Bethe-Brueckner-Goldstone. Pour corriger ce défaut de l'interaction D1N, il faut renoncer à la contrainte sur l'équation d'état de la matière neutronique.

Avec la forme analytique (I.1) de l'interaction de Gogny, on ne peut donc obtenir à la fois une bonne reproduction de l'équation d'état variationnelle de la matière neutronique et un bon accord, au moins autour de la densité de saturation, avec les calculs Bethe-Brueckner-Goldstone dans le sous-espace S=1, T=1. Cette rigidité s'explique par la présence de termes de portée nulle, le terme densité et le terme spin-orbite, dans l'expression (I.1) de l'interaction de Gogny. Pour faire évoluer cette expression vers une forme plus souple et plus réaliste, il faudrait donc affecter une portée finie, au sens de non-nulle, aux termes densité et spin-orbite de l'interaction de Gogny. L'étude de cette extension vers une portée finie est réalisée dans les chapitres suivants pour le terme densité.

II.1.2.2 – b Masses effectives neutron et proton dans la matière nucléaire asymétrique

La masse effective d'un nucléon est une propriété fondamentale pour caractériser sa propagation dans le milieu nucléaire [64, 65, 66]. Elle permet de décrire, au premier ordre, les effets de la non-localité du terme d'échange d'espace du potentiel à une particule.

La connaissance de la masse effective des nucléons dans la matière asymétrique riche en neutrons est cruciale pour la compréhension des propriétés des étoiles à neutrons [67, 68, 69]. Elle est également importante pour la description de la dynamique des collisions nucléaires [70, 71, 72, 73]. De plus, elle permet d'expliquer l'amplitude des effets de couche et les propriétés de base des noyaux loin de la vallée de stabilité [64].

Les masses effectives neutron m_n^*/m et proton m_p^*/m , égales dans la matière symétrique, peuvent être différentes dans la matière asymétrique riche en neutrons. On assiste donc à une séparation des masses effectives neutron et proton lorsque l'asymétrie du milieu augmente. Comment cette séparation se passe-t-elle dans la matière riche en neutrons ? La masse effective neutron devient-elle supérieure à la masse effective proton ou est-ce l'inverse ?

Les théories microscopiques, comme la théorie de Landau des liquides de Fermi [74] et l'approche Bethe-Brueckner-Goldstone [75, 76, 77], prédisent une masse effective neutron supérieure à la masse effective proton, $m_n^*/m > m_p^*/m$, dans la matière riche en neutrons. Cette prédiction est contestée par les méthodes de champ moyen relativiste [78] qui, après réduction non-relativiste, obtiennent $m_n^*/m < m_p^*/m$.

Cette contradiction a été levée par les calculs relativistes basés sur l'approche Dirac-Brueckner-Hartree-Fock [79]. Cette approche permet de prendre en compte explicitement la dépendance en impulsion de l'opérateur de masse, omise dans les méthodes de champ moyen relativiste. La prise en compte explicite de cette dépendance en impulsion inverse la séparation des masses effectives non-relativistes pour retrouver $m_n^*/m > m_p^*/m$.

Les différentes approches microscopiques, relativistes [79] et non-relativistes [75], s'accordent donc à prédire une masse effective neutron supérieure à la masse effective proton, $m_n^*/m > m_p^*/m$, dans la matière riche en neutrons.

La masse effective m_q^*/m du nucléon d'isospin $q = n, p$ peut également être calculée à partir du champ Hartree-Fock construit avec l'interaction de Gogny. L'expression analytique alors obtenue est développée en Annexe A, équation (A.36). Elle s'écrit dans le cas de la forme (I.1) de l'interaction de Gogny comme :

$$\left(\frac{m_q^*}{m}\right)^{-1} = 1 - \frac{4m}{\hbar^2} \sum_i \mu_i^2 \sum_{ST} \frac{1}{2T+1} \mathcal{B}_i^{ST} \frac{1}{(X_i^q)^3} (2T f_i(q, q) + f_i(q, -q)) , \quad (\text{II.4})$$

$$\text{avec :} \quad \mathcal{B}_i^{ST} = -\frac{(2S+1)(2T+1)}{16\sqrt{\pi}} (M_i + H_i(-1)^{S+1} - B_i(-1)^{T+1} - W_i(-1)^{T+S}) ,$$

$$f_i(q, q') = \left(1 - \frac{X_i^q X_i^{q'}}{2}\right) e^{-\left(\frac{X_i^q - X_i^{q'}}{2}\right)^2} - \left(1 + \frac{X_i^q X_i^{q'}}{2}\right) e^{-\left(\frac{X_i^q + X_i^{q'}}{2}\right)^2} ,$$

$$X_i^q = \mu_i k_F^q ,$$

k_F^q : le moment de Fermi pour l'isospin $q = n, p$,

m : la masse nue du nucléon.

La Fig. II.6 présente le comportement des masses effectives neutron (courbes en trait continu) et proton (courbes en trait pointillé) en fonction de l'asymétrie β du milieu. Les résultats obtenus avec les trois paramétrisations de l'interaction de Gogny correspondent aux courbes vertes pour D1, bleues pour D1S et rouges pour D1N. Les courbes noires (BHF-BBG) surmontées de symboles carrés représentent les prédictions microscopiques [75] de calculs basés sur l'approximation Brueckner-Hartree-Fock [1] et la théorie de Bethe-Brueckner-Goldstone.

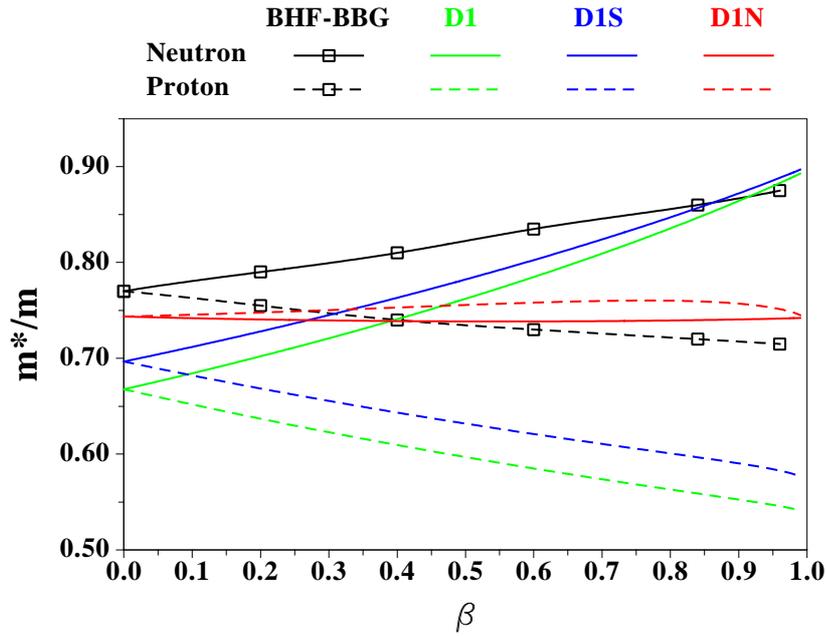


FIG. II.6 – Masses effectives neutron (courbes en trait continu) et proton (courbes en trait pointillé) représentées en fonction de l'asymétrie β . Nos calculs réalisés, à l'approximation Hartree-Fock, avec les paramétrisations D1, D1S et D1N sont comparés aux prédictions microscopiques [75] obtenues à l'approximation Brueckner-Hartree-Fock de la théorie de Bethe-Brueckner-Goldstone (BHF-BBG).

Les calculs microscopiques BHF-BBG prédisent une séparation des masses effectives telle que $m_n^*/m > m_p^*/m$, et qui atteint une amplitude maximale $(m_n^*/m - m_p^*/m) = 0.16$ dans la matière neutronique ($\beta = 1$). Les masses effectives calculées avec les interactions D1 et D1S présentent une séparation de même signe, $m_n^*/m > m_p^*/m$, mais d'amplitude plus grande. Pour l'asymétrie de la matière neutronique, $\beta = 1$, l'amplitude de séparation atteint la valeur 0.35 pour l'interaction D1 et 0.32 pour l'interaction D1S. Avec l'interaction D1N, une séparation de signe opposé est obtenue, $m_n^*/m < m_p^*/m$. Cette séparation reste de faible amplitude avec une valeur maximale $(m_n^*/m - m_p^*/m) = -0.02$ pour l'asymétrie $\beta = 0.75$. Dans la matière neutronique, les masses effectives neutron et proton calculées avec l'interaction D1N redeviennent quasiment égales.

Comparée aux interactions D1 et D1S, la nouvelle interaction D1N prédit donc un comportement très différent pour la séparation des masses effectives en fonction de l'asymétrie. Pour comprendre cette différence, il faut revenir à l'expression analytique (II.4) de la masse effective m_q^*/m avec $q = n, p$. Dans cette expression, les portées de l'interaction, $\{\mu_i\}_{i=1,2}$, interviennent notamment dans les coefficients $\{X_i^q\}_{i=1,2}$ et les fonctions $\{f_i(q, q')\}_{i=1,2}$. Or le Tab. II.2 montre que les portées μ_1 et μ_2 ne varient pas ou alors très peu d'une paramétrisation à l'autre de l'interaction de Gogny,

$$\mu_1^{D1} = \mu_1^{D1S} \simeq \mu_1^{D1N} \quad \text{et} \quad \mu_2^{D1} = \mu_2^{D1S} = \mu_2^{D1N} .$$

Cela implique que les coefficients $\{X_i^q\}_{i=1,2}$ et les fonctions $\{f_i(q, q')\}_{i=1,2}$ ne seront pas ou très peu modifiés selon la paramétrisation utilisée. Dans l'expression (II.4) de la masse effective, les seules quantités qui vont réellement dépendre de la paramétrisation sont donc les combinaisons linéaires de paramètres $\{\mathcal{B}_i^{ST}\}_{i=1,2}^{ST=00,01,10,11}$. Dans le cas de la paramétrisation D1N, les valeurs de ces combinaisons de paramètres ont été affectées par la contrainte sur l'équation d'état variationnelle de la matière neutronique. Cette nouvelle contrainte semble donc être à l'origine de la séparation inversée, $m_n^*/m < m_p^*/m$, des masses effectives.

Cet exemple témoigne, une fois de plus, de la rigidité de la forme analytique (I.1) de l'interaction de Gogny. Avec cette forme, il est très délicat d'obtenir une paramétrisation qui reproduise, d'une part, l'équation d'état variationnelle de la matière neutronique, et, d'autre part, l'ordre de séparation des masses effectives, $m_n^*/m > m_p^*/m$, prédit par les approches microscopiques. Nous aurons l'occasion de montrer, dans les chapitres suivants, que ce problème peut être résolu en faisant évoluer le terme densité de portée nulle de l'expression (I.1) de l'interaction de Gogny vers une portée finie.

II.1.2.2 – c L'énergie de symétrie en fonction de la densité

La dépendance en densité de l'énergie de symétrie joue un rôle important dans la description de la structure des noyaux radioactifs [80, 81, 82, 83], mais aussi dans la modélisation de processus astrophysiques [67, 84], comme la nucléosynthèse dans les supernova par exemple. Les formules de masse semi-empiriques [31, 85], basées sur le modèle de la goutte liquide du noyau, permettent de déduire la valeur de l'énergie de symétrie à la densité de saturation, $a_\tau = E_{sym}(\rho_0) = 30 \pm 2$ MeV. Pour les autres densités, en revanche, sa valeur est très mal connue [86, 87]. Les études basées sur les approches microscopiques ou phénoménologiques donnent en effet des prédictions très différentes pour la dépendance en densité de l'énergie de symétrie [88].

Expérimentalement, les réactions induites par faisceaux radioactifs [89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99] se sont révélées très utiles pour extraire des informations sur la dépendance en densité de l'énergie de symétrie. En particulier, dans les collisions d'ions

lourds, les modèles de transport basés sur le formalisme de Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck (BUU) [100, 86] ont montré que la diffusion de l'isospin est très sensible à la forme de la dépendance en densité de l'énergie de symétrie [101, 102, 103]. Avec un modèle de transport indépendant de l'impulsion, M.B. Tsang *et al.* [104] ont trouvé que les données de diffusion d'isospin issues d'expériences récentes étaient correctement reproduites avec une dépendance en densité quadratique de l'énergie de symétrie. L'étude plus complète de Chen *et al.* [105], incluant une dépendance en impulsion dans le potentiel nucléaire, favorise une dépendance en densité de la forme $E_{sym}(\rho) \simeq 31.6 (\rho/\rho_0)^{1.05}$.

Dans un autre type d'approche, Shetty *et al.* [106] ont montré, à partir de simulations de dynamique moléculaire [107], que les taux de production expérimentaux de fragments favorisaient une dépendance en densité de l'énergie de symétrie de la forme $E_{sym}(\rho) \simeq 31.6 (\rho/\rho_0)^{0.69}$.

La comparaison des études, basées sur les collisions d'ions lourds, de Chen *et al.* et de Shetty *et al.* suggère une dépendance de la forme $E_{sym}(\rho) \simeq 31.6 (\rho/\rho_0)^\gamma$ avec $\gamma \in [0.6, 1.05]$.

Cette paramétrisation de l'énergie de symétrie en fonction de la densité est représentée par les courbes noires sur la Fig. II.7(b) pour les deux cas limites $\gamma = 0.6$ et $\gamma = 1.05$.

La paramétrisation correspondant à $\gamma = 1.05$ a été déduite de l'étude de la diffusion d'isospin dans les expériences de collision. Les modèles de transport montrent que la diffusion d'isospin a principalement lieu au cours de la phase d'expansion du système, lorsque la densité est inférieure à la densité de saturation. Aussi, la paramétrisation de l'énergie de symétrie associée à $\gamma = 1.05$ n'est valable qu'aux densités inférieures à la densité de saturation, $\rho \leq \rho_0$. C'est la raison pour laquelle nous avons limité le domaine de densités à $\rho \in [0, \rho_0]$ sur la Fig. II.7(b).

Sur cette même figure, la dépendance en densité de l'énergie de symétrie calculée avec les interactions D1S (courbe bleue) et D1N (courbe rouge) est également représentée. Aux basses densités, $\rho \leq 0.7\rho_0$, l'interaction D1N prédit une énergie de symétrie très similaire à la paramétrisation correspondant à $\gamma = 0.6$. L'énergie de symétrie obtenue avec cette interaction reste donc en accord avec les données expérimentales sur les collisions d'ions lourds. Pour l'interaction D1S, présentant des valeurs plus élevées de l'énergie de symétrie dans le domaine $\rho \leq \rho_0$, l'accord avec les paramétrisations associées à $\gamma = 0.6$ ou $\gamma = 1.05$ est moins bon.

Les différences entre les énergies de symétrie calculées avec les interactions D1S et D1N s'expliquent très bien avec l'approximation parabolique (II.2). Dans le cas particulier de la matière neutronique, cette approximation donne, selon l'équation (II.3),

$$E_{sym}(\rho) = \frac{E}{A}(\rho, 1) - \frac{E}{A}(\rho, 0) . \quad (\text{II.5})$$

Les équations d'état de la matière neutronique, $\frac{E}{A}(\rho, 1)$, et de la matière nucléaire symétrique, $\frac{E}{A}(\rho, 0)$, sont reprises sur la Fig. II.7(a) pour les interactions D1S et D1N. Dans le domaine de densités $\rho \in [0, \rho_0]$, les équations d'état de la matière nucléaire symétrique sont très proches pour ces deux interactions, $(E/A)^{D1S}(\rho, 0) \simeq (E/A)^{D1N}(\rho, 0)$.

L'équation (II.5) montre alors que la différence des énergies de symétrie, $E_{sym}^{D1S}(\rho)$ et $E_{sym}^{D1N}(\rho)$, des interactions D1S et D1N est reliée aux équations d'état de la matière neutronique $(E/A)^{D1S}(\rho, 1)$ et $(E/A)^{D1N}(\rho, 1)$ de la manière suivante :

$$E_{sym}^{D1S}(\rho) - E_{sym}^{D1N}(\rho) = \left(\frac{E}{A}\right)^{D1S}(\rho, 1) - \left(\frac{E}{A}\right)^{D1N}(\rho, 1) .$$

Dans le domaine des basses densités, $\rho \leq \rho_0$, la reproduction de l'équation d'état variationnelle de la matière neutronique avec l'interaction D1N est donc à l'origine des différences entre les énergies de symétrie des interactions D1S et D1N.

L'allure de l'énergie de symétrie est représentée dans un domaine de densités plus large, $\rho \in [0, 4.5\rho_0]$, sur la Fig. II.7(c). Aux hautes densités, les énergies de symétrie calculées avec les interactions D1S et D1N deviennent négatives.

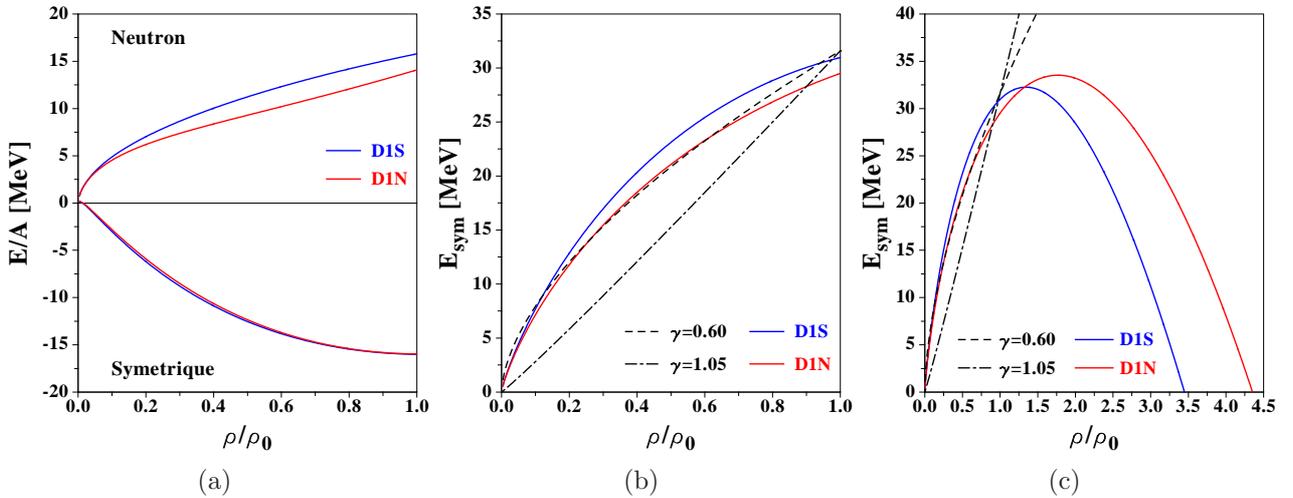


FIG. II.7 – Partie (a) : Equations d'état de la matière neutronique et de la matière symétrique calculées avec les interactions D1S et D1N.

Parties (b) et (c) : Energie de symétrie représentée en fonction de la densité. Les résultats obtenus avec les interactions D1S et D1N sont comparés à la forme paramétrisée $E_{sym}(\rho) \simeq 31.6(\rho/\rho_0)^\gamma$, avec $\gamma \in [0.6, 1.05]$, proposée par Shetty *et al.* [106].

II.2 Structure des noyaux finis avec D1N

II.2.1 Masse effective et états à une particule

II.2.1.1 Dans la matière nucléaire

Dans la matière nucléaire infinie, la masse effective m_q^* d'un nucléon d'isospin q , calculée au niveau de Fermi caractérisé par l'impulsion k_{Fq} , s'exprime :

$$\frac{1}{m_q^*} = \frac{1}{\hbar^2 k} \frac{d\varepsilon_{k,q}}{dk} \Big|_{k=k_{Fq}} .$$

Dans cette expression, $\varepsilon_{k,q}$ représente l'énergie d'un nucléon d'impulsion k et d'isospin q . Nous souhaitons montrer comment, dans la matière nucléaire infinie, la densité d'états à une particule peut être reliée à la masse effective. Pour calculer la densité d'états, il faut d'abord compter le nombre $N_{k,q}$ d'états d'impulsion k' inférieure à k pour l'isospin q ,

$$N_{k,q} = 2 \int_0^k 4\pi k'^2 dk' = \frac{8}{3}\pi k^3 ,$$

où le facteur 2 devant l'intégrale tient compte de la dégénérescence de spin. La densité d'états, pour l'isospin q , au niveau de Fermi d'impulsion k_{Fq} et d'énergie $\varepsilon_{F,q} \equiv \varepsilon_{k_{Fq},q}$ se calcule alors comme :

$$\begin{aligned} g_q(\varepsilon_{F,q}) &= \frac{dN_{k,q}}{d\varepsilon_{k,q}} \Big|_{k=k_{Fq}} \\ &= \frac{dN_{k,q}}{dk} \frac{dk}{d\varepsilon_{k,q}} \Big|_{k=k_{Fq}} \\ &= 8\pi \left(\frac{m}{\hbar^2}\right) \left(\frac{m_q^*}{m}\right) k_{Fq} \\ &= 8\pi \left(\frac{m}{\hbar^2}\right) \left(\frac{m_q^*}{m}\right) (3\pi^2 \rho_q)^{1/3} , \end{aligned} \tag{II.6}$$

où nous avons fait apparaître la masse m du nucléon dans le vide et la densité de matière pour l'isospin q , $\rho_q = \frac{k_{Fq}^3}{3\pi^2}$.

L'expression (II.6) montre que la densité d'états $g(\varepsilon_{F,q})$ est proportionnelle à la masse effective (m_q^*/m). Dans la partie suivante, nous comparons les densités d'états obtenues dans les noyaux finis avec les interactions D1S et D1N. Pour cette étude, il est utile de définir le rapport $\frac{g_q^{D1S}(\varepsilon_{F,q})}{g_q^{D1N}(\varepsilon_{F,q})}$ des densités d'états calculées, pour l'isospin q , avec les interactions D1S et D1N. L'expression (II.6) montre que, à une densité de matière ρ_q fixée, ce rapport est égal celui des masses effectives correspondantes :

$$\frac{g_q^{D1S}(\varepsilon_{F,q})}{g_q^{D1N}(\varepsilon_{F,q})} = \frac{(m_q^*/m)^{D1S}}{(m_q^*/m)^{D1N}} . \tag{II.7}$$

II.2.1.2 Dans les noyaux finis

N.B. : Dans cette partie, la différence d'énergie entre le premier état inoccupé et le dernier état occupé de part et d'autre du niveau de Fermi sera appelée "gap au niveau de Fermi" et notée ΔE_F . Si nécessaire, on pourra distinguer l'isospin en parlant de "gap proton" et "gap neutron" notés ΔE_{Fp} et ΔE_{Fn} , ou encore sous la forme générique ΔE_{Fq} avec $q = p, n$.

Dans les noyaux finis, la densité d'états, $g_q(\varepsilon_{F,q})$, à l'énergie de Fermi pour l'isospin q est proportionnelle à l'inverse du gap ΔE_{Fq} au niveau de Fermi de cet isospin,

$$g_q(\varepsilon_{F,q}) \propto \frac{1}{\Delta E_{Fq}}.$$

Le gap au niveau de Fermi, ΔE_{Fq} , peut alors être utilisé pour réécrire la relation (II.7) sous la forme

$$\frac{\Delta E_{Fq}^{D1N}}{\Delta E_{Fq}^{D1S}} = \frac{(m_q^*/m)^{D1S}}{(m_q^*/m)^{D1N}}. \quad (\text{II.8})$$

Cette relation va nous permettre d'expliquer les différences entre les spectres d'états à une particule des interactions D1S et D1N à partir des valeurs des masses effectives de ces deux interactions.

Cette étude ne se limite pas aux noyaux symétriques pour lesquels les nombres de neutrons et de protons, N et Z , sont égaux, $N = Z$. Aussi, pour prendre en compte les noyaux asymétriques ($N \neq Z$), nous avons introduit un paramètre supplémentaire, l'asymétrie $\beta = \frac{N-Z}{N+Z}$.

Les courbes de séparation des masses effectives neutron et proton en fonction de ce paramètre d'asymétrie β , déjà présentées sur la Fig. II.6, sont reprises ici sur la Fig. II.8(a) pour les interactions D1S et D1N. Les lignes verticales indiquent les asymétries de trois noyaux, le ^{90}Zr , le ^{208}Pb et le ^{244}Pu . Le ^{244}Pu n'est pas un noyau sphérique, son spectre d'états à une particule sera présenté plus loin, dans la partie consacrée à la caractérisation des corrélations d'appariement par les moments d'inertie.

Les trois autres figures II.8(b), II.8(c) et II.8(d) présentent les spectres d'états à une particule autour du niveau de Fermi pour les noyaux de ^{40}Ca , ^{90}Zr et ^{208}Pb . Pour chaque isospin, proton et neutron, les spectres théoriques calculés par la méthode Hartree-Fock avec les interactions D1S et D1N sont comparés au spectre expérimental. Les différents spectres expérimentaux sont tirés des Réf. [108, 109, 110, 111, 44]. Le gap ΔE_{Fq} au niveau de Fermi, symbolisé par les flèches, est donné en MeV.

Pour le noyau symétrique de ^{40}Ca , les masses effectives neutron et proton sont égales, $m^*/m = m_n^*/m = m_p^*/m$. Leur valeur commune m^*/m a été reportée dans le Tab. II.3 pour les interactions D1S et D1N, $(m^*/m)^{D1S} = 0.70$ et $(m^*/m)^{D1N} = 0.74$.

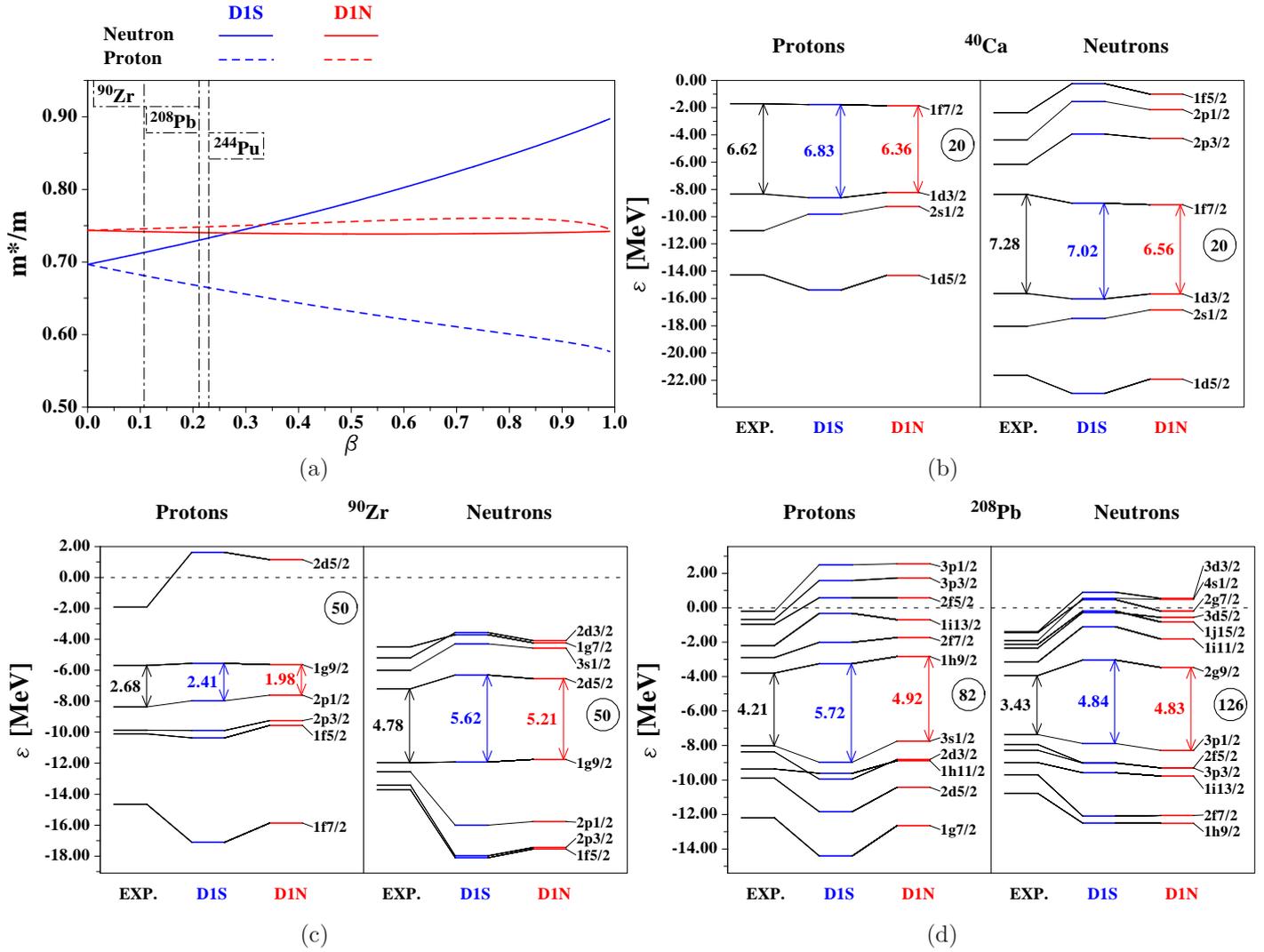


FIG. II.8 – Partie (a) : Comportement des masses effectives neutron et proton en fonction de l'asymétrie β pour les paramétrisations D1S et D1N. Parties (b), (c) et (d) : Spectres d'états à une particule calculés à l'approximation Hartree-Fock avec les paramétrisations D1S et D1N dans les cas de trois noyaux, le ^{40}Ca , le ^{90}Zr et le ^{208}Pb . Les spectres d'états expérimentaux, notés EXP, sont également représentés.

Dans la matière symétrique, la relation (II.8) devient indépendante de l'isospin q et peut s'écrire

$$\frac{\Delta E_F^{D1N}}{\Delta E_F^{D1S}} = \frac{(m^*/m)^{D1S}}{(m^*/m)^{D1N}} = \frac{0.70}{0.74} \simeq 0.946 .$$

Le rapport entre les gaps ΔE_F^{D1N} et ΔE_F^{D1S} déduit de la relation (II.8) et des valeurs des masses effectives est donc égal à 0.946. Comment cette estimation se compare-t-elle aux gaps réellement obtenus au niveau de Fermi par un calcul Hartree-Fock avec les interactions D1S et D1N? Les spectres à une particule obtenus par un tel calcul sont présentés sur la Fig. II.8(b). Ils indiquent un rapport $\frac{6.36}{6.83} \simeq 0.931$ pour les protons et $\frac{6.56}{7.02} \simeq 0.934$ pour les neutrons. Il y a donc une différence de $\frac{0.946-0.931}{(0.946+0.931)/2} \simeq 1.6\%$ entre

notre estimation déduite des valeurs des masses effectives et le calcul Hartree-Fock réel. Cet exemple montre que la relation (II.8), sans être exacte, permet d'obtenir une estimation de très bonne qualité des gaps ΔE_F au niveau de Fermi.

Le noyau de ^{90}Zr présente une légère asymétrie, $\beta \simeq 0.11$. La Fig. II.8(a) montre que, à cette asymétrie, les masses effectives neutron et proton se séparent nettement avec l'interaction D1S, $(m_n^*/m)^{D1S} = 0.71$ et $(m_p^*/m)^{D1S} = 0.68$, alors qu'elles restent encore très proches avec l'interaction D1N, $(m_n^*/m)^{D1N} \simeq (m_p^*/m)^{D1N} \simeq 0.74$. Avec ces valeurs de masse effective, la relation (II.8) donne pour les gaps neutron et proton des interactions D1S et D1N :

$$\frac{\Delta E_{Fn}^{D1N}}{\Delta E_{Fn}^{D1S}} = \frac{(m_n^*/m)^{D1S}}{(m_n^*/m)^{D1N}} = \frac{0.71}{0.74} \simeq 95.9\% ,$$

$$\frac{\Delta E_{Fp}^{D1N}}{\Delta E_{Fp}^{D1S}} = \frac{(m_p^*/m)^{D1S}}{(m_p^*/m)^{D1N}} = \frac{0.68}{0.74} \simeq 91.9\% .$$

Pour les neutrons, le gap obtenu avec l'interaction D1N est donc réduit de 4.1% par rapport à celui calculé avec l'interaction D1S. Pour les protons, cette réduction est presque *deux* fois plus forte, elle atteint 8.1%. Ces prédictions, basées sur les valeurs des masses effectives, sont en accord avec le spectre obtenu par un calcul Hartree-Fock et représenté sur la Fig. II.8(c). Ce spectre montre que, pour les protons, le gap passe de 2.41 MeV pour l'interaction D1S à 1.98 MeV pour l'interaction D1N, soit une réduction de $(1 - \frac{1.98}{2.41}) = 17.8\%$ qui est environ *deux* fois plus importante que celle observée pour les neutrons, $(1 - \frac{5.21}{5.62}) = 7.3\%$.

Enfin, le noyau de ^{208}Pb présente l'asymétrie la plus forte, $\beta = 0.21$. A cette asymétrie, les masses effectives neutron des interactions D1S et D1N sont presque égales, $(m_n^*/m)^{D1S} = 0.73$ et $(m_n^*/m)^{D1N} = 0.74$. Pour les protons, la masse effective calculée avec l'interaction D1S est nettement plus petite, $(m_p^*/m)^{D1S} = 0.67$ contre $(m_p^*/m)^{D1N} = 0.75$. Ces masses effectives permettent, avec la relation (II.8), d'estimer le rapport entre les gaps des interactions D1S et D1N,

$$\frac{\Delta E_{Fn}^{D1N}}{\Delta E_{Fn}^{D1S}} = \frac{(m_n^*/m)^{D1S}}{(m_n^*/m)^{D1N}} = \frac{0.73}{0.74} \simeq 98.6\% ,$$

$$\frac{\Delta E_{Fp}^{D1N}}{\Delta E_{Fp}^{D1S}} = \frac{(m_p^*/m)^{D1S}}{(m_p^*/m)^{D1N}} = \frac{0.67}{0.75} \simeq 89.3\% .$$

A cause des masses effectives neutron presque identiques pour les interactions D1S et D1N, les gaps ΔE_{Fn}^{D1S} et ΔE_{Fn}^{D1N} estimés pour ces deux interactions sont quasiment égaux, ils diffèrent de seulement 1.4%. Le calcul Hartree-Fock du spectre neutronique, représenté sur la Fig. II.8(d), valide cette estimation en donnant des gaps neutrons égaux à 10 keV près, 4.84 MeV et 4.83 MeV, pour les interactions D1S et D1N. Pour les protons, les estimations basées sur les valeurs des masses effectives prédisent une réduction du gap de 10.7% avec l'interaction D1N par rapport à l'interaction D1S. La Fig. II.8(d) montre que le calcul Hartree-Fock donne une réduction du même ordre de grandeur, $(1 - \frac{4.92}{5.72}) = 14.0\%$, entre les gaps des interactions D1S et D1N.

La relation (II.8) entre les gaps au niveau de Fermi et les masses effectives des interactions D1S et D1N a été dérivée dans la partie II.2.1.1 à partir de considérations sur la matière nucléaire infinie. Cette relation s'est révélée très utile dans l'interprétation des spectres d'états à une particule calculés par la méthode Hartree-Fock dans les cas de trois noyaux sphériques, le ^{40}Ca , le ^{90}Zr et le ^{208}Pb .

Dans la discussion précédente des valeurs des gaps au niveau de Fermi, nous avons comparé les prédictions théoriques entre elles sans faire référence aux spectres expérimentaux. Pour le ^{40}Ca et le ^{90}Zr , les Fig.II.8(b) et II.8(c), montrent que les valeurs expérimentales des gaps sont reproduites, à une précision de 1 MeV, par les calculs théoriques avec les interactions D1S et D1N. Pour le ^{208}Pb , les différences entre les valeurs théoriques et expérimentales des gaps sont plus importantes. Par exemple, pour les neutrons, les calculs Hartree-Fock avec les interactions D1S et D1N prédisent une valeur théorique du gap de $4.83 - 4.84$ MeV, soit 1.4 MeV supérieure à la valeur expérimentale de 3.43 MeV. Il est connu [112, 113] que la prise en compte, dans la théorie, des corrélations induites par l'interaction résiduelle, comme le couplage particule-vibration par exemple, produit une diminution significative de la valeur Hartree-Fock du gap au niveau de Fermi. Aussi, il n'est pas réhibitoire d'obtenir, à l'approximation Hartree-Fock, une valeur théorique du gap supérieure de 1 ou 2 MeV à la valeur expérimentale.

II.2.2 La caractérisation des corrélations d'appariement

II.2.2.1 Par l'oscillation de masses pair-impair

Le terme *oscillation de masses pair-impair* qualifie la variation de l'énergie de liaison entre deux systèmes, l'un contenant un nombre pair de particules et l'autre un nombre impair. Plus précisément, l'énergie de liaison (quantité positive) d'un système possédant un nombre impair de particules est inférieure à la moyenne arithmétique des énergies des deux systèmes voisins possédant un nombre pair de particules. Ce phénomène est une caractéristique commune à de nombreux systèmes finis de plusieurs fermions tels que les noyaux [114], les grains supraconducteurs [115] ou encore les clusters métalliques [116].

Dans les noyaux atomiques, l'oscillation de masses pair-impair est interprétée comme la manifestation des corrélations d'appariement [21, 117]. Cependant, Häkkinen *et al.* [118] ont montré que dans les systèmes légers, tels que les clusters metal-alkali et les noyaux $N = Z$, l'oscillation de masses pair-impair n'était pas une manifestation des corrélations d'appariement, mais plutôt une conséquence de la déformation des orbitales individuelles (effet Jahn-Teller) [119, 120, 121].

A la suite de ce travail, Satula *et al.* [122] ont entrepris une étude microscopique, basée sur des calculs auto-cohérents avec des interactions de Skyrme, pour séparer les contributions de champ moyen et d'appariement dans l'oscillation de masses pair-impair. Cette étude a permis de déterminer que la différence de masses à trois points $\Delta^{(3)}(A)$ centrée sur un noyau ayant un nombre *impair* A de nucléons était une bonne mesure des corrélations d'appariement. Les différences de masses sont très utilisées pour caractériser l'oscillation de masses pair-impair. La différence de masses à trois points est construite comme une combinaison des énergies de liaison (négatives) $E(A-1)$, $E(A)$ et $E(A+1)$ des noyaux contenant $A-1$, A et $A+1$ nucléons,

$$\Delta^{(3)}(A) = \frac{(-1)^A}{2} [E(A+1) - 2E(A) + E(A-1)] .$$

Lorsque A est impair, on dit que cette différence de masse est centrée sur un noyau impair, dans le cas contraire, on parle de différence de masse centrée sur un noyau pair.

Des différences de masses à plus grand nombre de points peuvent aussi être définies. Par exemple, la différence de masse à cinq points prend la forme :

$$\Delta^{(5)}(A) = -\frac{(-1)^A}{8} [E(A+2) - 4E(A+1) + 6E(A) - 4E(A-1) + E(A-2)] .$$

L'étude de T. Duguet *et al.* [123], prenant en compte la brisure de la symétrie par renversement du sens du temps, privilégie la différence de masses à trois points $\Delta^{(3)}(A)$, A impair, par rapport à celle à cinq points $\Delta^{(5)}(A)$, A impair, pour extraire la valeur du gap d'appariement. Pour quantifier les corrélations d'appariement, nous utiliserons donc la différence de masses à trois points $\Delta^{(3)}(A)$ centrée sur un noyau avec un nombre impair A de nucléons.

Il reste à choisir l'élément de la charte des noyaux auquel nous allons nous intéresser. L'Étain semble un très bon candidat. Cet élément possède un grand nombre d'isotopes dont les énergies de liaison ont été mesurées expérimentalement [15]. De plus, son nombre magique de protons, $Z = 50$, correspondant à la fermeture de la couche $1g_{9/2}$, garantit que seuls les neutrons participeront aux corrélations d'appariement.

La différence de masses à trois points $\Delta^{(3)}(A)$, A impair, calculée dans la chaîne isotopique de l'Étain permet donc une évaluation du gap d'appariement neutron. Celle-ci est représentée, de ^{111}Sn à ^{125}Sn , sur la Fig. II.9(a).

Cette figure compare trois calculs de la différence de masses à trois points. L'un est réalisé à partir des énergies de liaison expérimentales [15] et correspond à la courbe noire. Les deux autres sont basés sur les énergies de liaison théoriques, évaluées à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov avec blocking, pour les interactions D1S (courbe bleue) et D1N (courbe rouge).

Les différences de masses expérimentales restent à peu près constantes autour de 1.2-1.3 MeV, sauf pour $A = 115$ où la courbe présente un creux de 200-300 keV. Ce creux traduit une diminution de l'appariement dans l'un des deux noyaux pair-pair voisins, $A = 114$ ou $A = 116$. En l'occurrence, c'est l' ^{114}Sn pour lequel les corrélations d'appariement diminuent le plus fortement. Ceci s'explique par la fermeture de la sous-couche $1g_{7/2}$ qui a lieu pour $N = 64$ neutrons.

Cette diminution de l'appariement autour de $A = 115$ est bien reproduite par les différences de masses théoriques obtenues avec les interactions D1S et D1N. Cependant les estimations théoriques surestiment de 200 à 300 keV la courbe expérimentale. Il ne faut toutefois pas en déduire que la théorie surévalue d'autant le gap d'appariement neutron. En effet, l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov avec blocking ne permet pas une description fine de la structure des noyaux impairs. En particulier, le couplage particule-vibrations entre le nucléon célibataire et les vibrations de la surface du noyau n'est pas pris en compte par cette approximation. Dans les noyaux impairs, ce couplage peut apporter un supplément d'énergie de liaison qui est évalué à 200 ou 300 keV. On constate que, si l'on corrige d'autant les énergies de liaison des noyaux impairs évaluées avec la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov avec blocking, les courbes théoriques obtenues avec les interactions D1S et D1N sont abaissées de 200 ou 300 keV et deviennent alors très proches de la courbe expérimentale.

L'information importante que l'on souhaite dégager de la Fig. II.9(a) reste que les différences de masses à trois points calculées avec les interactions D1S et D1N sont très similaires de l' ^{111}Sn à l' ^{125}Sn . La description des corrélations d'appariement neutron avec l'interaction D1N est donc d'aussi bonne qualité qu'avec l'interaction D1S.

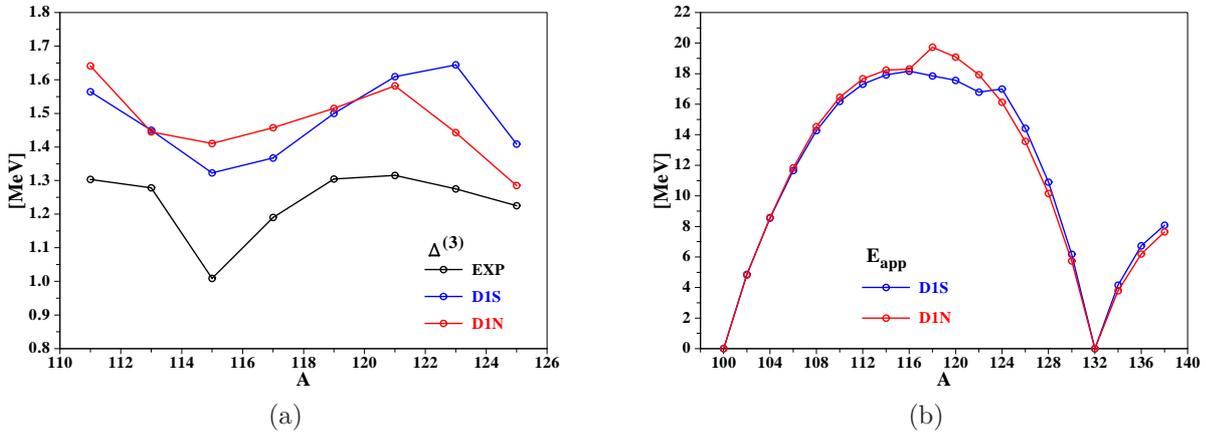


FIG. II.9 – Partie (a) : Différences de masses pair-impair $\Delta^{(3)}$ en fonction du nombre de nucléons A dans la chaîne isotopique de l'étain. Les résultats obtenus avec les paramétrisations D1S et D1N sont comparés aux données expérimentales (EXP).

Partie (b) : Énergie d'appariement neutron E_{app} en fonction du nombre de nucléons A dans la chaîne isotopique de l'étain. Les calculs réalisés avec les paramétrisations D1S et D1N sont présentés.

Cette conclusion est confirmée par l'étude de l'énergie d'appariement neutron dans la chaîne isotopique de l'Étain. Dans la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov, l'énergie d'appariement E_{App} est définie comme

$$E_{App} = \frac{1}{4} \sum_{abcd} \langle a\bar{c} | \hat{v}_{12}^{(a)} | b\bar{d} \rangle 2s_c 2s_d \kappa_{ca} \kappa_{db}$$

- avec $\hat{v}_{12}^{(a)}$: l'interaction antisymétrisée,
 a, b, c, d : états quantiques d'une base donnée, par exemple, la base des états propres de l'oscillateur harmonique incluant le spin et l'isospin,
 $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}$: états quantiques obtenus à partir des états a, b, c, d par l'opération de renversement du sens du temps,
 s_a, s_b, s_c, s_d : spins intrinsèques des états a, b, c, d ,
 κ_{ca}, κ_{db} : éléments de matrice ca et db du tenseur d'appariement.

Sur la Fig. II.9(b), l'énergie d'appariement neutron est représentée, en valeur absolue, pour les noyaux pair-pair de l' ^{100}Sn à l' ^{138}Sn avec les interactions D1S (courbe bleue) et D1N (courbe rouge). L'énergie d'appariement n'est pas une observable, aussi, il n'est pas possible d'accéder à cette quantité par la mesure. Nos résultats théoriques ne peuvent donc être confrontés à l'expérience. Malgré cela, la Fig. II.9(b) reste instructive. Elle montre que les énergies d'appariement neutron obtenues avec les interactions D1S et D1N sont très proches tout au long de la chaîne isotopique. Comme on s'y attend, l'énergie d'appariement s'annule aux nombres magiques de neutrons $N = 50$ et $N = 82$.

L'étude des différences de masses à trois points et des énergies d'appariement dans la chaîne isotopique de l'Étain montre que les interactions D1S et D1N donnent des descriptions très similaires des corrélations d'appariement neutron. Cela peut sembler *a priori* étonnant. Le Tab. II.3 indique que la masse effective obtenue avec l'interaction D1N, $(m^*/m)^{D1N} = 0.74$, est plus grande qu'avec l'interaction D1S, $(m^*/m)^{D1S} = 0.70$. La densité d'états à une particule au niveau de Fermi devrait donc être supérieure avec l'interaction D1N et le spectre d'états à une particule plus comprimé.

La Fig. II.10(a) montre cette compression du spectre d'états à une particule lorsqu'on passe de l'interaction D1S à l'interaction D1N. Sur cette figure, nous avons représenté les énergies des états à une particule neutron, ε_n , obtenues avec les interactions D1S (en rouge) et D1N (en bleu). Le niveau de Fermi est symbolisé par un triangle. Ces spectres d'états à une particule sont donnés pour plusieurs noyaux pair-pair de la chaîne isotopique de l'Étain, de l' ^{110}Sn à l' ^{126}Sn . Sur la figure, ces noyaux sont repérés par leur nombre de neutrons N . Pour tous ces noyaux, la compression du spectre se manifeste, en particulier, par la réduction du gap $N = 64$ entre les couches $1g_{7/2}$ et $3s_{1/2}$, lorsqu'il est calculé avec l'interaction D1N.

Un spectre d'états plus comprimé, tel que celui obtenu avec l'interaction D1N, favorise la diffusion des paires de Cooper vers les états inoccupés, au-dessus du niveau de Fermi. Ainsi, avec cette interaction, les corrélations d'appariement devraient se développer plus facilement qu'avec l'interaction D1S. C'est la raison de notre remarque précédente selon laquelle il est *a priori* étonnant de retrouver des corrélations d'appariement très semblables avec les interactions D1S et D1N.

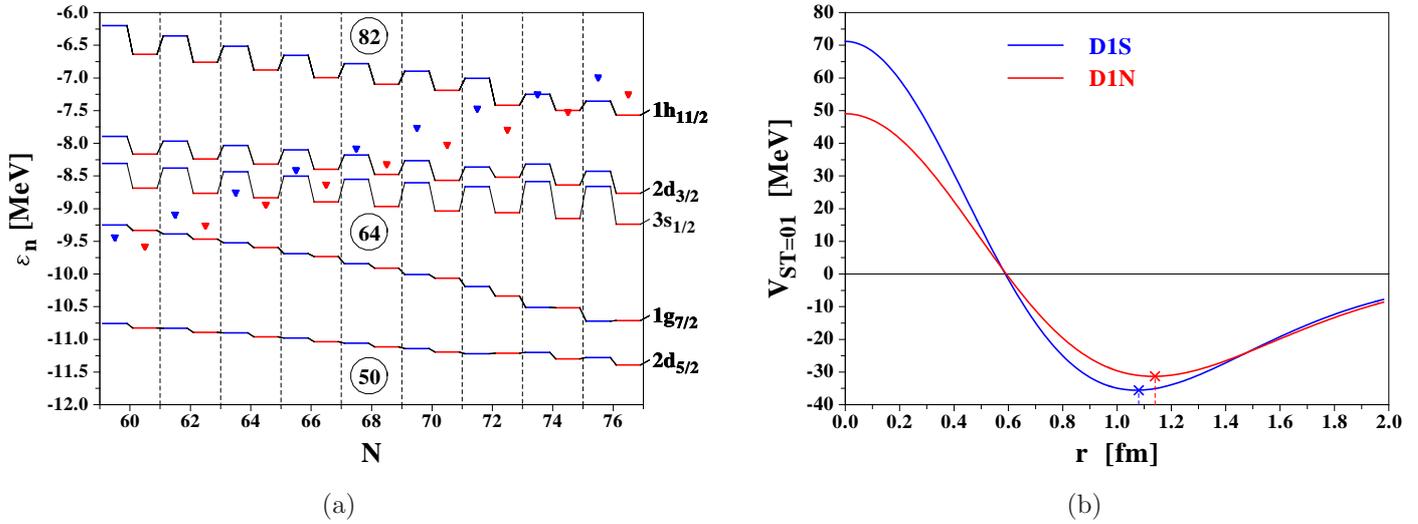


FIG. II.10 – Partie (a) : Spectres d'états neutrons obtenus, dans la chaîne isotopique de l'Etain, avec les interactions D1S (en bleu) et D1N (en rouge). Pour chaque spectre, le niveau de Fermi est repéré par le symbole triangulaire.

Partie (b) : Forme spatiale des interactions D1S et D1N dans le sous-espace singulet-pair, $S=0$, $T=1$. Sur chacune des courbes, les croix indiquent les positions des minima.

Pour expliquer cette apparente contradiction, il est nécessaire d'entrer dans les détails de l'interaction d'appariement. Dans nos codes de calculs, seul l'appariement d'isospin $T = 1$ a été implémenté. Par conséquent, en notant S le spin et T l'isospin d'une paire de nucléons, seules les parties ($S = 0, T = 1$) et ($S = 1, T = 1$) de l'interaction nucléaire interviennent dans la description des corrélations d'appariement. De plus, les nucléons appariés adoptent préférentiellement des directions de spin opposées, ce qui favorise un spin total $S = 0$. Finalement, dans nos codes de calculs, c'est la partie ($S = 0, T = 1$) de l'interaction qui contribue principalement au développement des corrélations d'appariement. Pour cette raison, nous qualifierons de *potentiel d'appariement* la partie singulet-paire de l'interaction notée $V_{ST=01}(r)$, où r est la distance entre les deux nucléons en interaction.

La structure spatiale du potentiel d'appariement est représentée sur la Fig. II.10(b) pour les interactions D1S (courbe bleue) et D1N (courbe rouge). Sur chacune des courbes, les croix indiquent les positions des minima.

Aux distances $r < 0.6$ fm entre les nucléons, le potentiel d'appariement associé à l'interaction D1N, $V_{ST=01}^{D1N}(r)$, est moins répulsif que celui correspondant à l'interaction D1S, $V_{ST=01}^{D1S}(r)$. Les courtes distances inter-nucléoniques laissent donc supposer que les corrélations d'appariement devraient se développer plus facilement avec l'interaction D1N à cause de son potentiel d'appariement moins répulsif. Cette conclusion doit être nuancée par le comportement des potentiels $V_{ST=01}^{D1S}(r)$ et $V_{ST=01}^{D1N}(r)$ aux plus grandes distances, $r \geq 0.6$ fm, lorsqu'ils deviennent attractifs.

Pour les distances $r \geq 0.6$ fm, le potentiel d'appariement de l'interaction D1N, $V_{ST=01}^{D1N}(r)$, est moins attractif que celui de l'interaction D1S, $V_{ST=01}^{D1S}(r)$. A ces distances, c'est cette fois-ci l'interaction D1S qui favorise le développement des corrélations d'appariement de par l'attraction plus forte de son potentiel d'appariement.

Il est difficile de déterminer, dans cette compétition des potentiels $V_{ST=01}^{D1S}(r)$ et $V_{ST=01}^{D1N}(r)$ aux courtes et grandes distances, lequel l'emporte en produisant une attraction effective supérieure entre les nucléons de la paire de Cooper.

On sait cependant que la distance entre les deux nucléons formant la paire de Cooper est supérieure au fermi. La partie des courtes distances, $r < 0.6$ fm, est donc peu ou pas ressentie par les nucléons appariés. Cet argument permet de se concentrer sur la partie des plus longues distances, $r \geq 0.6$ fm, pour laquelle l'interaction D1N donne un potentiel d'appariement moins attractif. Ce déficit d'attraction est bien reflété par la valeur du minimum repéré par les croix sur la Fig. II.10(b). Ce minimum atteint seulement -31.3 MeV avec l'interaction D1N contre -35.6 MeV avec l'interaction D1S. Le potentiel d'appariement de l'interaction D1N, $V_{ST=01}^{D1N}(r)$, est donc moins favorable au développement des corrélations d'appariement.

Il semble que, pour les neutrons, cet effet compense exactement la compression du spectre obtenue avec l'interaction D1N (Fig. II.10(a)). Cette compression favorisait la mise en place du processus d'appariement. L'annulation de ces deux effets contraires permet d'expliquer les valeurs très proches obtenues avec les interactions D1S et D1N pour les quantités qui mesurent l'intensité de l'appariement, comme les différences de masses ou les énergies d'appariement.

Cette étude, basée sur la chaîne isotopique de l'Étain, a permis de comparer les corrélations d'appariement *neutron* produites par les interactions D1S et D1N. L'appariement *proton* est analysé dans la partie suivante, consacrée à la caractérisation des corrélations d'appariement par les moments d'inertie.

II.2.2.2 Par les moments d'inertie

Nous nous intéressons dans cette partie au noyau de ^{244}Pu . Dans son état fondamental, ce noyau présente une déformation prolate $\beta = 0.30$. Les états à une particule ne sont alors plus labellés par les nombres quantiques l et j associés aux moments cinétiques orbital et total. Les nombres quantiques caractérisant les états à une particule d'un noyau déformé correspondent à la projection Ω du moment cinétique total sur un axe de référence et à la parité π . Chaque état à une particule sera donc labellé par $\Omega\pi$ comme cela est fait sur la Fig. II.11(a).

Sur cette figure les spectres d'états à une particule, proton et neutron, sont représentés pour les interactions D1S et D1N. La couleur du trait se réfère à la valeur du nombre quantique Ω , $\Omega = 1/2, \dots, 15/2$. Quant à la nature du trait, continu et discontinu, elle permet de distinguer les états de parité positive ($\pi = +$) et négative ($\pi = -$). Les lignes connectant les spectres des interactions D1S et D1N relient les états possédant les mêmes nombres quantiques. L'énergie du niveau de Fermi, ε_F , est repérée par un cercle noir.

Pour les protons, le spectre calculé avec l'interaction D1N est nettement plus comprimé qu'avec l'interaction D1S. Cette compression reflète l'augmentation de la masse effective proton entre l'interaction D1S, $(m_p^*/m)^{D1S} = 0.66$, et l'interaction D1N, $(m_p^*/m)^{D1N} = 0.75$, pour l'asymétrie du ^{244}Pu , $I = \frac{N-Z}{N+Z} = 0.23$. Cette asymétrie est repérée par une ligne verticale sur la Fig. II.8(a) illustrant la séparation des masses effectives neutron et proton. Les masses effectives neutron des interactions D1S et D1N sont, quant à elles, très proches à cette asymétrie : $(m_n^*/m)^{D1S} = 0.73$ et $(m_n^*/m)^{D1N} = 0.74$. C'est la raison pour laquelle les spectres d'états neutron calculés avec les interactions D1S et D1N sont très similaires sur la Fig. II.11(a). On notera toutefois la légère compression du spectre neutronique obtenu avec l'interaction D1N.

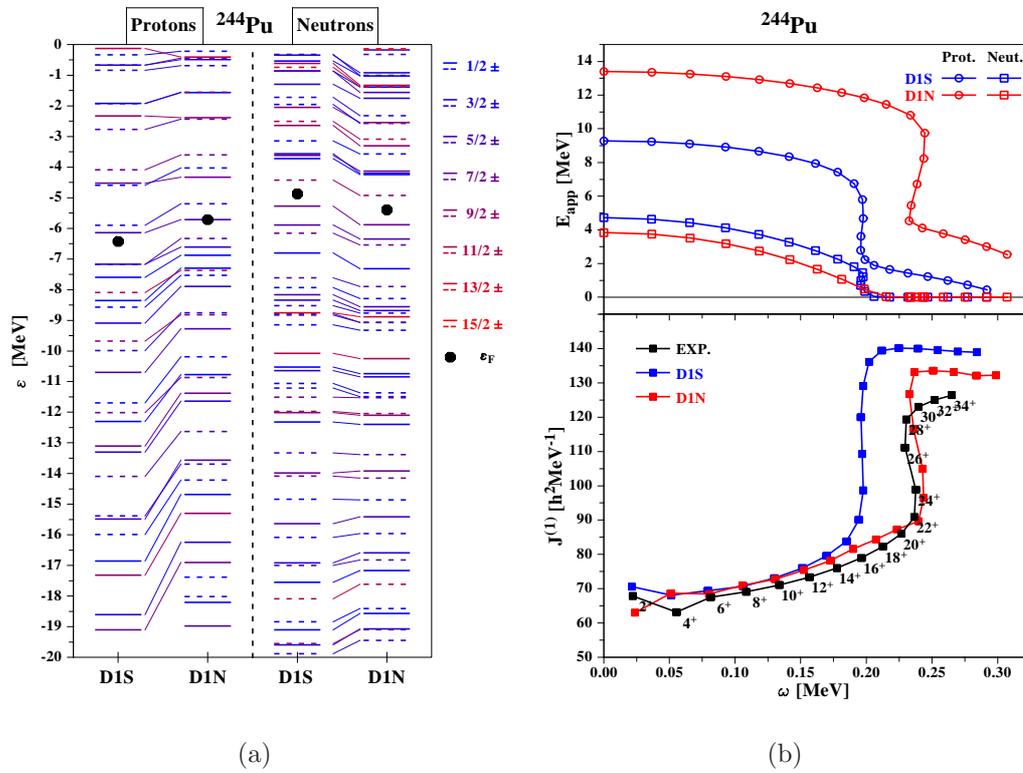


FIG. II.11 – Partie (a) : Spectres d'états à une particule, proton et neutron, calculés avec les interactions D1S et D1N dans le ^{244}Pu . Sur chaque spectre, l'énergie du niveau de Fermi, ε_F , est repérée par le cercle noir. Partie (b) : Energies d'appariement E_{app} (proton et neutron) et moments d'inertie $J^{(1)}$ en fonction de la fréquence de rotation ω du noyau. Les résultats théoriques sont présentés pour les interactions D1S et D1N. Pour les moments d'inertie, ils sont confrontés aux valeurs expérimentales (EXP).

La forme des spectres à une particule dans le ^{244}Pu permet d'expliquer le comportement des énergies d'appariement. Celles-ci sont représentées sur la partie haute de la Fig. II.11(b) en fonction de la fréquence de rotation ω du noyau. Les énergies d'appariement proton (neutron) sont symbolisées par les cercles (carrés) colorés en bleu ou rouge se-

lon l'interaction, D1S ou D1N. Ces résultats sont obtenus par un calcul auto-cohérent basé sur la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov dans un référentiel en rotation. La structure interne du noyau, en rotation de moment angulaire total I , est décrite par l'état de quasi-particules Φ_I qui minimise la fonctionnelle

$$\delta\langle\Phi_I|\hat{H} - \omega\hat{J}_z - \lambda_N\hat{N} - \lambda_Z\hat{Z}|\Phi_I\rangle = 0.$$

Dans cette expression, nous avons noté

- \hat{H} : le Hamiltonien construit avec l'interaction de Gogny,
- ω : la fréquence de rotation moyenne du noyau,
- \hat{J}_z : la projection du moment angulaire total sur l'axe z ,
- λ_N, λ_Z : les paramètres de Lagrange qui permettent de contraindre, en moyenne, les nombres de neutrons et de protons,
- \hat{N}, \hat{Z} : les opérateurs nombres de particules associés aux neutrons et aux protons.

On commence par s'intéresser aux valeurs des énergies d'appariement à fréquence de rotation nulle, $\omega = 0$. A cette fréquence, les énergies d'appariement neutron, E_{app}^n , obtenues avec les interactions D1S et D1N diffèrent de moins de un MeV, $(E_{app}^n)^{D1S} = 3.8$ MeV et $(E_{app}^n)^{D1N} = 4.7$ MeV. Cette faible différence confirme la conclusion de la partie précédente : les interactions D1S et D1N donnent des descriptions très similaires de l'appariement neutron. Pour les protons, les énergies d'appariement, E_{app}^p , sont supérieures au double des énergies d'appariement neutron et sont cette fois-ci très différentes pour les interactions D1S et D1N, $(E_{app}^p)^{D1S} = 9.2$ MeV et $(E_{app}^p)^{D1N} = 13.3$ MeV. Cette différence de plus de 4 MeV est une conséquence de la forme des spectres protons présentés sur la Fig. II.11(a). Autour du niveau de Fermi, le spectre protons calculé avec l'interaction D1N est plus comprimé qu'avec l'interaction D1S. Au début de cette partie, nous avons expliqué cette compression par les valeurs des masses effectives. Un spectre plus comprimé favorise la diffusion de paires de Cooper vers les états inoccupés au-dessus du niveau de Fermi. C'est pourquoi les corrélations d'appariement proton se développent plus facilement avec l'interaction D1N. L'attraction plus faible du potentiel d'appariement de cette interaction, illustrée sur la Fig. II.10(b), ne suffit pas à compenser l'effet de la compression du spectre. Pour les protons, l'effet net est donc une augmentation de l'énergie d'appariement lorsque l'interaction D1N est utilisée.

Lorsque le noyau est mis en rotation, les énergies d'appariement proton varient peu jusqu'à la fréquence $\omega^{D1S} = 0.20$ MeV avec l'interaction D1S et $\omega^{D1N} = 0.24$ MeV avec l'interaction D1N. A ces fréquences, les énergies d'appariement proton diminuent brutalement de plus de 5 MeV. Cet effet a été prédit par Mottelson et Valatin [124] dès 1961. Ces auteurs avancèrent que, à une fréquence de rotation suffisante du noyau, les corrélations d'appariement devraient disparaître, en analogie avec la destruction de la supraconductivité en présence d'un champ magnétique suffisamment intense : l'effet Meissner. L'analogie avec l'effet Meissner se justifie par la force de Coriolis qui, dans un système en rotation, produit les mêmes effets qu'un champ magnétique.

L'origine physique de cet *anti-appariement de Coriolis* est la suivante. Pour un noyau déformé statique, les états à une particule se présentent sous forme de paires dégénérées

par renversement du sens du temps. Le potentiel d'appariement attractif couple fortement ces états appariés. Lorsque le noyau entre en rotation, les nucléons ressentent, non seulement le potentiel déformé du noyau, mais aussi les forces centrifuge et de Coriolis. Les forces de Coriolis brisent la symétrie par renversement du sens du temps, en favorisant énergétiquement les états dont le moment angulaire pointe dans la direction de l'axe de rotation. Cette inclinaison des états à une particule brise les paires maintenues par le potentiel d'appariement et aligne les moments angulaires des nucléons dans la direction de la rotation. Les corrélations d'appariement diminuent alors brutalement, c'est l'effet d'anti-appariement de Coriolis.

Cet effet est très net sur les énergies d'appariement proton du ^{244}Pu comme le montre la Fig. II.11(b). Pour les fréquences de rotation supérieures à $\omega^{D1S} = 0.20$ MeV ou $\omega^{D1N} = 0.24$ MeV, les corrélations d'appariement proton sont en grande partie détruites par les forces de Coriolis et le noyau passe d'une phase superfluide à une phase non-appariée. Ce changement de phase induit une augmentation brusque des moments d'inertie $J^{(1)}$ présentés sur la partie basse de la Fig. II.11(b). Ce phénomène est qualifié de *backbending* des moments d'inertie. Les moments d'inertie de cette figure ont été calculés selon la relation

$$J^{(1)}(I) = \frac{2I - 1}{E(I) - E(I - 2)},$$

où $E(I)$ représente l'énergie du noyau dans l'état de spin I . Les calculs avec les interactions D1S et D1N sont représentés par les courbes bleu et rouge. Les moments d'inertie déduits des énergies de transition mesurées expérimentalement correspondent à la courbe noire. Le backbending prédit avec l'interaction D1N correspond à la fréquence de rotation pour laquelle les corrélations d'appariement proton sont fortement atténuées par les forces de Coriolis, $\omega^{D1N} = 0.24$ MeV. Ce résultat est en très bon accord avec les mesures expérimentales qui positionnent le backbending à la fréquence $\omega^{EXP} = 0.23$ MeV. L'interaction D1S, en revanche, sous-estime la fréquence d'apparition du backbending avec $\omega^{D1S} = 0.20$ MeV.

Nous avons illustré dans cette partie, avec le noyau de ^{244}Pu , le lien fort entre les énergies d'appariement et les moments d'inertie. Le backbending de ce noyau, associé à la destruction des corrélations d'appariement proton au cours de la rotation, est mieux décrit avec l'interaction D1N qu'il ne l'était avec l'interaction D1S. L'étude des moments d'inertie tend donc à montrer que les corrélations d'appariement proton sont mieux simulées avec la nouvelle interaction D1N.

II.2.3 La description des énergies de liaison

II.2.3.1 Avec la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov

Les énergies de liaison ont été mesurées expérimentalement dans plus de 2000 noyaux [15, 16]. Ces valeurs expérimentales, notées B_{EXP} , peuvent être confrontées aux énergies de liaison théoriques, B_{HFB} , calculées, en symétrie axiale, avec la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB). Pour cela, nous définissons la différence ΔB_{HFB} entre les énergies de

liaison expérimentale et théorique,

$$\Delta B_{HFB} = B_{EXP} - B_{HFB} . \quad (\text{II.9})$$

Dans cette expression, les énergies de liaison B_{EXP} et B_{HFB} sont définies comme des quantités positives.

Sur la Fig. II.12, la différence ΔB_{HFB} est représentée en fonction du nombre de neutrons N pour quatre chaînes isotopiques. Selon que l'énergie de liaison théorique B_{HFB} a été calculée avec la paramétrisation D1S ou D1N, les courbes sont colorées en bleu ou rouge.

La première chaîne isotopique est celle du Soufre [S] et correspond à la Fig. II.12(a). Pour cet élément léger, les valeurs de ΔB_{HFB} calculées avec les paramétrisations D1S et D1N sont très similaires. Elles restent positives tout au long de la chaîne isotopique, ce qui signifie que les énergies de liaison théoriques B_{HFB} sous-estiment les valeurs expérimentales B_{EXP} . L'approximation HFB, utilisée pour le calcul théorique, ne permet pas de traiter certains types de corrélations entre les nucléons comme, par exemple, l'appariement d'isospin $T=0$ ou encore le couplage particule-vibrations. Ces corrélations, lorsqu'elles sont prises en compte, lient plus fortement le noyau en apportant un incrément d'énergie de liaison aussi appelé *énergie de corrélation* et que nous notons B_{corr} . A l'approximation HFB, il est donc plutôt sain que les énergies de liaison théoriques B_{HFB} sous-estiment les valeurs expérimentales B_{EXP} puisque nous savons que, une fois toutes les corrélations incluses, les nouvelles énergies théoriques seront $B_{HFB} + B_{corr} > B_{HFB}$.

La deuxième chaîne isotopique, celle de l'Étain [Sn], représentée sur la Fig. II.12(b), fait intervenir deux noyaux magiques, ^{100}Sn et ^{132}Sn . Nous avons tracé une ligne droite pointillée entre les valeurs ΔB_{HFB} de ces deux noyaux. Pour la paramétrisation D1S, cette droite est caractérisée par la pente $a^{D1S} = 0.22$ MeV; avec la paramétrisation D1N, cette pente devient quasiment nulle, $a^{D1N} = 0.02$ MeV. Ces différences de pentes sont liées à la valeur de ΔB_{HFB} pour ^{100}Sn . La paramétrisation D1S, avec une valeur $\Delta B_{HFB}^{D1S} = -4.1$ MeV, sur-estime l'énergie de liaison expérimentale de ce noyau, $B_{HFB}^{D1S} = B_{EXP} + 4.1$ MeV. Par contre, avec la paramétrisation D1N, cette énergie de liaison est sous-estimée de $\Delta B_{HFB}^{D1N} = 2.3$ MeV, ce qui s'écrit aussi $B_{HFB}^{D1N} = B_{EXP} - 2.3$ MeV. Pour ^{132}Sn , en revanche, les deux paramétrisations, D1S et D1N, donnent des valeurs de ΔB_{HFB} très proches, 2.9 et 2.8 MeV respectivement. Les pentes différentes, $a^{D1S} = 0.22$ MeV et $a^{D1N} = 0.02$ MeV, des droites joignant les deux noyaux magiques s'expliquent donc par les différentes valeurs de ΔB_{HFB} prédites pour ^{100}Sn avec les deux paramétrisations. La pente prononcée obtenue avec la paramétrisation D1S reflète la dérive, en fonction du nombre de neutrons N , des énergies de liaison théoriques par rapport aux valeurs expérimentales. Avec la paramétrisation D1N, cette dérive n'apparaît presque plus et les valeurs de ΔB_{HFB} ne diffèrent plus que de 500 keV entre les deux noyaux magiques. Nous n'avons pas discuté jusqu'ici les énergies de liaison des noyaux compris entre ^{102}Sn et ^{130}Sn . Pour ces noyaux, les valeurs de ΔB_{HFB} ne s'alignent pas sur la droite joignant les deux noyaux magiques, mais décrivent plutôt une forme d'arche. Toutefois, nous savons que les énergies de liaison de ces noyaux à couche ouverte ne sont pas correctement décrites avec la méthode HFB. La prise en compte de corrélations liées aux mouvements

collectifs des nucléons, comme la rotation ou la vibration du noyau, modifie en effet de manière significative les valeurs B_{HFB} des énergies de liaison de ces noyaux. L'influence des corrélations, et en particulier des corrélations quadrupolaires, sur les énergies de liaison théoriques est discutée plus en détail dans la partie suivante.

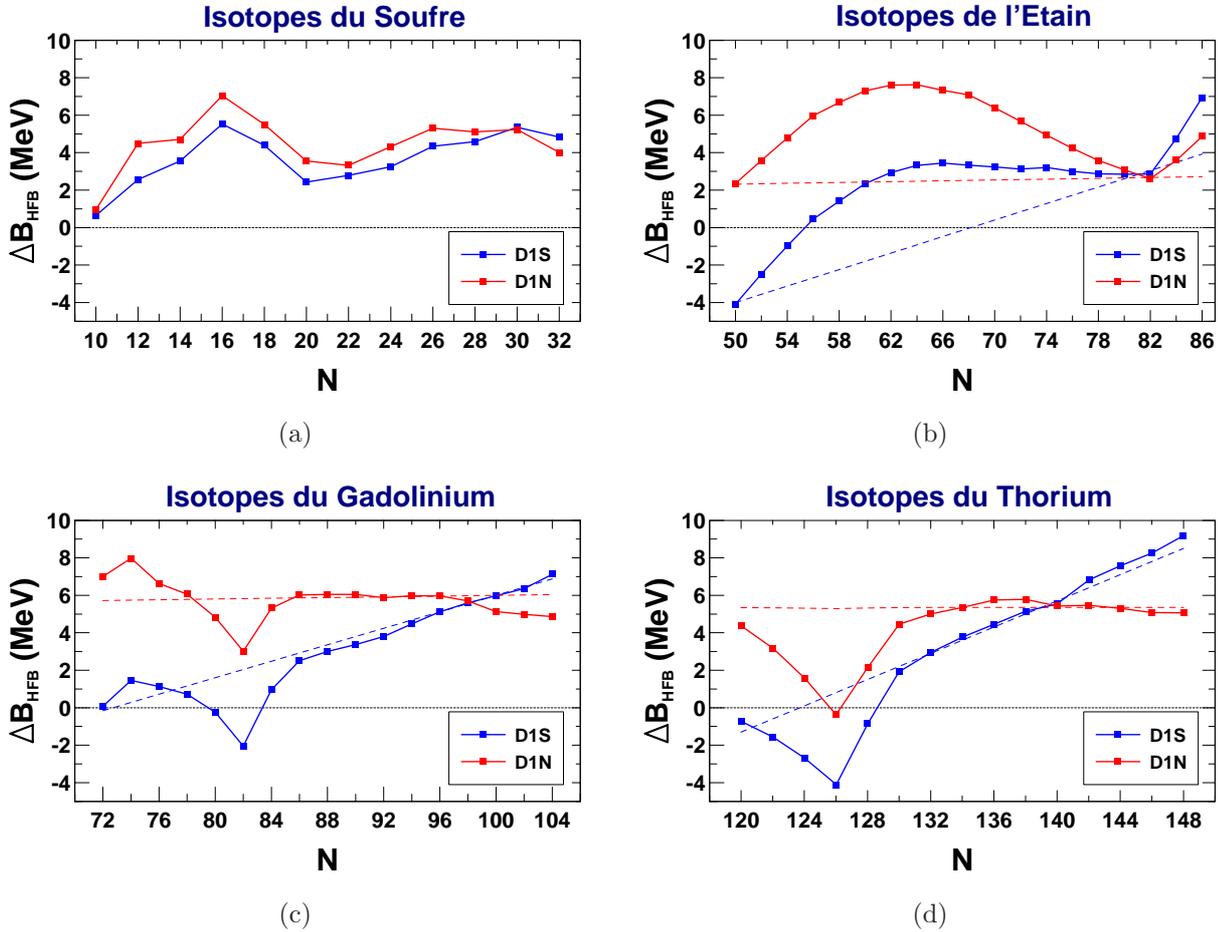


FIG. II.12 – Différence ΔB_{HFB} , définie en (II.9), représentée en fonction du nombre de neutrons N pour les chaînes isotopiques de quatre éléments, (a) le Soufre, (b) l'Étain, (c) le Gadolinium et (d) le Thorium. Pour chaque chaîne isotopique, les résultats obtenus avec les paramétrisations D1S et D1N sont comparés.

La troisième chaîne isotopique, représentée sur la Fig. II.12(c), est celle du Gadolinium [Gd]. Pour chaque paramétrisation, D1S ou D1N, les valeurs de ΔB_{HFB} passent par un minimum au nombre magique de neutrons $N = 82$. Ce type de singularité est la manifestation des effets de couches qui sont responsables de la plus grande stabilité des noyaux magiques. Pour les autres nombres de neutrons, les valeurs de ΔB_{HFB} s'alignent bien le long d'une droite matérialisée en pointillés bleus ou rouges selon la paramétrisation, D1S ou D1N. Avec la paramétrisation D1S, cette droite présente, comme dans le cas des isotopes de l'Étain, une pente $a^{D1S} = 0.22$ MeV. Cette dérive des valeurs de ΔB_{HFB} en fonction du nombre de neutrons est corrigée par la paramétrisation D1N avec laquelle la pente est presque nulle $a^{D1N} = 0.01$ MeV.

Pour la dernière chaîne isotopique, représentée sur la Fig. II.12(d), le Thorium [Th] a été choisi. Les valeurs de ΔB_{HFB} décrivent des courbes très similaires à celles rencontrées dans le cas du Gadolinium. Elles présentent un minimum au nombre magique de neutrons $N = 126$. Les droites en pointillés donnent la tendance générale des valeurs de ΔB_{HFB} sans tenir compte de la singularité au minimum. La paramétrisation D1N, avec une droite de pente quasiment nulle, permet de corriger la dérive des valeurs de ΔB_{HFB} observée avec la paramétrisation D1S.

Sur la Fig. II.13, les valeurs de ΔB_{HFB} sont représentées en fonction du nombre de neutrons N pour 1818 noyaux pair-pair. Les résultats sont exposés pour les paramétrisations D1S et D1N sous forme de faisceaux de lignes. Chaque ligne connecte entre eux les noyaux d'une même chaîne isotopique. Pour les deux paramétrisations, les valeurs de ΔB_{HFB} passent par des minima au niveau des nombres magiques de neutrons $N=20, 50, 82$ et 126 . Ces minima, très profonds en $N=82$ et 126 , traduisent le gain de stabilité par rapport aux noyaux voisins.

Dans les chaînes isotopiques des éléments plutôt lourds, comme les lanthanides ou les actinides, la dérive des valeurs de ΔB_{HFB} en fonction du nombre de neutrons est très nette avec la paramétrisation D1S. Cette dérive se manifeste par des valeurs très différentes de ΔB_{HFB} aux extrémités d'une même chaîne isotopique. La paramétrisation D1N permet de corriger cette tendance en donnant des valeurs de ΔB_{HFB} presque constantes, en dehors des nombres magiques, le long des chaînes isotopiques.

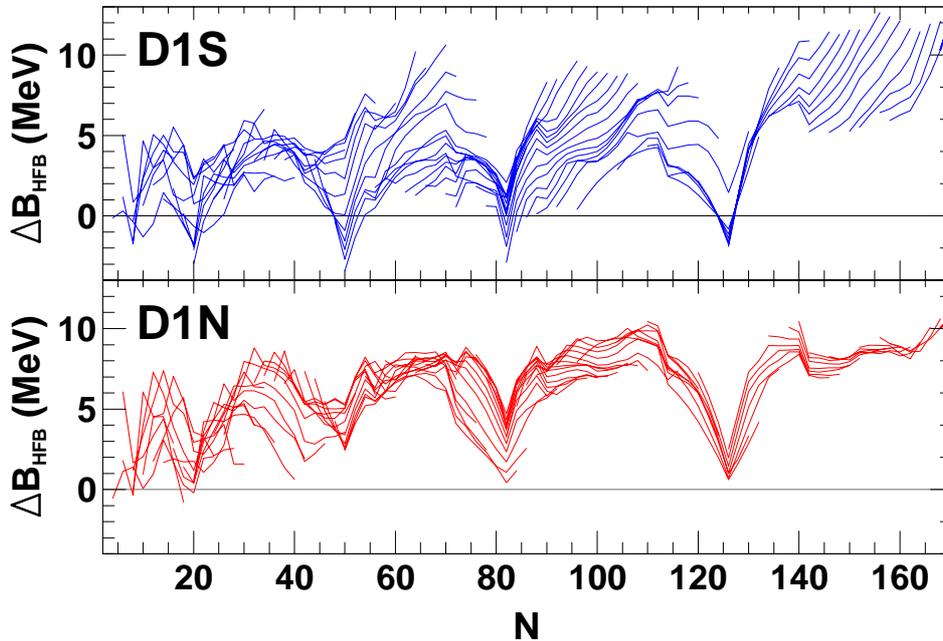


FIG. II.13 – Différence ΔB_{HFB} , définie en (II.9), représentée en fonction du nombre de neutrons N pour un ensemble de 1818 noyaux pairs-pairs. Les résultats, obtenus avec les paramétrisations D1S et D1N, sont donnés sous forme de faisceaux de lignes, où chaque ligne connecte les noyaux d'une même chaîne isotopique.

II.2.3.2 Avec la méthode de l'Hamiltonien de Bohr

Il a été montré que les plus importantes fluctuations au-delà du champ moyen sont associées aux déformations quadrupolaires [9]. Ces fluctuations peuvent être déterminées variationnellement avec la méthode de la coordonnée génératrice. Cette méthode définit la fonction d'onde du noyau comme une combinaison linéaire de solutions Hartree-Fock-Bogoliubov prises à des déformations différentes.

Ces dernières années, un grand effort a été fait par la communauté internationale pour appliquer cette méthode de la coordonnée génératrice à l'ensemble des noyaux. En particulier, Bender *et al.* [125] ont étudié les effets des corrélations quadrupolaires sur les énergies de liaison et les rayons de charge de tous les noyaux pair-pair connus expérimentalement. Dans leur approche, la méthode de la coordonnée génératrice à une dimension a été utilisée pour traiter les corrélations quadrupolaires axiales. Les états de base ont été calculés à l'approximation HF+BCS [9] avec la force de Skyrme Sly4 [12, 13] et projetés sur le moment angulaire.

Notre travail est également basé sur la méthode de la coordonnée génératrice, mais résolue à l'approximation dite de la GOA [9]. L'avantage de cette approximation est de permettre de traiter les cinq degrés de liberté quadrupolaires que l'on sait être généralement fortement couplés entre eux. Les hypothèses faites dans le cadre de cette approximation sont les suivantes :

- les recouvrements sont gaussiens dans les variables a_0 et a_2 définies plus bas,
- le développement du noyau Hamiltonien est tronqué à l'ordre deux en série de Taylor sur la non-localité.

Avec ces hypothèses, il est possible de montrer que la résolution des équations de la coordonnée génératrice se ramène à la recherche des états propres et valeurs propres d'un Hamiltonien collectif $\hat{\mathcal{H}}_{\text{coll}}$ dont la forme est semblable à celle proposée par Bohr [126],

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{coll}} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \frac{\hat{I}_k^2}{\mathcal{J}_k} - \frac{1}{2} \sum_{m,n=0 \text{ et } 2} D^{-1/2} \frac{\partial}{\partial a_m} D^{1/2} G^{mn} \frac{\partial}{\partial a_n} + \mathcal{V},$$

- avec
- \hat{I}_k : la $k^{\text{ième}}$ composante du moment angulaire I ,
 - \mathcal{J}_k : le moment d'inertie par rapport à l'axe k ,
 - D : la métrique définie comme $D = (B_{00}B_{22} - B_{02}^2) \prod_k \mathcal{J}_k$
où les B_{ij} représentent les inerties collectives,
 - G^{mn} : la matrice d'éléments $G^{mn} = (B_{mn})^{-1}$,
 - a_0, a_2 : sont reliés aux déformations polaires de Bohr β et γ
par $a_0 = \beta \cos \gamma$, $a_2 = \beta \sin \gamma$,
 - \mathcal{V} : la surface d'énergie potentielle incluant l'énergie de point zéro.

La diagonalisation de $\hat{\mathcal{H}}_{\text{coll}}$:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{coll}} g_i(q) = E_i g_i(q),$$

donne accès aux énergies E_i et aux fonctions d'onde collectives $g_i(q)$ des différents états i du noyau. L'état fondamental, de spin-parité 0^+ pour les noyaux pair-pair, correspond à

la valeur propre E_0 la plus basse en énergie. Pour revenir à des quantités positives, nous définissons l'énergie de liaison correspondante, $B_0 = -E_0$, que nous pouvons comparer aux valeurs expérimentales B_{EXP} avec la différence,

$$\Delta B_0 = B_{EXP} - B_0. \quad (\text{II.10})$$

Pour confronter les valeurs de ΔB_0 et celles de ΔB_{HFB} , nous les avons représentées en fonction du nombre de neutrons N sur la Fig. II.14. Les calculs ont été réalisés dans la chaîne isotopique du Samarium [Sm], avec les paramétrisations D1S et D1N. Pour ces deux paramétrisations, les valeurs de ΔB_{HFB} présentent un minimum très pointu au nombre magique $N = 82$. Pour ce nombre de neutrons, les méthodes Hartree-Fock-Bogoliubov et de l'Hamiltonien de Bohr donnent d'ailleurs des résultats très proches pour l'énergie de liaison théorique, $B_{HFB} \simeq B_0$, soit encore, $\Delta B_{HFB} \simeq \Delta B_0$. Pour les autres nombres de neutrons, $N \neq 82$, les résultats pour ΔB_{HFB} et ΔB_0 deviennent significativement différents avec la tendance $\Delta B_0 < \Delta B_{HFB}$. Ces différences mettent en évidence l'énergie de corrélation B_{corr} gagnée avec la méthode de l'Hamiltonien de Bohr par rapport à la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov, $B_{corr} = B_0 - B_{HFB}$, soit aussi $B_{corr} = \Delta B_{HFB} - \Delta B_0$. Cette énergie de corrélation, quasiment nulle au niveau du nombre magique $N = 82$, est de l'ordre de 3 MeV pour les autres nombres de neutrons. Elle contribue ainsi à supprimer les effets de couche qui se manifestaient, à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov, par la singularité de la courbe ΔB_{HFB} en $N = 82$. La méthode de l'Hamiltonien de Bohr, en incluant les corrélations quadrupolaires, permet donc d'obtenir une courbe ΔB_0 qui ne présente aucune discontinuité au niveau du nombre magique. Ces conclusions sont indépendantes de la paramétrisation utilisée, D1S ou D1N.

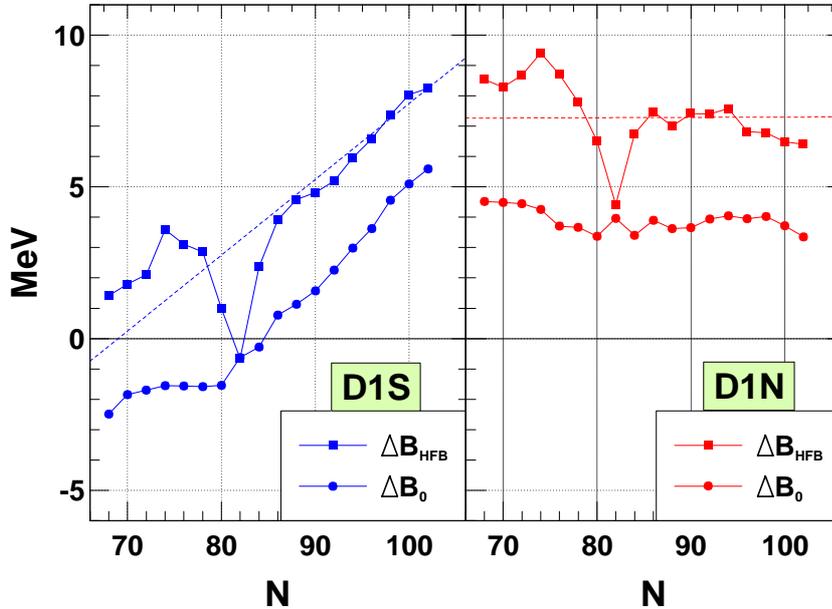


FIG. II.14 – Différences ΔB_{HFB} et ΔB_0 , définies en (II.9) et (II.10), représentées en fonction du nombre de neutrons N pour la chaîne isotopique du Samarium et avec les interactions D1S et D1N.

Avec la paramétrisation D1S, les valeurs de ΔB_0 ne restent pas constantes le long de la chaîne isotopique. Elles varient de -2.1 à 5.9 MeV entre le ^{130}Sm et le ^{164}Sm . Cette dérive de ΔB_0 en fonction du nombre de neutrons N est le souvenir de celle que nous avons déjà mise en évidence à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov dans la partie précédente. La paramétrisation D1N corrige cette tendance et les valeurs de ΔB_0 restent voisines de 4 MeV tout au long de la chaîne isotopique.

Enfin, il faut noter que nos calculs sont réalisés en développant les états physiques sur les fonctions propres de l'oscillateur harmonique. Le nombre de fonctions propres qui interviennent dans ce développement définit ce que l'on appelle la taille de la base. Pour les calculs dans la chaîne isotopique du Samarium, par exemple, une taille de base 12 a été utilisée, c'est à dire que les états physiques ont été développés sur l'ensemble des fonctions propres de l'oscillateur harmonique dont les énergies restent inférieures à $12\hbar\omega$. Le résultat du calcul de l'énergie de liaison dépend de la taille de base utilisée. Pour s'affranchir de ces effets de taille de base finie, nous extrapolons nos résultats au cas d'une base infinie qui permet un développement des états physiques sur l'ensemble infini des fonctions propres de l'oscillateur harmonique. Cette extrapolation permet de gagner environ 4 MeV d'énergie de liaison. Ainsi les énergies de liaison théoriques en base infinie, B_0^∞ , se déduisent des résultats précédents obtenus en taille de base 12, B_0 , par la relation $B_0^\infty \simeq B_0 + 4$ MeV. On peut également réécrire l'écart aux valeurs expérimentales comme suit,

$$\Delta B_0^\infty = B_{EXP} - B_0^\infty \simeq \Delta B_0 - 4 \text{ MeV}.$$

La paramétrisation D1N, avec laquelle nous avons obtenu la valeur constante $\Delta B_0 \simeq 4$ MeV, donne donc, après extrapolation en base infinie, $\Delta B_0^\infty \simeq 0$ pour tous les noyaux de la chaîne isotopique du Samarium. Cette nouvelle paramétrisation permet donc une reproduction de bien meilleure qualité des énergies de liaison expérimentales le long des chaînes isotopiques.

Chapitre III

L'interaction de Gogny avec un terme densité de portée finie

Dans le chapitre précédent, nous avons, entre autres, présenté trois types d'études :

1. l'équation d'état de la matière neutronique,
2. l'énergie potentielle dans les quatre sous-espaces de spin-isospin S-T,
3. la séparation des masses effectives neutron et proton en fonction de l'asymétrie.

Pour chacune de ces études, les résultats basés sur les interactions réalistes ont été présentés. Ces interactions sont contraintes par les données du problème à deux nucléons comme les déphasages mesurés lors d'expériences de diffusion N-N ou encore les propriétés du deutéron. Dans le cas de l'équation d'état de la matière neutronique, c'est la méthode variationnelle appliquée par Friedman et Pandharipande [11] qui a permis de calculer l'énergie par particule à différentes densités à partir de l'interaction réaliste UV14. Pour les deux autres études, portant sur l'énergie potentielle dans les sous-espaces S-T et la séparation des masses effectives, la méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone a été appliquée au Hamiltonien réaliste $H^{\text{réa}}$. Ces résultats basés sur les interactions réalistes ont été comparés aux calculs réalisés avec les paramétrisations D1S et D1N de l'interaction de Gogny.

La paramétrisation D1S reproduit correctement la séparation des masses effectives prédite par les approches microscopiques utilisant les interactions réalistes. Cette paramétrisation donne cependant une mauvaise description de l'équation d'état de la matière neutronique proposée par Friedman et Pandharipande. Nous avons alors introduit la paramétrisation D1N qui corrige cette défaillance en reproduisant très précisément, aux basses densités, l'équation d'état calculée par ces deux auteurs. Malheureusement, cette nouvelle paramétrisation n'autorise pas une description réaliste de la séparation des masses effectives en fonction de l'asymétrie.

Après de nombreux essais, il apparaît très difficile d'obtenir, avec la forme analytique (I.1) de l'interaction de Gogny, une paramétrisation qui reproduise simultanément les résultats réalistes des trois études envisagées, l'équation d'état de la matière neutronique, l'énergie potentielle dans les sous-espaces S-T et la séparation des masses effectives. Dans ce cha-

pitre, nous envisageons donc une extension de la forme analytique (I.1) de l'interaction de Gogny. Cette extension concerne le terme dépendant de la densité de portée nulle que nous souhaitons faire évoluer vers une portée finie.

Deux autres raisons d'introduire une portée finie dans le terme densité de l'interaction de Gogny ont été évoquées dans l'Introduction. La première repose sur l'observation que l'interaction nucléaire effective, quelle que soit la méthode utilisée pour la déterminer, possède certainement une portée non nulle et que cette caractéristique n'est pas sans influence sur les propriétés du champ moyen des noyaux. Elle conduit notamment à une composante d'échange non triviale dans le champ moyen qui affecte profondément le spectre des états à une particule. Elle intervient aussi dans la structure spatiale du champ moyen et dans la distribution des nucléons en lissant les fluctuations associées aux effets de couches. La portée de l'interaction effective semble également jouer un rôle dans la réponse du noyau à un champ extérieur et, par conséquent, dans les propriétés de déformation déterminées avec les méthodes de champ moyen avec contraintes.

Une seconde raison concerne l'utilisation de l'interaction effective dans les approches au-delà du champ moyen. En effet, comme nous l'avons dit, il est nécessaire dans la plupart des noyaux de tenir compte des corrélations entre les nucléons engendrées par l'interaction résiduelle. Les approches permettant de décrire ces corrélations sont bien connues. Ce sont essentiellement la théorie HFB dans le cas des corrélations d'appariement, les techniques RPA et QRPA en ce qui concerne les corrélations de longue portée associées aux oscillations collectives, la description du couplage particule-vibration, les techniques de mélange de configuration multiparticules-multitrous, etc ... Dans l'esprit d'une approche entièrement microscopique de la structure des noyaux, il semble alors approprié de construire l'interaction résiduelle responsable de ces corrélations en employant la même interaction nucléaire que celle utilisée pour construire le champ moyen. Ceci exige que les éléments de matrice de l'interaction nucléaire entre les configurations particule-trou excitées aient un comportement réaliste en fonction de l'énergie d'excitation des configurations. Comme on le sait, cette condition n'est remplie que si l'interaction nucléaire possède une portée non nulle.

Dans l'interaction de Gogny traditionnelle, deux composantes ont une portée nulle : le terme spin-orbite et le terme dépendant de la densité. Les effets de la composante spin-orbite dans l'interaction résiduelle sont généralement faibles et peuvent être négligés en première approximation. En revanche, on s'attend à ce que ceux provenant du terme dépendant de la densité soient très importants, notamment dans la partie de l'interaction résiduelle qui engendre les corrélations de type RPA et QRPA. Dans les versions D1S et D1N de l'interaction de Gogny, le terme dépendant de la densité étant de portée nulle, son action a été limitée au sous-espace triplet-pair. De cette façon, comme il a été dit précédemment, il n'intervient pas dans la composante de l'interaction résiduelle responsable des corrélations d'appariement entre des nucléons de même type. Cette restriction n'est évidemment plus nécessaire avec un terme dépendant de la densité de portée finie : il peut être choisi de la forme la plus générale et est susceptible d'intervenir dans les quatre sous-espaces des états à deux nucléons.

L'analyse des propriétés de l'interaction dans les différents sous-espaces, notamment dans

le sous-espace singulet-pair présidant aux corrélations d'appariement proton-proton et neutron-neutron, va constituer un guide précieux permettant de déterminer les paramètres du nouveau terme dépendant de la densité. D'autres considérations vont également intervenir, en particulier les aspects pratiques liés à l'augmentation du temps de calcul des champs moyen et d'appariement HFB lorsque le terme dépendant de la densité est de portée finie. Egalement, une nouvelle procédure de détermination des paramètres de l'interaction est nécessaire. Ce sont ces différents points qui sont exposés dans la suite.

III.1 Forme fonctionnelle du terme densité

III.1.1 Limitations d'un terme densité de portée nulle

Le terme densité des paramétrisations D1, D1S ou D1N a la forme analytique suivante :

$$V_{dens}^{D1} = t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right). \quad (\text{III.1})$$

V_{dens}^{D1} est un opérateur qui s'applique sur des états à deux particules $|a, b\rangle$. Pour être physiques, ces états doivent être antisymétrisés : $|\widetilde{a, b}\rangle = |a, b\rangle - |b, a\rangle = (1 - P_r P_\sigma P_\tau) |a, b\rangle$ où P_r , P_σ et P_τ sont les opérateurs d'échange d'espace, de spin et d'isospin. Les expressions d'observables telles que l'énergie de liaison du noyau font donc intervenir des termes du type :

$$\begin{aligned} V_{dens}^{D1} |\widetilde{a, b}\rangle &= V_{dens}^{D1} (1 - P_r P_\sigma P_\tau) |a, b\rangle \\ &= V_{dens}^{D1} (1 - P_\sigma P_\tau) |a, b\rangle \end{aligned}$$

Le terme densité V_{dens}^{D1} étant de portée nulle, l'opérateur d'échange d'espace P_r vaut systématiquement 1.

Supposons que l'état $|a, b\rangle$ ait un spin total S et un isospin total T , on le note $|a, b\rangle_{S,T}$. L'opérateur $P_\sigma P_\tau$, appliqué à cet état prend la valeur $(-1)^{S+T}$:

$$\begin{aligned} V_{dens}^{D1} |\widetilde{a, b}\rangle_{S,T} &= V_{dens}^{D1} (1 - (-1)^{S+T}) |a, b\rangle_{S,T} \\ &= 2V_{dens}^{D1} |a, b\rangle_{S,T} && \text{si } (S,T)=(0,1) \text{ ou } (1,0), \\ &= 0 && \text{si } (S,T)=(0,0) \text{ ou } (1,1). \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

La principale limitation du terme densité est qu'il n'agit pas dans les états de spin-isospin $(S=0, T=0)$ et $(S=1, T=1)$ comme le montre la ligne (III.2). Il n'intervient que dans les sous-espaces singulet-pair $(S=0, T=1)$ et triplet-pair $(S=1, T=0)$.

De plus, dans les paramétrisations D1, D1S et D1N, le paramètre x_0 est pris égal à 1. L'expression (III.1) du terme densité V_{dens}^{D1} devient donc proportionnelle à $(1 + P_\sigma)$, soit $(1 + (-1)^{S+1})$ une fois appliquée sur des états de spin total S . Ainsi, avec $x_0 = 1$, le terme densité s'annule dans les états $S = 0$ et n'intervient donc pas dans le sous-espace singulet-pair $(S=0, T=1)$. Ce choix pour la valeur du paramètre x_0 est salutaire car, si le terme densité intervenait dans les états de type $(S=0, T=1)$, il prendrait part à la

description des corrélations d'appariement et entrainerait des divergences de par sa portée nulle. Finalement, le seul sous-espace dans lequel le terme densité est actif est le sous-espace triplet-pair (S=1, T=0).

A cause de sa portée nulle, le terme densité ne peut donc agir que dans un sous-espace sur quatre. Pour élargir son action aux autres sous-espaces, il est nécessaire de le faire évoluer vers une portée *finie* (*finie* au sens de *non nulle*).

III.1.2 Trois extensions possibles vers une portée finie

L'extension la plus simple du terme densité consiste à remplacer dans l'expression (III.1) la fonction δ de Dirac par une Gaussienne de portée μ_3 :

$$t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \quad (\text{III.3})$$

↓

$$t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right). \quad (\text{III.4})$$

En posant $W_3 = t_0$ et $B_3 = t_0 x_0$, la nouvelle expression V_{dens}^{P1} du terme densité que l'on propose est donc :

$$V_{dens}^{P1} = (W_3 + B_3 P_\sigma) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right). \quad (\text{III.5})$$

Dans le cas d'une interaction de portée nulle, $P_r = 1$ et la condition d'antisymétrie des états quantiques $P_r P_\sigma P_\tau = -1$ devenait $P_\sigma P_\tau = -1$. Appliqué sur un état d'isospin T , l'opérateur d'échange d'isospin vaut $P_\tau = (-1)^{T+1}$, son carré vaut donc 1. En utilisant cette relation $P_\tau^2 = 1$, on trouve, à partir de la condition d'antisymétrie $P_\sigma P_\tau = -1$, que $P_\tau = -P_\sigma$. Par conséquent, dans le cas d'une interaction de portée nulle, les opérateurs P_σ et P_τ sont égaux au signe près. Ainsi, on peut ne faire intervenir qu'un seul d'entre eux sans perdre aucune généralité. Par exemple, dans l'expression (III.1) (idem (III.3)), seul l'opérateur P_σ est utilisé.

Dans le cas d'une interaction de portée finie, l'opérateur d'échange d'espace n'est plus égal à 1, $P_r \neq 1$, et donc les opérateurs P_σ et P_τ ne se correspondent plus par changement de signe, $P_\tau \neq -P_\sigma$. L'inclusion de l'opérateur P_τ dans la forme analytique de l'interaction devient alors justifiée et permet une généralisation de l'expression (III.5) de V_{dens}^{P1} sous la forme :

$$V_{dens}^{P1} = (W_3 + B_3 P_\sigma - H_3 P_\tau - M_3 P_\sigma P_\tau) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right). \quad (\text{III.6})$$

Cette expression (III.6) de V_{dens}^{P1} est la première proposition d'extension du terme densité. La densité, élevée à la puissance α , $\rho^\alpha(\vec{R})$, est prise au centre de masse des deux nucléons $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$. On peut aussi choisir d'inclure la dépendance en densité sous la forme $\rho^{\frac{\alpha}{2}}(\vec{r}_1) \rho^{\frac{\alpha}{2}}(\vec{r}_2)$ ou encore $\frac{\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)}{2}$, ce qui permet d'écrire deux nouvelles propositions d'extension, V_{dens}^{P2} et V_{dens}^{P3} ,

$$V_{dens}^{P2} = (W_3 + B_3 P_\sigma - H_3 P_\tau - M_3 P_\sigma P_\tau) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \rho^{\frac{\alpha}{2}}(\vec{r}_1) \rho^{\frac{\alpha}{2}}(\vec{r}_2), \quad (III.7)$$

$$V_{dens}^{P3} = (W_3 + B_3 P_\sigma - H_3 P_\tau - M_3 P_\sigma P_\tau) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \frac{\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)}{2}. \quad (III.8)$$

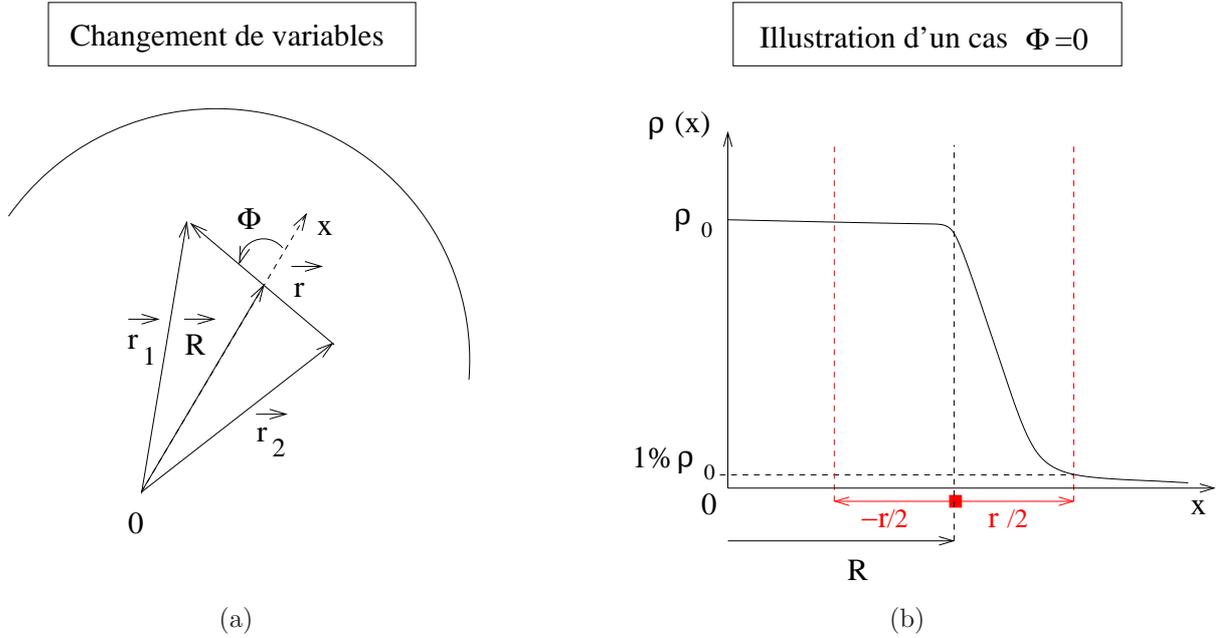


FIG. III.1 – Partie (a) : Illustration du changement de variables définissant les coordonnées relative \vec{r} et centre de masse \vec{R} à partir des vecteurs positions \vec{r}_1 et \vec{r}_2 des deux nucléons. Partie (b) : Profil de densité $\rho(x)$ le long de la direction Ox .

Appelons $V_{dens}^{Pn}[X]$ la partie spatiale de l'interaction V_{dens}^{Pn} , avec $n = 1, 2, 3$, et faisons un changement de variable pour utiliser les variables relative $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ et centre de masse $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$. Ce changement de variable, schématisé sur la Fig. III.1(a), conduit aux expressions :

$$V_{dens}^{P1}[X] = \frac{e^{-\frac{r^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3\sqrt{\pi})^3} \rho^\alpha \left(\vec{R} \right), \quad (\text{III.9})$$

$$V_{dens}^{P2}[X] = \frac{e^{-\frac{r^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3\sqrt{\pi})^3} \rho^{\frac{\alpha}{2}} \left(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2} \right) \rho^{\frac{\alpha}{2}} \left(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2} \right), \quad (\text{III.10})$$

$$V_{dens}^{P3}[X] = \frac{e^{-\frac{r^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3\sqrt{\pi})^3} \frac{\rho^\alpha \left(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2} \right) + \rho^\alpha \left(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2} \right)}{2}. \quad (\text{III.11})$$

La Fig. III.1(b) illustre le cas particulier où l'angle $\Phi = (\vec{R}, \vec{r})$ entre les vecteurs \vec{R} et \vec{r} est nul. Ces deux vecteurs sont alors alignés selon la direction Ox . Le profil de densité $\rho(x)$ le long de cette direction est représenté à partir du centre du noyau correspondant au point O . En ce point, et jusqu'à la surface du noyau, la densité est égale à la densité de saturation ρ_0 . A la traversée de la surface, la densité diminue progressivement pour atteindre des valeurs négligeables (1% ρ_0), puis nulles, à l'extérieur du noyau. Sur la Fig. III.1(b), le centre de masse des deux nucléons \vec{R} est situé à l'intérieur du noyau, à proximité de la surface. La densité en ce point est $\rho(\vec{R}) = \rho_0$. Les deux nucléons, positionnés en $\left(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2} \right)$ et $\left(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2} \right)$, ressentent les densités ρ_0 et $\rho_0/100$ respectivement. Dans ce cas particulier, les expressions (III.9), (III.10) et (III.11) s'écrivent :

$$\begin{aligned} V_{dens}^{P1}[X] &= \frac{e^{-\frac{r^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3\sqrt{\pi})^3} \rho_0^\alpha, \\ V_{dens}^{P2}[X] &= \frac{e^{-\frac{r^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3\sqrt{\pi})^3} \left(\frac{\rho_0}{100} \right)^{\frac{\alpha}{2}} \rho_0^{\frac{\alpha}{2}} \sim 0, \\ V_{dens}^{P3}[X] &= \frac{e^{-\frac{r^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3\sqrt{\pi})^3} \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_0}{100} \right)^\alpha + \rho_0^\alpha \right] \sim \frac{e^{-\frac{r^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3\sqrt{\pi})^3} \frac{1}{2} \rho_0^\alpha. \end{aligned}$$

Les expressions de $V_{dens}^{Pn}[X]$ avec $n = 1, 2, 3$ donnent des résultats différents dans la configuration de la Fig. III.1(b). Cette configuration particulière montre donc bien que les trois propositions d'extension du terme densité ne sont pas équivalentes entre elles.

III.1.3 La nouvelle forme analytique du terme densité

Il faut maintenant choisir une des trois extensions du terme densité proposées dans la partie précédente. Il est difficile de motiver un choix sur des critères de Physique. En effet, toutes ces extensions sont des postulats et il est impossible de dire laquelle simule le mieux la dynamique des nucléons au sein du noyau.

Ce seront donc des critères techniques qui guideront notre choix. L'extension que l'on retiendra sera celle qui, une fois implémentée dans nos codes de champ moyen, coûtera le moins cher en temps de calcul.

Dans tous nos codes de calcul, les quantités de base à évaluer sont les éléments de matrice de l'interaction. A partir de ces éléments de matrice, on construit le champ Hartree-Fock Γ et le champ d'appariement Δ pour calculer des observables comme le rayon, l'énergie de liaison, ou le moment d'inertie du noyau. Le temps d'exécution du programme dépend donc directement du temps de calcul des éléments de matrice de l'interaction. On a par conséquent tout intérêt à choisir l'extension du terme densité qui minimise le temps de calcul des éléments de matrice. Pour évaluer ce temps de calcul, il faut expliciter les éléments de matrice associés aux extensions V_{dens}^{Pn} , $n = 1, 2, 3$. On peut s'affranchir de la partie spin-isospin ($W_3 + B_3P_\sigma - H_3P_\tau - M_3P_\sigma P_\tau$) qui est la même pour les trois extensions et se limiter aux parties spatiales $V_{dens}^{Pn}[X]$, $n = 1, 2, 3$. Les éléments de matrice sont pris entre des états d'oscillateur $|a\rangle = |n_a, l_a, m_a\rangle$ labellés par le nombre quantique principal n_a , le moment cinétique orbital l_a et sa projection m_a .

L'élément de matrice de l'extension $V_{dens}^{Pn}[X]$, avec $n = 1, 2$ ou 3 , s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle a, b | V_{dens}^{Pn}[X] | c, d \rangle &= \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi_a^*(\vec{r}_1, b) \varphi_b^*(\vec{r}_2, b) V_{dens}^{Pn}[X] \varphi_c(\vec{r}_1, b) \varphi_d(\vec{r}_2, b) \\ &= \sum_{\mu, \nu} T_{a,c}^\mu T_{b,d}^\nu \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi_0(\vec{r}_1, b) \varphi_0(\vec{r}_2, b) V_{dens}^{Pn}[X] \varphi_\mu(\vec{r}_1, b) \varphi_\nu(\vec{r}_2, b) \\ &= \sum_{\mu, \nu} T_{a,c}^\mu T_{b,d}^\nu \langle 0, 0 | V_{dens}^{Pn}[X] | \mu, \nu \rangle, \end{aligned}$$

avec $T_{a,c}^\mu$ et $T_{b,d}^\nu$ les coefficients du développement de Gogny [127].

L'élément de matrice $\langle a, b | V_{dens}^{Pn}[X] | c, d \rangle$ peut donc être décomposé en une combinaison linéaire d'éléments de matrice plus simples du type $\langle 0, 0 | V_{dens}^{Pn}[X] | \mu, \nu \rangle$. Il suffit alors d'explicitier l'élément de matrice $\langle 0, 0 | V_{dens}^{Pn}[X] | \mu, \nu \rangle$ pour chacune des extensions, $n = 1, 2, 3$.

$$\begin{aligned} \langle P1 \rangle &= \langle 0, 0 | V_{dens}^{P1}[X] | \mu, \nu \rangle \\ &= \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi_0(\vec{r}_1, b) \varphi_0(\vec{r}_2, b) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \varphi_\mu(\vec{r}_1, b) \varphi_\nu(\vec{r}_2, b) \\ &= \sum_{\lambda, \sigma} M_{\mu, \nu, \lambda, \sigma} \int d^3R' d^3r' \varphi_0(\vec{r}', b) \varphi_0(\vec{R}', b) \varphi_\sigma(\vec{r}', b) \varphi_\lambda(\vec{R}', b) \frac{e^{-\frac{2r'^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \rho^\alpha \left(\frac{\vec{R}'}{\sqrt{2}} \right) \\ &= \sum_{\lambda, \sigma} M_{\mu, \nu, \lambda, \sigma} I_\sigma \int d^3R' \varphi_0(\vec{R}', b) \varphi_\lambda(\vec{R}', b) \rho^\alpha \left(\frac{\vec{R}'}{\sqrt{2}} \right), \end{aligned}$$

où $M_{\mu, \nu, \lambda, \sigma}$ sont les coefficients de Moshinsky, et l'on a posé :

$$\begin{aligned} I_\sigma &= \int d^3r' \varphi_0(\vec{r}', b) \varphi_\sigma(\vec{r}', b) \frac{e^{-\frac{2r'^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \\ &= \delta_{l_\sigma, 0} \delta_{m_\sigma, 0} \frac{1}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \sqrt{2 \frac{(n_\sigma + 1/2)!}{n_\sigma!}} G^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{G-1}{G} \right)^{n_\sigma}, \quad G = 1 + 2 \frac{b^2}{\mu_3^2}. \end{aligned}$$

Pour calculer l'élément de matrice $\langle P1 \rangle = \langle 0, 0 | V_{dens}^{P1}[X] | \mu, \nu \rangle$, une intégrale numérique sur la variable \vec{R}' doit être effectuée pour chaque valeur de λ . Le résultat, une fois stocké, doit être multiplié par I_σ et par les coefficients de Moshinski $M_{\mu,\nu,\lambda,\sigma}$ au sein d'une somme sur λ et σ .

Pour la deuxième extension $V_{dens}^{P2}[X]$, cet élément de matrice s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle P2 \rangle &= \langle 0, 0 | V_{dens}^{P2}[X] | \mu, \nu \rangle \\ &= \int d^3 r_1 \varphi_0(\vec{r}_1, b) \rho^{\frac{\alpha}{2}}(\vec{r}_1) \varphi_\mu(\vec{r}_1, b) \int d^3 r_2 \varphi_0(\vec{r}_2, b) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \rho^{\frac{\alpha}{2}}(\vec{r}_2) \varphi_\nu(\vec{r}_2, b) . \end{aligned}$$

Il n'est pas possible d'écrire l'élément de matrice $\langle P2 \rangle$ comme le produit d'une intégrale sur \vec{r}_1 et d'une intégrale sur \vec{r}_2 . Ces deux intégrations sont couplées par la Gaussienne $e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}$. Pour l'élément de matrice $\langle P1 \rangle$, nous avons gagné à utiliser les variables relative \vec{r}' et centre de masse \vec{R}' . Dans le cas de l'élément de matrice $\langle P2 \rangle$, ce changement de variables permet de ne faire intervenir plus qu'une seule variable, \vec{r}' , dans la Gaussienne, $e^{-\frac{r'^2}{\mu_3^2}}$. Cependant, les variables \vec{r}' et \vec{R}' se retrouvent couplées par la densité en \vec{r}_1 , $\rho^{\frac{\alpha}{2}}\left(\frac{\vec{R}' + \vec{r}'}{\sqrt{2}}\right)$, ou en \vec{r}_2 , $\rho^{\frac{\alpha}{2}}\left(\frac{\vec{R}' - \vec{r}'}{\sqrt{2}}\right)$. Les intégrales sur les variables \vec{r}' et \vec{R}' ne peuvent donc pas être séparées, on rencontre le même problème qu'avec les variables \vec{r}_1 et \vec{r}_2 .

Finalemnt, pour calculer l'élément de matrice $\langle P2 \rangle = \langle 0, 0 | V_{dens}^{P2}[X] | \mu, \nu \rangle$, il faut implémenter deux intégrations numériques imbriquées, ce qui coûte cher en temps de calcul.

L'élément de matrice associé à la troisième extension $V_{dens}^{P3}[X]$ s'exprime :

$$\begin{aligned} \langle P3 \rangle &= \langle 0, 0 | V_{dens}^{P3}[X] | \mu, \nu \rangle \\ &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 \varphi_0(\vec{r}_1, b) \varphi_0(\vec{r}_2, b) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \frac{1}{2} [\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)] \varphi_\mu(\vec{r}_1, b) \varphi_\nu(\vec{r}_2, b) \\ &= \int d^3 r_1 \varphi_0(\vec{r}_1, b) \frac{1}{2} \rho^\alpha(\vec{r}_1) \varphi_\mu(\vec{r}_1, b) \int d^3 r_2 \varphi_0(\vec{r}_2, b) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \varphi_\nu(\vec{r}_2, b) \\ &\quad + \int d^3 r_2 \varphi_0(\vec{r}_2, b) \frac{1}{2} \rho^\alpha(\vec{r}_2) \varphi_\nu(\vec{r}_2, b) \int d^3 r_1 \varphi_0(\vec{r}_1, b) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \varphi_\mu(\vec{r}_1, b) \end{aligned}$$

On définit la fonction $J_\nu(\vec{r}_1)$ comme :

$$\begin{aligned} J_\nu(\vec{r}_1) &= \int d^3 r_2 \varphi_0(\vec{r}_2, b) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}}}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \varphi_\nu(\vec{r}_2, b) \\ &= (\pi b^2 G)^{-\frac{3}{4}} G^{-\frac{2n_\nu + l_\nu}{2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{\vec{r}_1^2}{G b^2}} \varphi_\nu\left(\vec{r}_1, b \sqrt{G}\right) , G = 1 + \frac{\mu_3^2}{b^2} . \end{aligned}$$

L'expression finale de l'élément de matrice $\langle P3 \rangle$ prend la forme :

$$\begin{aligned} \langle P3 \rangle = & \int d^3r_1 \varphi_0(\vec{r}_1, b) \frac{1}{2} \rho^\alpha(\vec{r}_1) \varphi_\mu(\vec{r}_1, b) J_\nu(\vec{r}_1) \\ & + \int d^3r_2 \varphi_0(\vec{r}_2, b) \frac{1}{2} \rho^\alpha(\vec{r}_2) \varphi_\nu(\vec{r}_2, b) J_\mu(\vec{r}_2) \end{aligned}$$

Pour calculer l'élément de matrice $\langle P3 \rangle = \langle 0, 0 | V_{dens}^{P3}[X] | \mu, \nu \rangle$, il suffit de sommer les résultats de deux intégrales numériques de formes identiques.

Parmi les trois extensions proposées $V_{dens}^{Pn}[X]$, avec $n = 1, 2, 3$, la troisième est la plus avantageuse en ce qui concerne le temps de calcul. C'est celle qui fait intervenir le moins d'opérations numériques pour le calcul des éléments de matrice.

C'est donc l'extension

$$V_{dens}^{P3} = (W_3 + B_3 P_\sigma - H_3 P_\tau - M_3 P_\sigma P_\tau) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}} \rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \frac{1}{2} \quad (\text{III.12})$$

que nous avons choisie pour faire évoluer le terme densité de l'interaction de Gogny vers une portée finie.

III.2 La nouvelle procédure de détermination des paramètres de l'interaction

Avec la nouvelle forme de portée finie (III.12) pour le terme densité, l'interaction de Gogny s'écrit

$$\begin{aligned} V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = & \sum_{i=1,2} (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau) e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_i^2}} \\ & + (W_3 + B_3 P_\sigma - H_3 P_\tau - M_3 P_\sigma P_\tau) \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu_3^2}} \rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)}{(\mu_3 \sqrt{\pi})^3} \frac{1}{2} \\ & + i W_{ls} \overleftarrow{\nabla}_{12} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \overrightarrow{\nabla}_{12} \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2). \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

Cette nouvelle expression de l'interaction de Gogny contient 17 paramètres ajustables,

$$\left\{ V_{12}^{Gogny} \right\} = \{ W_1, B_1, H_1, M_1, \mu_1, W_2, B_2, H_2, M_2, \mu_2, W_3, B_3, H_3, M_3, \mu_3, \alpha, W_{ls} \}.$$

Pour déterminer les valeurs de ces paramètres, les équations présentées au chapitre I peuvent être reprises. Ces équations concernaient

1. l'énergie et le rayon de charge de l' ^{16}O et du ^{90}Zr ,
2. les éléments de matrice de l'appariement,
3. les énergies des états $2s_{1/2}$, neutron et proton, du ^{48}Ca .

Dans le schéma général de contraintes de la Fig. I.17, ces équations avaient été séparées sous la forme de deux systèmes. Avec la nouvelle expression analytique (III.13) de l'interaction de Gogny, ces deux systèmes de contraintes doivent être réécrits.

III.2.1 Le premier système de contraintes

Le premier système de contraintes rassemble 4 équations relatives à l'énergie et au rayon de charge de l' ^{16}O et du ^{90}Zr . L'énergie, calculée à l'approximation Hartree-Fock restreint (HFR), est notée $E^{HFR}[\text{X}]$ où X permet de distinguer le noyau, X=O pour l' ^{16}O et X=Zr pour le ^{90}Zr . Avec la forme analytique (III.13) de l'interaction de Gogny, cette énergie s'exprime par

$$\begin{aligned}
 E^{HFR}[\text{X}] = & T[\text{X}](b_{\text{X}}) + \sum_{i=1,2} F_i^D[\text{X}](b_{\text{X}}) (4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i) \\
 & + \sum_{i=1,2} F_i^E[\text{X}](b_{\text{X}}) (4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i) \\
 & + G_3^D[\text{X}](b_{\text{X}}) (4W_3 + 2B_3 - 2H_3 - M_3) \\
 & + G_3^E[\text{X}](b_{\text{X}}) (4M_3 + 2H_3 - 2B_3 - W_3), \quad (\text{III.14})
 \end{aligned}$$

- avec
- b_{X} : le paramètre d'oscillateur du noyau X,
 - $T[\text{X}](b_{\text{X}})$: l'énergie cinétique du noyau X,
 - $F_{i=1,2}^{D,E}[\text{X}](b_{\text{X}})$: les contributions spatiales directe (D) et échange (E) de la Gaussienne de portée $\mu_{i=1,2}$ pour le noyau X,
 - $G_3^{D,E}[\text{X}](b_{\text{X}})$: les contributions spatiales directe (D) et échange (E) du terme densité de portée μ_3 pour le noyau X.

Le rayon de charge du noyau X, à l'approximation Hartree-Fock restreint, est proportionnel au paramètre d'oscillateur b_{X} . Ce dernier est déterminé de manière à minimiser l'énergie, et doit donc vérifier la condition $\frac{dE^{HFR}}{db_{\text{X}}}[\text{X}] = 0$, ce qui s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{db_{\text{X}}}(T[\text{X}](b_{\text{X}})) + & \sum_{i=1,2} \frac{d}{db_{\text{X}}}(F_i^D[\text{X}](b_{\text{X}})) (4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i) \\
 & + \sum_{i=1,2} \frac{d}{db_{\text{X}}}(F_i^E[\text{X}](b_{\text{X}})) (4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i) \\
 & + \frac{d}{db_{\text{X}}}(G_3^D[\text{X}](b_{\text{X}})) (4W_3 + 2B_3 - 2H_3 - M_3) \\
 & + \frac{d}{db_{\text{X}}}(G_3^E[\text{X}](b_{\text{X}})) (4M_3 + 2H_3 - 2B_3 - W_3) = 0. \quad (\text{III.15})
 \end{aligned}$$

Dans les développements (III.14) et (III.15) apparaissent les paramètres du nouveau terme densité, W_3 , B_3 , H_3 , M_3 , μ_3 et α . Pour affecter des valeurs à ces nouveaux paramètres, la procédure la plus simple consiste à les faire varier entre une valeur initiale I et une valeur finale F , $W_3 \in [W_3^I, W_3^F]$, $B_3 \in [B_3^I, B_3^F]$, ..., $\alpha \in [\alpha^I, \alpha^F]$. Dans un premier temps, nous utilisons cette procédure seulement pour la portée μ_3 et la puissance de la densité α . Il reste donc à introduire quatre équations pour déterminer les valeurs des paramètres W_3 , B_3 , H_3 et M_3 par inversion.

Deux de ces quatre équations sont obtenues à partir de l'énergie de liaison et du rayon de charge d'un troisième noyau, l' ^{100}Sn . Leur développement correspond aux expressions (III.14) et (III.15) appliquées au noyau d' ^{100}Sn , ce que l'on spécifie avec la variable X , $X=\text{Sn}$. Les équations (III.14) et (III.15) écrites pour les trois noyaux, $X=\{\text{O}, \text{Zr}, \text{Sn}\}$, permettent donc de construire un premier système 6-6. L'inversion de ce système donne accès aux 6 combinaisons linéaires de paramètres, $(4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i)_{i=1,2,3}$ et $(4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i)_{i=1,2,3}$.

III.2.2 Le second système de contraintes

Le second système de contraintes, présenté dans le Chapitre I, contient 4 équations. Les deux premières sont obtenues en calculant les éléments de matrice de l'appariement dans les états $1s$ et $2s$ de l'oscillateur harmonique. Ces éléments de matrice recouplés à un spin nul, $S=0$, et un isospin égal à un, $T=1$, s'écrivent maintenant :

$$\begin{aligned} \langle 1s \ 1s | V_{12}^{\text{Gogny}} | 1s \ 1s \rangle_{(S=0, T=1)} &= \sum_{i=1,2} f_i^{1s}(\mu_i) (W_i - B_i - H_i + M_i) \\ &\quad + g^{1s}(\mu_3, \alpha) (W_3 - B_3 - H_3 + M_3) \\ &= V_{1s}, \end{aligned} \quad (\text{III.16})$$

$$\begin{aligned} \langle 2s \ 2s | V_{12}^{\text{Gogny}} | 2s \ 2s \rangle_{(S=0, T=1)} &= \sum_{i=1,2} f_i^{2s}(\mu_i) (W_i - B_i - H_i + M_i) \\ &\quad + g^{2s}(\mu_3, \alpha) (W_3 - B_3 - H_3 + M_3) \\ &= V_{2s}. \end{aligned} \quad (\text{III.17})$$

Les fonctions $f_i^{1s}(\mu_i)$ et $f_i^{2s}(\mu_i)$ associées aux deux portées du terme central $i = 1, 2$, ainsi que les fonctions $g^{1s}(\mu_3, \alpha)$ et $g^{2s}(\mu_3, \alpha)$ sont définies par les expressions (B.9), (B.10), (B.11) et (B.12) de l'Annexe B. Ces deux dernières fonctions, g^{1s} et g^{2s} , font apparaître une dépendance en densité explicite dans les éléments de matrice de l'appariement. Grâce à sa portée finie, le nouveau terme densité peut en effet prendre part à la description des corrélations d'appariement sans risques de divergences. Les valeurs V_{1s} et V_{2s} attribuées à ces deux éléments de matrice permettent d'ajuster l'interaction d'appariement.

La troisième équation concerne les énergies des états $2s_{1/2}$ neutron $\varepsilon_{2s_{1/2}}^{\nu}$ et proton $\varepsilon_{2s_{1/2}}^{\pi}$ dans le ^{48}Ca . La différence de ces énergies, $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{2s_{1/2}}^{\nu} - \varepsilon_{2s_{1/2}}^{\pi}$, s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon &= \sum_{i=1,2} g_D(\mu_i) (2H_i + M_i) + g_E(\mu_i) (2B_i + W_i) \\ &\quad + h_D(\mu_3, \alpha) (2H_3 + M_3) + h_E(\mu_3, \alpha) (2B_3 + W_3). \end{aligned} \quad (\text{III.18})$$

Les fonctions g_D , h_D et g_E , h_E associées aux termes direct et échange sont développées en Annexe B avec les expressions (B.15) et (B.17).

Enfin, la quatrième équation consiste à affecter une valeur B_c au coefficient B_1 , $B_1 = B_c$. Cette valeur peut décrire un intervalle défini par l'utilisateur, $B_c \in [B_c^I, B_c^F]$.

Pour déterminer complètement les valeurs des 12 paramètres $(W_i, B_i, H_i, M_i)_{i=1,2,3}$, il reste à définir deux autres équations. Pour cela, nous utilisons deux points A et B de l'équation d'état variationnelle de la matière neutronique proposée par Friedman et Pandharipande (FP). Les coordonnées de ces points sont données par la densité de matière ρ_A ou ρ_B et l'énergie par particule $(E/A)_A^{FP}$ ou $(E/A)_B^{FP}$. Pour que l'équation d'état f , calculée avec l'interaction de Gogny (III.13) et définie en Annexe A par la relation (A.32), passe par ces deux points, les deux équations suivantes doivent être vérifiées,

$$\left(\frac{E}{A}\right)_A^{FP} = f \left[\rho_A, \{(2W_i + B_i - 2H_i - M_i), (2M_i + H_i - 2B_i - W_i), \mu_i\}_{i=1,2,3} \right], \quad (\text{III.19})$$

$$\left(\frac{E}{A}\right)_B^{FP} = f \left[\rho_B, \{(2W_i + B_i - 2H_i - M_i), (2M_i + H_i - 2B_i - W_i), \mu_i\}_{i=1,2,3} \right]. \quad (\text{III.20})$$

Les 6 équations du deuxième système de contraintes sont alors complètement définies. Elles font intervenir 16 combinaisons linéaires de paramètres, $(W_i - B_i - H_i + M_i)_{i=1,2,3}$, $(2H_i + M_i)_{i=1,2,3}$, $(2B_i + W_i)_{i=1,2,3}$, B_1 , $(2W_i + B_i - 2H_i - M_i)_{i=1,2,3}$, $(2M_i + H_i - 2B_i - W_i)_{i=1,2,3}$. Ces combinaisons ne sont pas indépendantes et peuvent être exprimées à partir des 12 combinaisons indépendantes suivantes, $(4W_i + 2B_i - 2H_i - M_i)_{i=1,2,3}$, $(4M_i + 2H_i - 2B_i - W_i)_{i=1,2,3}$, $(W_i - B_i - H_i + M_i)_{i=1,2,3}$ et $(W_i + B_i - H_i - M_i)_{i=1,2,3}$. Les 6 premières de ces combinaisons sont déterminées par l'inversion du premier système de contraintes. Les 6 dernières constituent donc les inconnues du deuxième système de contraintes. La résolution de ces deux systèmes de contraintes donne finalement accès aux valeurs des 12 paramètres $(W_i, B_i, H_i, M_i)_{i=1,2,3}$.

En tentant de résoudre les équations des deux systèmes de contraintes, nous avons parfois rencontré des difficultés, notamment lorsque la portée μ_3 prenait des valeurs particulières. Pour cette raison, nous avons analysé la stabilité du système de contraintes. Un système devient instable lorsqu'une petite perturbation de ses équations engendre de larges variations de la solution. Pour tester la stabilité de nos deux systèmes d'équations, nous allons les perturber en modifiant légèrement la valeur de la portée μ_3 du terme dépendant de la densité. Plus précisément, nous faisons varier progressivement cette portée de la valeur initiale $\mu_3^I = 0.640$ fm à la valeur finale $\mu_3^F = 0.644$ fm. La variation totale de la portée sera donc de $\Delta\mu_3 = \frac{0.644-0.640}{(0.644+0.640)/2} = 0.62\%$, ce qui revient à perturber très faiblement les deux systèmes de contraintes. Comment ces derniers réagissent-ils à cette légère perturbation ? La sensibilité du premier système de contraintes est représentée sur les Fig. III.2(a) et III.2(c). Les solutions de ce système les plus sensibles aux variations de la portée μ_3 sont les combinaisons linéaires $u_3 = (4W_3 + 2B_3 - 2H_3 - M_3)$ et $v_3 = (4M_3 + 2H_3 - 2B_3 - W_3)$. Nous les rassemblons sous la forme d'un vecteur, $w_3 = (u_3, v_3)_{\mu_3}$, dont la norme et la direction dépendent de la portée μ_3 . La Fig. III.2(a) montre que, lorsque la portée μ_3 varie entre les valeurs $\mu_3^I = 0.640$ fm et $\mu_3^F = 0.644$ fm, le vecteur solution $w_3 = (u_3, v_3)_{\mu_3}$ évolue de manière continue entre les vecteurs $w_3^I = (u_3, v_3)_{\mu_3^I} = (4129, -1510)$ et $w_3^F = (u_3, v_3)_{\mu_3^F} = (4008, -1430)$. Pour mesurer l'écart du vecteur w_3 à sa valeur initiale w_3^I , on utilise le vecteur différence $\delta w_3 = w_3 - w_3^I$, et plus particulièrement sa norme $\|\delta w_3\|$.

De façon à obtenir une mesure relative, on définit encore le rapport $\eta_w = \|\delta w_3\|/\|w_3^I\|$ entre les normes des vecteurs δw_3 et w_3^I . Ce rapport, représenté sur la Fig. III.2(c), augmente linéairement en fonction de la portée μ_3 , jusqu'à atteindre $\eta_w^F = 3.30\%$ pour $\mu_3^F = 0.644$ fm. Une variation de $\frac{0.644-0.640}{(0.644+0.640)/2} = 0.62\%$ de la portée μ_3 engendre donc une dispersion de 3.30% du vecteur solution w_3 par rapport à sa valeur initiale w_3^I . Si l'on définit la sensibilité χ d'un système comme le rapport entre les variations relatives de la solution et de la perturbation, on obtient pour le premier système de contraintes $\chi_1 = \frac{3.30}{0.62} = 5.32$. En d'autres termes, lorsqu'on perturbe le système en faisant varier de 1% la portée μ_3 , la solution du système varie de 5.32%. Le premier système de contraintes est donc très sensible aux perturbations de μ_3 . Cette sensibilité reste néanmoins contrôlable et n'empêche pas une recherche efficace des paramètres de l'interaction.

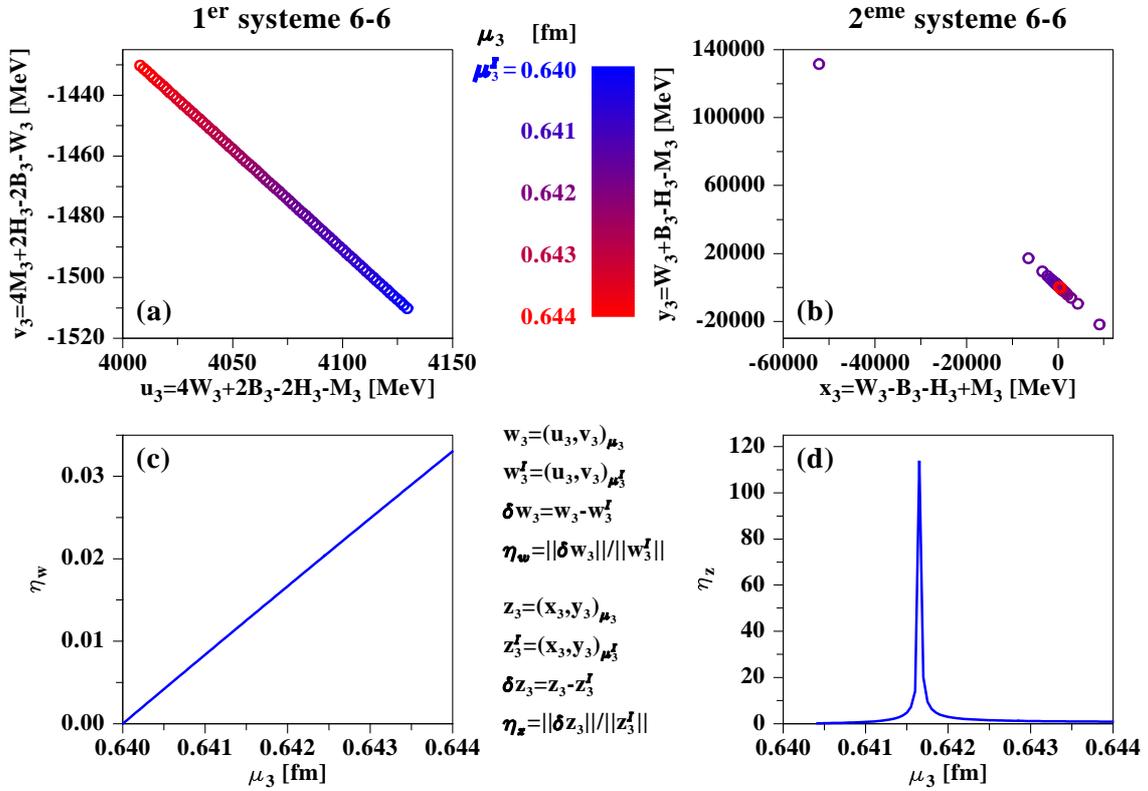


FIG. III.2 – Partie (a) : Evolution du vecteur $w_3 = (u_3, v_3)_{\mu_3}$, solution du premier système 6-6, lorsque la portée varie entre $\mu_3^I = 0.640$ fm et $\mu_3^F = 0.644$ fm. Partie (b) : Idem pour le vecteur $z_3 = (x_3, y_3)_{\mu_3}$, solution du second système 6-6. Partie (c) : Variation, en fonction de la portée μ_3 , du rapport η_w défini comme la mesure relative de l'écart du vecteur w_3 à sa valeur initiale w_3^I . Partie (d) : Idem pour le rapport η_z , mesure relative de l'écart du vecteur z_3 à sa valeur initiale z_3^I .

Les Fig. III.2(b) et III.2(d) concernent la sensibilité du deuxième système de contraintes. Les solutions de ce système relatives à la portée μ_3 sont les combinaisons linéaires $x_3 = (W_3 - B_3 - H_3 + M_3)$ et $y_3 = (W_3 + B_3 - H_3 - M_3)$. On peut considérer ces dernières comme les composantes du vecteur solution $z_3 = (x_3, y_3)_{\mu_3}$. La Fig. III.2(b) illustre

la très forte dispersion du vecteur z_3 lorsque la portée décrit l'intervalle $\mu_3 \in [0.640, 0.644]$ fm. Pour quantifier cette dispersion, on utilise la même mesure que dans le cas du premier système. Cette mesure est donnée par le rapport $\eta_z = \|\delta z_3\|/\|z_3^I\|$ entre les normes des vecteurs $\delta z_3 = (z_3 - z_3^I)$ et $z_3^I = (x_3, y_3)_{\mu_3^I}$. La Fig. III.2(d) montre l'évolution de ce rapport en fonction de la portée μ_3 . Une discontinuité apparaît pour la portée $\mu_3 = 0.6417$ fm, le rapport atteint alors la valeur $\eta_z = 11400\%$. Pour une modification de $\frac{0.6417-0.6400}{(0.6417+0.6400)/2} = 0.27\%$ de la portée, on assiste donc à une variation de 11400% de la solution du système, soit une sensibilité $\chi_2 = \frac{11400}{0.27} = 42222$. Cette étude révèle la très forte instabilité du deuxième système de contraintes. Les paramètres de l'interaction sont donc mal déterminés par l'inversion de ce système, leurs valeurs sont très incertaines et l'interaction doit être rejetée. Le comportement instable du deuxième système de contraintes indique que les équations de ce système sont quasiment linéairement dépendantes, on parle alors de système mal conditionné. Pour s'affranchir de ce problème, il est nécessaire de modifier les équations qui constituent ce système. Nous avons donc remplacé les équations (III.19) et (III.20) relatives à l'équation d'état de la matière neutronique par deux contraintes simples sur les valeurs des paramètres W_3 et B_3 . Les valeurs de ces deux paramètres sont tout simplement variées sur des intervalles définis par l'utilisateur, $W_3 \in [W_3^I, W_3^F]$ et $B_3 \in [B_3^I, B_3^F]$. Nous avons choisi d'étendre cette prescription aux paramètres H_3 et M_3 . Ces derniers décrivent donc les intervalles $H_3 \in [H_3^I, H_3^F]$ et $M_3 \in [M_3^I, M_3^F]$, ce qui fournit deux équations supplémentaires. Ces équations se sont substituées aux équations portant sur l'énergie et le rayon de charge de l'¹⁰⁰Sn dans le premier système de contraintes.

Pour assurer la stabilité des systèmes d'équations à inverser, nous sommes donc revenus à la procédure simple qui consiste à faire varier les paramètres du terme densité sur des intervalles prédéfinis, $W_3 \in [W_3^I, W_3^F]$, $B_3 \in [B_3^I, B_3^F]$, ... A l'issue de cette procédure, ne seront gardés que les quadruplets (W_3, B_3, H_3, M_3) qui permettent de reproduire correctement :

- des quantités globales comme l'incompressibilité, l'énergie de symétrie, la masse effective, ... dans la matière nucléaire infinie,
- quelques points (en général, huit) de l'équation d'état de la matière neutronique,
- des quantités plus fines comme l'énergie de liaison et le rayon de charge du ²⁰⁸Pb,
- les propriétés d'appariement dans les noyaux, principalement gouvernées par la composante S=0, T=1 de l'interaction.

Les valeurs des autres paramètres (W_1, B_1, H_1, M_1) et (W_2, B_2, H_2, M_2) sont déterminées par inversion des deux systèmes 4-4 déjà présentés dans le Chapitre I. Les équations qui constituent ces deux systèmes concernent l'énergie de liaison et le rayon de charge de l'¹⁶O et du ⁹⁰Zr, deux éléments de matrice de l'appariement et la différence d'énergie des états 2s_{1/2}, neutron et proton, du ⁴⁸Ca.

III.3 Les premières interactions, D2G₁ et D2G₂

Une fois la procédure de détermination des paramètres de l'interaction définie, il ne reste plus qu'à l'exploiter pour trouver le "meilleur" ensemble de paramètres associés à la forme (III.13) de l'interaction de Gogny. Par le qualificatif "meilleur", nous entendons

que cet ensemble de paramètres doit reproduire aussi bien les propriétés empiriques de la matière nucléaire infinie que les données expérimentales des noyaux finis. Dans le cas de la matière nucléaire infinie, nous imposons la contrainte supplémentaire suivante : la nouvelle paramétrisation de l'interaction de Gogny doit donner des résultats en accord avec les prédictions des calculs microscopiques basés sur les interactions réalistes. Ce type de prédictions concerne par exemple le comportement de l'énergie potentielle en fonction de l'impulsion au niveau de Fermi k_F dans les différents sous-espaces de spin-isospin S-T. Les résultats obtenus par le groupe de Catane [58] avec la méthode Bethe-Brueckner-Goldstone et l'interaction réaliste AV14 [36] correspondent aux courbes noires marquées par des triangles (BBG) sur la Fig. III.3. Lorsque les effets des interactions à trois corps sont pris en compte dans la méthode, les résultats symbolisés par les carrés (BBG+3C) sont obtenus. Ces résultats sont comparés aux calculs Hartree-Fock réalisés avec trois paramétrisations de l'interaction de Gogny. Les courbes bleues représentent les énergies potentielles calculées dans les différents sous-espaces S-T avec la paramétrisation D1S. Les courbes rouges, en trait pointillé, ont été obtenues avec la paramétrisation D1N. Enfin, les courbes rouges, en trait continu, correspondent aux calculs réalisés avec une paramétrisation, notée $D2G_1$, de la nouvelle forme analytique (III.13) de l'interaction de Gogny.

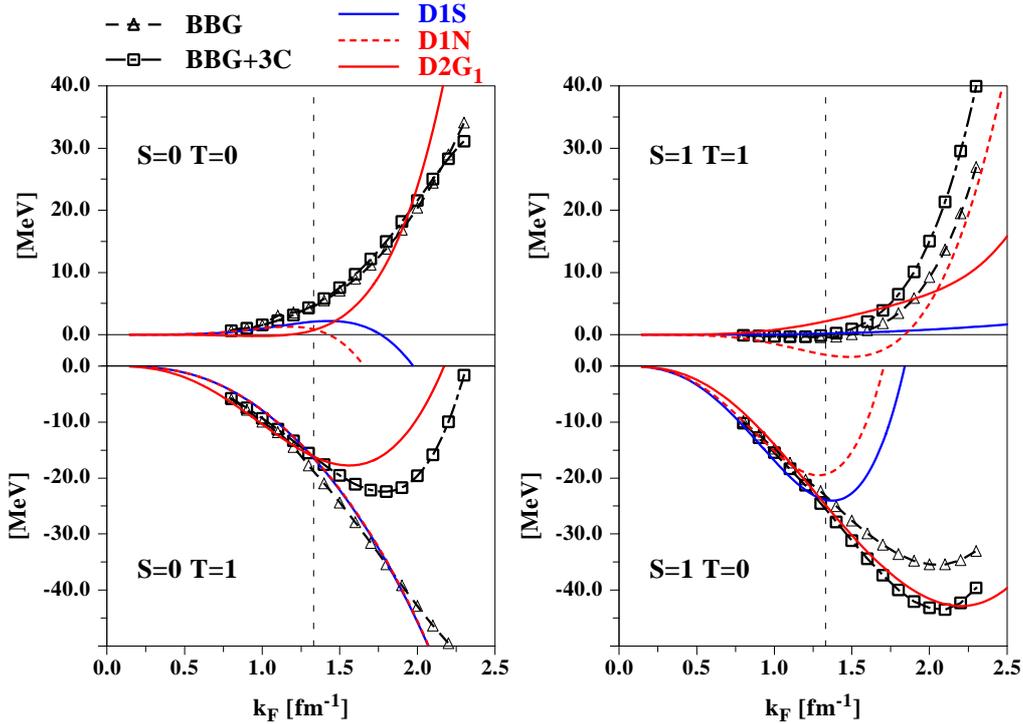


FIG. III.3 – Energie potentielle dans les différents sous-espaces ST pour D1S, D1N et $D2G_1$. Les symboles (triangles et carrés) correspondent à des calculs de type Bethe-Brueckner-Goldstone sans et avec forces à 3 corps (BBG et BBG+3C). La ligne pointillée représente le point de saturation $k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$.

Dans le sous-espace $S=0, T=0$ (singulet-impair), les paramétrisations D1S et D1N donnent une contribution attractive à partir de $k_F = 1.8 \text{ fm}^{-1}$ et $k_F = 1.5 \text{ fm}^{-1}$ respectivement. Ce résultat est en désaccord avec les calculs microscopiques basés sur l'interaction réaliste AV14 (BBG et BBG+3C) qui prédisent une énergie potentielle répulsive à toutes les densités. La nouvelle paramétrisation $D2G_1$ permet de reproduire cette contribution répulsive au-delà du point de saturation, $k_F > 1.33 \text{ fm}^{-1}$.

Dans le sous-espace $S=1, T=1$ (triplet-impair), la paramétrisation D1N se caractérise par l'attraction qu'elle produit aux densités voisines de la saturation. Cette attraction, qui atteint 3 MeV par particule à $k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$, est plus marquée que celle prédite par les calculs microscopiques basés sur la méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone, BBG et BBG+3C. Ces derniers calculs produisent, à la densité de saturation ($k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$), une contribution attractive qui ne dépasse pas 500 keV par particule. Dès qu'on s'éloigne légèrement du point de saturation, les calculs microscopiques, BBG et BBG+3C, prédisent une énergie potentielle répulsive. La paramétrisation $D2G_1$ produit, quant à elle, une répulsion à toutes les densités.

Dans le sous-espace $S=0, T=1$ (singulet-pair), l'inclusion des interactions à trois corps modifie de manière significative les prédictions des calculs microscopiques de type Bethe-Brueckner-Goldstone. Leur effet se manifeste principalement aux densités supérieures à la saturation, $k_F > 1.33 \text{ fm}^{-1}$. A ces densités, les contributions des calculs BBG et BBG+3C deviennent alors très différentes, les interactions à trois corps apportant une contribution répulsive responsable de la remontée de la courbe BBG+3C dans le domaine $k_F > 1.80 \text{ fm}^{-1}$. Dans les interactions effectives phénoménologiques comme les interactions de Skyrme ou de Gogny, l'effet des interactions à trois corps est simulé par la dépendance en densité [128, 129]. Si cette dépendance en densité, lorsqu'elle est de portée nulle, intervient dans le sous-espace $S=0, T=1$ alors l'équation du gap d'appariement diverge. C'est la raison pour laquelle le terme densité de portée nulle des paramétrisations D1, D1S et D1N s'annule dans les états $S=0, T=1$. On ne peut donc espérer reproduire l'effet des interactions à trois corps dans le sous-espace singulet-pair avec ces paramétrisations. C'est bien ce que confirme la Fig. III.3; dans le sous-espace $S=0, T=1$, les paramétrisations D1S et D1N ne permettent pas de reproduire la remontée de la courbe BBG+3C au-delà de $k_F = 1.80 \text{ fm}^{-1}$. Aussi, l'énergie potentielle calculée avec l'une ou l'autre de ces deux paramétrisations reste très proche de la courbe BBG n'incluant pas l'effet des interactions à trois corps. Dans le cas de la paramétrisation $D2G_1$, la situation est différente. Cette paramétrisation, basée sur la forme analytique (III.13) de l'interaction de Gogny, comprend une dépendance en densité de portée finie. Cette nouvelle dépendance en densité peut donc intervenir dans les états $S=0, T=1$ sans risques de divergence de l'équation du gap. Dans le cas de la paramétrisation $D2G_1$, la contribution de la dépendance en densité dans ce sous-espace peut être mesurée par la combinaison linéaire $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3) = +1600 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{3(\alpha+1)}$. Cette contribution répulsive du terme densité se traduit par la remontée, à partir de $k_F = 1.55 \text{ fm}^{-1}$, de l'énergie potentielle calculée avec la paramétrisation $D2G_1$. Elle permet de retrouver l'effet des interactions à trois corps prédit par les calculs microscopiques représentés par la courbe BBG+3C.

C'est dans le sous-espace $S=1, T=0$ (triplet-pair) que le terme densité de portée nulle des paramétrisations D1, D1S et D1N peut agir. La dépendance en densité dans ce sous-espace

permet notamment de simuler l'effet de la force tenseur [130, 129] qui a été omise dans la forme analytique (I.1) de l'interaction de Gogny. Pour les paramétrisations D1S et D1N représentées sur la Fig. III.3, le terme densité crée une répulsion responsable de la remontée de la courbe d'énergie potentielle au-delà de la densité de saturation $\rho_0 = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ soit $k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$. Cette remontée génère un minimum dont les coordonnées précises sont $k_F = 1.35 \text{ fm}^{-1}$ et $(E/A)_{pot}^{S=0, T=1} = -23.99 \text{ MeV}$, pour la paramétrisation D1S et $k_F = 1.31 \text{ fm}^{-1}$ et $(E/A)_{pot}^{S=0, T=1} = -19.49 \text{ MeV}$, pour la paramétrisation D1N. Les calculs microscopiques s'appuyant sur la méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone, et associés aux courbes BBG et BBG+3C, prédisent ce minimum d'énergie potentielle à des densités bien plus élevées, correspondant à $k_F = 2.1 \text{ fm}^{-1}$, c'est à dire $\rho = 3.9\rho_0$. La paramétrisation $D2G_1$ incluant un terme densité de portée finie produit une énergie potentielle dont l'allure en fonction de l'impulsion de Fermi k_F est très proche de la courbe BBG+3C. Globalement, la nouvelle paramétrisation $D2G_1$ est en meilleur accord avec les calculs microscopiques BBG+3C que ne le sont les paramétrisations D1S et D1N. Les résultats BBG+3C sont obtenus par la méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone appliquée à une interaction réaliste à deux corps. Cette interaction réaliste a été ajustée pour reproduire les déphasages mesurés lors d'expériences de diffusion nucléon-nucléon et les propriétés du deutéron. De plus, les résultats BBG+3C prennent en compte, selon la méthode de Lejeune *et al.* [63], l'effet des interactions à trois corps. Par conséquent, en reproduisant les prédictions des calculs BBG+3C dans les différents sous-espaces S-T, la paramétrisation $D2G_1$ prend mieux en compte les contraintes issues du problème à deux nucléons et propose une description plus réaliste du rôle des interactions à trois corps.

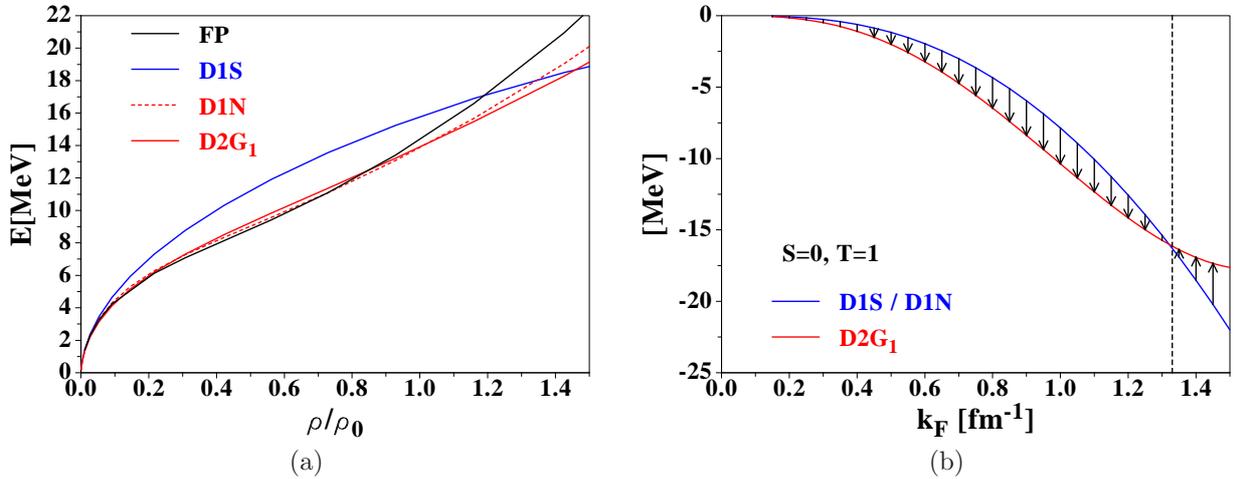


FIG. III.4 – Partie (a) : Matière neutronique. Les équations d'état calculées avec les interactions D1S, D1N et $D2G_1$ sont comparés aux prédictions variationnelles de Friedman-Pandharipande (FP) [11]. Partie (b) : Matière symétrique. Dans le sous-espace singulet-pair ($S=0, T=1$), les énergies potentielles obtenues avec les interactions D1S/D1N (courbe bleue) et $D2G_1$ (courbe rouge) sont représentées en fonction de l'impulsion de Fermi k_F . Les flèches indiquent l'écart en énergie entre les deux résultats.

La forme de l'énergie potentielle dans les deux sous-espaces $T=1$ ($S=0$, $T=1$ et $S=1$, $T=1$) conditionne la forme de l'équation d'état de la matière neutronique. Or, les résultats obtenus avec la paramétrisation $D2G_1$ dans ces deux sous-espaces $T=1$ sont très différents des prédictions de la paramétrisation $D1N$. On pourrait donc s'attendre à obtenir des équations d'état de la matière neutronique très différentes avec ces deux paramétrisations. La Fig. III.4(a) montre que ce n'est pas le cas, les équations d'état calculées avec les paramétrisations $D1N$ et $D2G_1$ sont très similaires, tout au moins à des densités $\rho \leq 1.5\rho_0$. Ainsi, tout comme la paramétrisation $D1N$, la paramétrisation $D2G_1$ reproduit correctement, aux basses densités, le calcul variationnel de Friedman-Pandharipande (FP) [11].

Les différences importantes entre les énergies potentielles calculées avec les paramétrisations $D1N$ et $D2G_1$, bien qu'elles n'affectent pas la forme de l'équation d'état de la matière neutronique, peuvent avoir d'autres implications. Notamment, les changements apportés au sous-espace $S=0$, $T=1$ (singulet-pair) peuvent modifier la structure de l'appariement. La Fig. III.4(b) présente l'énergie potentielle calculée dans ce sous-espace avec les paramétrisations $D1S$ ou $D1N$ (courbe bleue) et $D2G_1$ (courbe rouge). Cette figure se limite à un domaine de densités plus restreint ($k_F \leq 1.5 \text{ fm}^{-1}$) que pour la Fig. III.3. La densité de saturation, correspondant à $k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$, est repérée par la ligne verticale en pointillés noirs. On constate que, pour les densités inférieures à la densité de saturation, la paramétrisation $D2G_1$ crée une énergie potentielle plus attractive que celle obtenue avec la paramétrisation $D1S$. Cette attraction supplémentaire est mise en évidence par les flèches dirigées vers le bas sur la Fig. III.4(b). A la densité de saturation, $k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$, les deux courbes se croisent et, au-delà de ce point, c'est la paramétrisation $D1S$ qui devient la plus attractive.

Cette étude des contributions relatives des paramétrisations $D1S$ et $D2G_1$ à l'énergie potentielle du sous-espace $S=0$, $T=1$ permet de présumer des propriétés d'appariement de chacune de ces paramétrisations. L'énergie potentielle dans ce sous-espace reflète, en effet, l'intensité de l'interaction d'appariement et est donc intimement liée à la description des corrélations d'appariement. De plus, comme l'appariement se développe préférentiellement à la surface des noyaux où la densité est plus faible, la partie de basse densité ($k_F < 1.33 \text{ fm}^{-1}$) de ce sous-espace est la plus déterminante pour ajuster l'appariement. Dans ce domaine de densité, c'est la paramétrisation $D2G_1$ qui produit l'attraction la plus forte. On s'attend donc à ce que les corrélations d'appariement se développent plus facilement avec cette paramétrisation. Les calculs Hartree-Fock-Bogoliubov confirment cette prédiction, l'appariement obtenu dans les noyaux finis avec la paramétrisation $D2G_1$ est plus important qu'avec la paramétrisation $D1S$. Malheureusement, cet effet d'augmentation de l'appariement est dramatiquement fort, et la paramétrisation $D2G_1$ produit une énergie d'appariement non-nulle dans les noyaux magiques comme l' ^{16}O ou le ^{208}Pb . Ce comportement pathologique témoigne que l'interaction d'appariement associée à la paramétrisation $D2G_1$ est trop attractive.

Conclusion : Aux basses densités, il faut éviter que l'énergie potentielle dans le sous-espace $S=0$, $T=1$ soit "nettement plus attractive" qu'elle ne l'est avec la paramétrisation $D1S$, sinon l'interaction d'appariement atteint une intensité telle qu'elle peut générer des corrélations d'appariement dans les noyaux magiques.

Il est opportun de préciser ce que l'on entend par le qualificatif de "nettement plus attractive" pour l'énergie potentielle, de quantifier cette expression. Pour cela, nous diminuons progressivement l'attraction créée par la paramétrisation $D2G_1$ dans le sous-espace $S=0$, $T=1$, jusqu'à obtenir une contribution semblable à celle de la paramétrisation $D1S$. Plus précisément, nous réalisons 7 paramétrisations de l'interaction de Gogny qui produisent des énergies potentielles comprises entre celles des paramétrisations $D1S$ et $D2G_1$. Sur la Fig. III.5, les contributions des paramétrisations $D1S$ et $D2G_1$ à l'énergie potentielle du sous-espace $S=0$, $T=1$ sont représentées en bleu et rouge tandis que les contributions des 7 paramétrisations intermédiaires sont colorées avec différents violets. Les énergies d'appariement E_{app} obtenues dans ^{16}O par un calcul Hartree-Fock-Bogoliubov sont également indiquées pour chacune des paramétrisations. Elles varient de $0.98 \cdot 10^{-7}$ MeV pour la paramétrisation $D1S$ à 22.95 MeV pour la paramétrisation $D2G_1$.

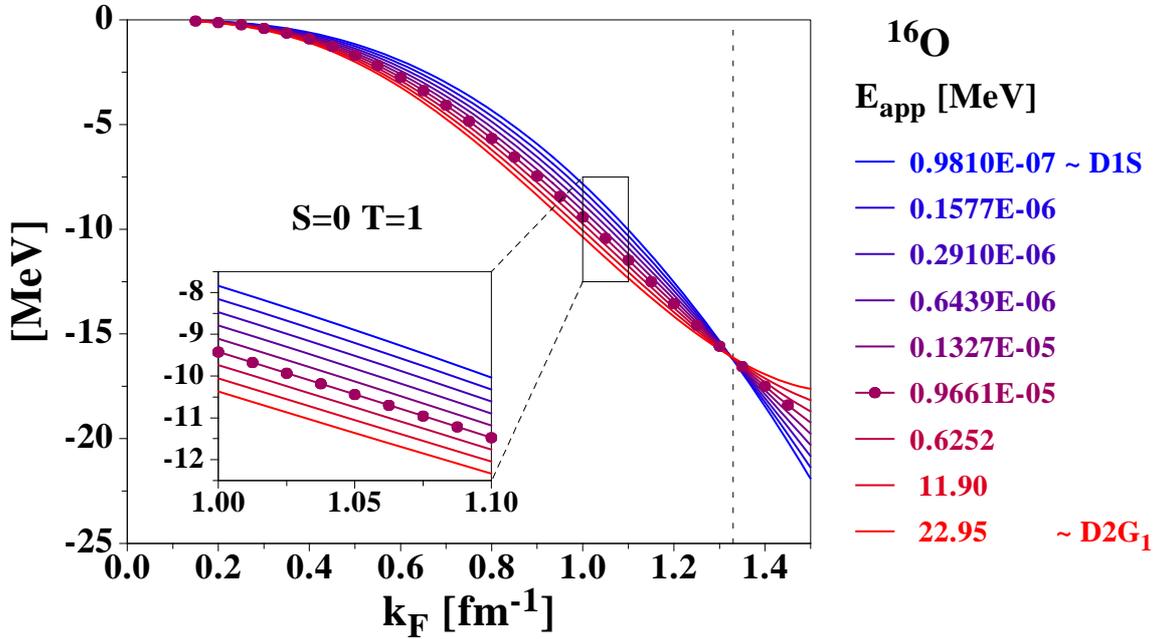


FIG. III.5 – Energie potentielle dans le sous-espace $S=0$, $T=1$ calculée, en fonction de k_F , avec différentes paramétrisations de l'interaction de Gogny. Pour chacune de ces paramétrisations, les énergies d'appariement E_{app} obtenues dans ^{16}O , par un calcul Hartree-Fock-Bogoliubov, sont également indiquées. Les résultats associés aux paramétrisations $D1S$ et $D2G_1$ sont présentés en bleu et rouge; les différents violets correspondent aux paramétrisations intermédiaires. La contribution marquée par des cercles constitue la limite en-dessous de laquelle les paramétrisations produisent une énergie d'appariement non nulle dans ^{16}O .

Les corrélations d'appariement se développent principalement en surface du noyau. Cette région est caractérisée par une densité moyenne $\rho = \rho_0/2$, soit une impulsion au niveau de Fermi $k_F = (3\pi^2\rho/2)^{1/3} = 1.06 \text{ fm}^{-1}$. Sur la Fig. III.5, le petit encadré s'intéresse aux impulsions voisines de cette valeur et montre que la différence entre les énergies potentielles des paramétrisations $D1S$ et $D2G_1$ n'excède pas 3 MeV par parti-

culé. Cette différence est toutefois suffisante pour générer une énergie d'appariement de 23 MeV dans ^{16}O . L'énergie d'appariement dans les noyaux est donc très sensible au niveau d'attraction de l'énergie potentielle dans le sous-espace $S=0, T=1$. Cependant, la Fig. III.5 montre que les paramétrisations qui produisent une énergie potentielle *moins* attractive que celle marquée par des cercles donnent une énergie d'appariement nulle dans ^{16}O . Cette contribution marquée par des cercles n'est autre que la limite quantitative que nous cherchons pour discriminer les paramétrisations saines des plus pathologiques susceptibles de générer des corrélations d'appariement dans les noyaux magiques. Nous pouvons donc, à l'issue de cette étude, adopter la condition suivante.

Condition 1. Une condition nécessaire pour qu'une interaction ne crée pas d'appariement dans les noyaux magiques est que sa contribution à l'énergie potentielle dans le sous-espace $S=0, T=1$ soit au-dessus de celle marquée par des cercles sur la Fig. III.5.

On peut construire de nombreuses paramétrisations qui vérifient cette condition. La paramétrisation $D2G_2$ en est un exemple. Celle-ci prédit, pour l'énergie potentielle dans les sous-espaces $(S,T)=(0,0),(1,0)$ et $(1,1)$, une allure très similaire à celle obtenue avec la paramétrisation précédente $D2G_1$. De même, l'équation d'état de la matière neutronique calculée avec cette nouvelle paramétrisation $D2G_2$ est très proche de celles obtenues avec les paramétrisations $D1N$ ou $D2G_1$. L'accord avec les prédictions du calcul variationnel de Friedman-Pandharipande reste donc très bon. Nous présentons donc seulement le sous-espace $S=0, T=1$ sur la Fig. III.6.

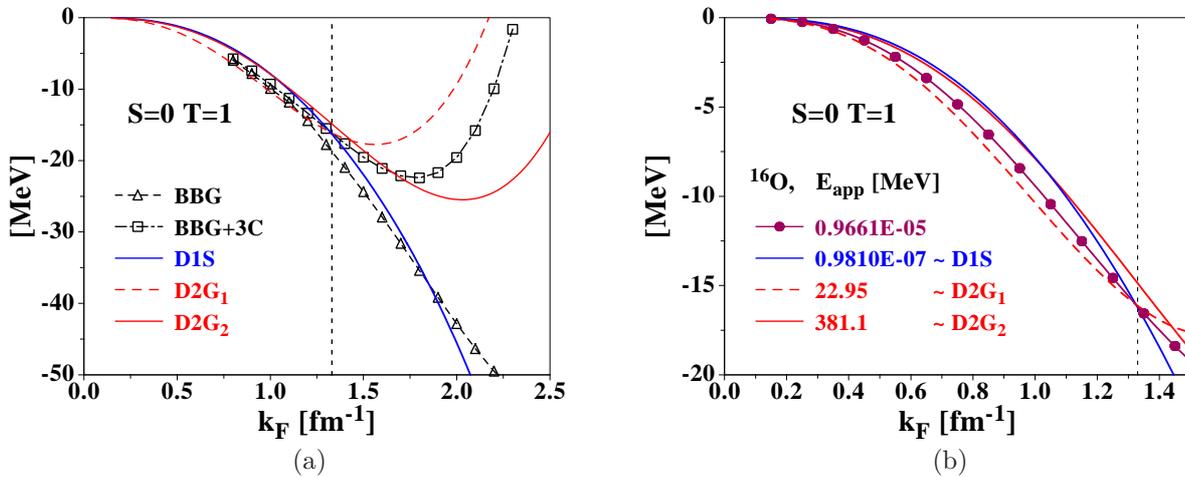


FIG. III.6 – Énergie potentielle en fonction de k_F dans le sous-espace singulet-pair. Partie (a) : Les résultats obtenus avec les paramétrisations $D1S$, $D2G_1$ et $D2G_2$ sont confrontés aux calculs microscopiques basés sur la méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone, BBG et BBG+3C. Le calcul BBG+3C prend en compte la contribution des interactions à trois corps. Partie (b) : Les courbes d'énergie potentielle prédites par les paramétrisations $D1S$, $D2G_1$ et $D2G_2$ sont comparées à la contribution marquée par des cercles et définie sur la Fig. III.5. Pour chaque paramétrisation, l'énergie d'appariement E_{app} obtenue dans ^{16}O est précisée.

La Fig. III.6(a) présente l'énergie potentielle dans le sous-espace $S=0$, $T=1$ pour des impulsions de Fermi inférieures à 2.5 fm^{-1} . Les calculs microscopiques basés sur la méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone correspondent aux courbes labellées BBG et BBG+3C. Le résultat BBG+3C prend en compte la contribution des interactions à trois corps. Les autres courbes ont été calculées par la méthode Hartree-Fock avec les paramétrisations D1S (trait continu bleu), $D2G_1$ (trait pointillé rouge) et $D2G_2$ (trait continu rouge). Dans ce sous-espace, la contribution de la nouvelle paramétrisation $D2G_2$ diffère principalement de celle de la paramétrisation $D2G_1$ par deux aspects.

Le premier concerne la remontée de la courbe d'énergie potentielle. Cette remontée a lieu à partir de $k_F = 1.5 \text{ fm}^{-1}$ pour la paramétrisation $D2G_1$ alors qu'elle n'apparaît qu'aux plus hautes densités, à partir de $k_F = 2.0 \text{ fm}^{-1}$, pour la paramétrisation $D2G_2$. Ceci peut s'expliquer en évaluant la contribution du terme densité dans ce sous-espace. Celle-ci est répulsive pour la paramétrisation $D2G_1$ et vaut $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3) = +1600 \text{ MeV.fm}^{3(1+\alpha)}$. Dans le cas de la paramétrisation $D2G_2$, la répulsion du terme densité est moins forte avec $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3) = +1000 \text{ MeV.fm}^{3(1+\alpha)}$. C'est la raison pour laquelle la remontée dans le sous-espace $S=0$, $T=1$ est moins violente avec la nouvelle paramétrisation $D2G_2$.

Le deuxième aspect concerne la partie des plus basses densités, correspondant aux impulsions de Fermi $k_F \leq 1.5 \text{ fm}^{-1}$. Ce domaine d'impulsions est représenté sur la Fig. III.6(b). On retrouve les courbes d'énergie potentielle associées aux paramétrisations D1S, $D2G_1$ et $D2G_2$. Une contribution supplémentaire est représentée par la courbe magenta marquée par des cercles. Cette dernière n'est autre que la limite inférieure introduite dans la Fig. III.5. Nous avons alors montré que toute paramétrisation donnant une contribution plus attractive (c'est à dire plus négative) que cette limite produisait un appariement démesuré dans les noyaux finis. Tel est le cas avec la paramétrisation $D2G_1$ qui donne une énergie d'appariement E_{app} de 22.95 MeV dans l' ^{16}O . La nouvelle paramétrisation $D2G_2$ a un comportement plus sain, elle est moins attractive que ladite limite et obéit ainsi à la Condition 1 précédemment établie. Malgré cela, des calculs Hartree-Fock-Bogoliubov révèlent que cette paramétrisation produit 381.1 MeV d'énergie d'appariement dans l' ^{16}O . Cette pathologie montre bien que la Condition 1 que nous avons formulée reste une condition nécessaire et **non suffisante** pour éviter l'apparition de corrélations d'appariement dans les noyaux magiques. La question suivante reste donc en suspens : pourquoi est-ce que cette nouvelle paramétrisation $D2G_2$ crée une telle explosion de l'appariement ?

Un élément de réponse peut être avancé en étudiant la forme spatiale de l'interaction d'appariement. Nous définissons l'interaction d'appariement comme la composante $S=0$, $T=1$ de l'interaction de Gogny. Elle s'écrit donc, dans le cas de la forme (I.1) de l'interaction de Gogny,

$$V_{12}^{S=0,T=1}(r) = \sum_{i=1,2} (W_i - B_i - H_i + M_i) e^{-r^2/\mu_i^2}. \quad (\text{III.21})$$

Le terme densité de portée nulle $t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha$, avec $x_0 = 1$, n'apparaît pas car l'opérateur P_σ vaut -1 dans les états $S=0$.

Dans le cas de la forme (III.13) de l'interaction de Gogny, en revanche, la dépendance en

densité intervient dans la composante $S=0, T=1$,

$$V_{12}^{S=0,T=1}(r) = \sum_{i=1,2} (W_i - B_i - H_i + M_i) e^{-r^2/\mu_i^2} + (W_3 - B_3 - H_3 + M_3) \frac{e^{-r^2/\mu_3^2}}{(\mu_3\sqrt{\pi})^3} \rho^\alpha. \quad (\text{III.22})$$

N.B. : Dans les expressions ci-dessus, on constate que la dépendance en \vec{r} de la densité a été omise. Ceci est justifié dans la matière nucléaire infinie car ce milieu est homogène et isotrope et l'on a donc $\rho(\vec{r}) = \rho$.

L'interaction d'appariement ainsi définie est représentée sur la Fig. III.7 en fonction de la distance relative des deux nucléons $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. Pour la paramétrisation D1S, l'interaction d'appariement de la forme (III.21) est indépendante de la densité du milieu ρ . Sur les Fig. III.7(a) et III.7(b) elle est représentée par la courbe noire marquée par des cercles. Pour la paramétrisation D2G₂, en revanche, l'interaction d'appariement définie par (III.22) fait intervenir une dépendance en densité. Sa forme spatiale doit donc être tracée en tenant compte de la densité du milieu. Ainsi, sur la Fig. III.7(a), cinq densités différentes sont étudiées, $\rho = 0.00\rho_0, 0.25\rho_0, 0.50\rho_0, 0.75\rho_0$ et $1.00\rho_0$. La Fig. III.7(b) est plus complète en représentant l'interaction d'appariement pour 100 densités différentes entre $0.00\rho_0$ et $1.00\rho_0$ par pas $\Delta\rho = 0.01\rho_0$.

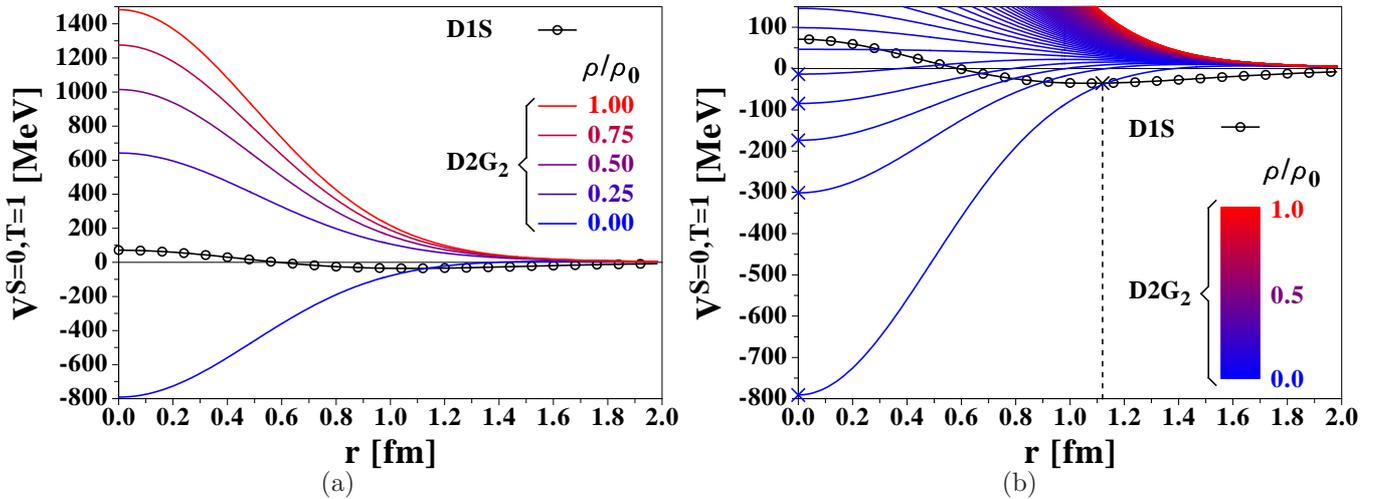


FIG. III.7 – Forme spatiale de l'interaction d'appariement. Partie (a) : La paramétrisation D1S est représentée en noir et marquée par des cercles. Les courbes en couleur concernent la paramétrisation D2G₂ tracée pour des densités allant jusqu'à ρ_0 par pas de $\Delta\rho = 0.25\rho_0$. Partie (b) : Les mêmes courbes sont reprises, mais avec un pas plus précis en densité, $\Delta\rho = 0.01\rho_0$. Sur chacune des courbes, les croix indiquent les positions des minima.

La Fig. III.7(a) montre que, pour la paramétrisation D2G₂, la forme spatiale de l'interaction d'appariement est très sensible aux variations de densité du milieu. Notamment, lorsque les deux nucléons sont en contact, la valeur de l'interaction d'appariement, $V_{12}^{S=0,T=1}(0)$, varie de -800 à $+1500$ MeV quand on passe d'une densité nulle à la densité normale ρ_0 .

La Fig. III.7(b) permet de mieux visualiser l'allure de l'interaction d'appariement associée à la paramétrisation D1S. Elle présente une forme de potentiel moléculaire, décroissant puis croissant en fonction de r , dont le minimum à $r = 1.1$ fm est repéré par une croix. Pour la paramétrisation D2G₂, l'interaction d'appariement ne présente jamais une telle forme de potentiel, et ce, quelle que soit la densité. Pour les densités inférieures à $0.05\rho_0$, elle est uniformément croissante, donc avec un minimum en $r = 0$ fm repéré par les croix bleues sur la Fig. III.7(b). Au-delà de cette densité, elle devient uniformément décroissante, et le minimum est rejeté en $r \rightarrow +\infty$ où l'interaction d'appariement tend vers zéro. Ces formes de potentiel obtenues, dans le sous-espace $S=0$, $T=1$, avec la paramétrisation D2G₂ ne sont pas adaptées à la description de l'appariement dans les noyaux. Notamment, la très forte attraction de -800 MeV qui apparaît à densité nulle lorsque les nucléons sont en contact semble responsable de l'explosion des corrélations d'appariement. Nous expliquons ainsi l'apparition d'une énergie d'appariement de 381.1 MeV dans l'¹⁶O. Nous imposons donc une nouvelle contrainte sur les futures paramétrisations de l'interaction de Gogny, qui peut être formulée avec la condition suivante.

Condition 2. *Une condition nécessaire pour qu'une paramétrisation ne crée pas d'appariement dans les noyaux magiques est que sa forme spatiale dans le sous-espace ($S=0$, $T=1$) ne soit pas trop différente de celle de la paramétrisation D1S, et ce, quelle que soit la densité. Notamment, une trop forte attraction (inférieure à -100 MeV) lorsque les nucléons sont en contact ($r = 0$ fm) crée un appariement pathologique.*

En tenant compte de cette deuxième condition, nous avons créé la paramétrisation D2A présentée dans la partie suivante.

III.4 La paramétrisation D2A

Le meilleur moyen de répondre aux deux conditions établies dans la partie précédente consiste à diminuer la dépendance en densité dans le sous-espace $S=0$, $T=1$. C'est ainsi que la paramétrisation D2A a été élaborée. L'énergie potentielle correspondante est présentée dans chaque sous-espace S,T en fonction de l'impulsion de Fermi k_F sur la Fig. III.8. Les données issues des calculs de Bethe-Brueckner-Goldstone sont symbolisées par des triangles (BBG) ou par des carrés (BBG+3C) lorsque les interactions à trois corps sont prises en compte. La contribution de la paramétrisation D1S est en trait continu bleu, celle de la paramétrisation D1N en trait pointillé rouge et celle de la paramétrisation D2A en trait continu rouge. De plus, les contributions des deux paramétrisations précédentes D2G₁ et D2G₂ ont été ajoutées dans le sous-espace $S=0$, $T=1$. Elles permettent de bien se rendre compte que la remontée obtenue, à haute densité, avec la paramétrisation D2A est moins violente qu'avec les paramétrisations D2G₁ ou D2G₂. Ceci s'explique par la diminution de la répulsion du terme densité dans ce sous-espace. Pour la paramétrisation D2G₁, cette répulsion était de $1600 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{3(1+\alpha)}$, pour la paramétrisation D2G₂, elle a été réduite à $1000 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{3(1+\alpha)}$, et elle n'est plus que de $600 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{3(1+\alpha)}$ pour la présente paramétrisation D2A. Ceci rejoint la remarque précédente selon laquelle la paramétrisa-

tion D2A a été construite en diminuant la dépendance en densité des paramétrisations D2G₁ et D2G₂ dans le sous-espace S=0, T=1.

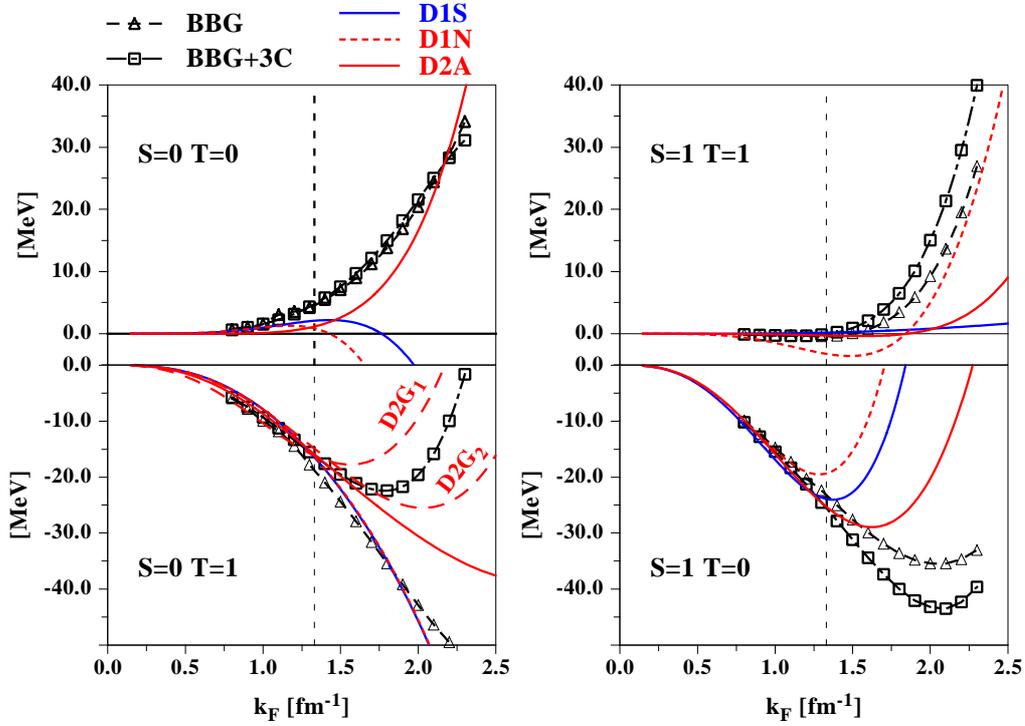


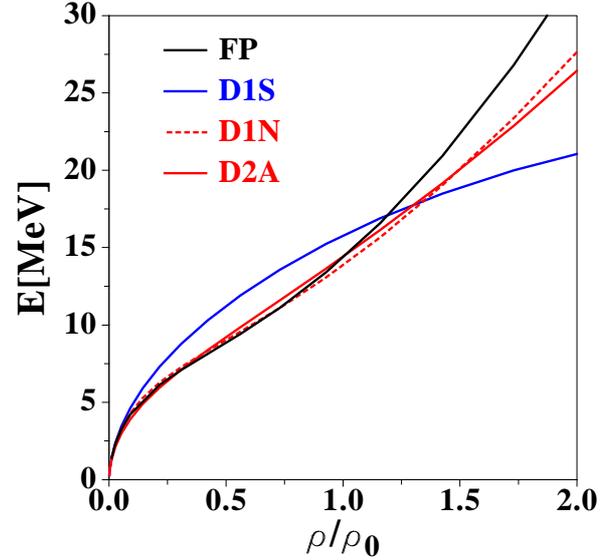
FIG. III.8 – Energie potentielle dans les différents sous-espaces ST pour D1S, D1N et D2A. Les courbes obtenues avec D2G₁ et D2G₂ sont rappelées dans le sous-espace S=0, T=1. Les symboles (triangles et carrés) correspondent à des calculs de type Bethe-Brueckner-Goldstone sans et avec forces à 3 corps (BBG et BBG+3C). La ligne pointillée représente le point de saturation $k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$.

Dans les sous-espaces impairs, (S=0, T=0) et (S=1, T=1), le comportement de la paramétrisation D2A est plus sain que celui de la paramétrisation D1N. Dans le sous-espace (S=0, T=0), la forte attraction observée, au-delà de $k_F = 1.5 \text{ fm}^{-1}$, avec la paramétrisation D1N a été corrigée. Ainsi, la paramétrisation D2A est répulsive à toutes les densités tout comme les prédictions microscopiques BBG et BBG+3C. Dans le sous-espace (S=1, T=1), la paramétrisation D2A présente une attraction négligeable (de l'ordre de 100 keV par particule) à la densité de saturation, en accord avec les calculs microscopiques BBG et BBG+3C. Elle permet donc de rectifier la tendance un peu trop attractive (de l'ordre de 3-4 MeV par particule) de la paramétrisation D1N à cette densité.

Les propriétés dans la matière nucléaire infinie obtenues avec la paramétrisation D2A sont comparées à celles calculées avec les paramétrisations D1S et D1N dans le Tab. III.1. Les valeurs empiriques correspondantes sont indiquées en dernière colonne du tableau. La différence principale entre les paramétrisations D1N et D2A concerne l'incompressibi-

lité, 230 MeV pour D1N et seulement 201 MeV pour D2A. Cette dernière valeur est un peu faible et sort des limites empiriques 210-230 MeV. Pour les autres quantités répertoriées dans le tableau, la paramétrisation D2A reproduit correctement les valeurs empiriques. Les équations d'état de la matière neutronique calculées avec les paramétrisations D1N et D2A sont très similaires comme le montre la Fig. III.9. Toutes deux reproduisent correctement les prédictions de Friedman-Pandharipande pour les densités de neutron inférieures à la densité normale ρ_0 .

	D1S	D1N	D2A	Val. Emp.
ρ_0 (fm^{-3})	0.163	0.161	0.163	0.17 (± 0.02)
E_0/A (MeV)	-16.02	-15.96	-15.97	-16 (± 1)
K_∞ (MeV)	210	230	201	220 (± 10)
m^*/m	0.70	0.75	0.75	0.70 (± 0.05)
E_{sym} (MeV)	31.1	29.3	30.0	30 (± 2)



TAB. III.1 - Propriétés de la matière nucléaire infinie. Les valeurs calculées avec les interactions D1S, D1N et D2A sont confrontées aux valeurs empiriques (Val. Emp.).

FIG. III.9 – Equation d'état de la matière neutronique calculée avec les interactions D1S, D1N et D2A, et comparaison aux prédictions VMC de Friedman et Pandharipande (FP) [11].

Pour valider la paramétrisation D2A, il reste à tester ses propriétés d'appariement. Ces dernières sont gouvernées par le sous-espace $S=0, T=1$. Dans la partie précédente, deux conditions nécessaires ont été formulées à propos de ce sous-espace. La Condition 1 stipule que l'énergie potentielle ne doit pas être plus attractive, aux basses densités, que la limite définie par les cercles sur la Fig. III.10(a). L'énergie potentielle calculée avec la paramétrisation D2A, représentée par la courbe rouge sur la Fig. III.10(a), vérifie bien cette condition. La Condition 2 demande que la forme spatiale de l'interaction d'appariement $V^{S=0, T=1}(r)$ ne soit pas trop différente de celle obtenue avec la paramétrisation D1S. Cette dernière est représentée, sur la Fig. III.10(b), par la courbe marquée de cercles noirs. Sur cette même figure, l'interaction d'appariement obtenue avec la paramétrisation D2A est tracée pour différentes densités $\rho \in [0, \rho_0]$. Deux commentaires peuvent être faits. Le premier est que, à toutes ces densités, l'interaction d'appariement de la paramétrisation D2A possède la forme d'un potentiel moléculaire, comme la paramétrisation D1S. En particulier, les positions des minima, indiquées par des croix, varient entre 0.6 et 1.6 fm lorsque la densité décrit l'intervalle $[0, \rho_0]$. Ces minima restent donc relativement proches de celui donné par la paramétrisation D1S, $r_{D1S} = 1.1$ fm, contrairement à la paramétrisation précédente D2G₂ qui ne donnait des minima qu'en $r = 0$ ou $r = +\infty$.

Le deuxième commentaire concerne l'attraction en $r = 0$ qui apparaît à densité nulle avec la paramétrisation D2A. Celle-ci n'est plus que de l'ordre de 60 MeV à comparer aux 800 MeV d'attraction produits par la précédente paramétrisation D2G₂. Les critères qualitatifs de la Condition 2 sont donc remplis par la nouvelle paramétrisation D2A. Cette dernière, contrairement aux deux paramétrisations précédentes D2G₁ et D2G₂, ne produit plus d'appariement dans les noyaux magiques. Dans l'¹⁶O par exemple, l'énergie d'appariement calculée avec la paramétrisation D2A est nulle.

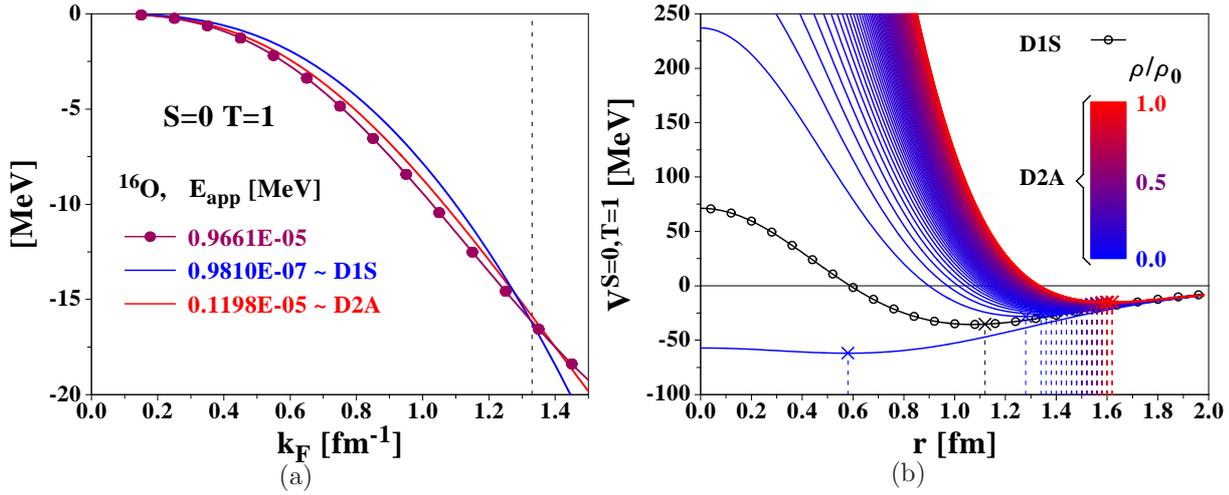


FIG. III.10 – Partie (a) : Courbes d'énergie potentielle ($S=0$, $T=1$) obtenues avec les paramétrisations D1S et D2A, et comparées à la contribution marquée par des cercles définie sur la Fig. III.5. Pour chaque paramétrisation, l'énergie d'appariement E_{app} obtenue dans l'¹⁶O est précisée. Partie (b) : Forme spatiale de l'interaction d'appariement avec les paramétrisations D1S (courbe noire marquée par les cercles) et D2A (courbes en couleur tracées jusqu'à la densité de saturation ρ_0 par pas de $\Delta\rho = 0.01\rho_0$). Sur chacune des courbes, les croix indiquent les positions des minima.

Une autre information importante sur l'interaction d'appariement est donnée par l'allure du gap d'appariement Δ_F dans la matière nucléaire infinie en fonction de l'impulsion de Fermi k_F . Selon l'isospin, $T=0$ ou $T=1$, ce gap peut être divisé en deux contributions. Pour le calcul des propriétés des noyaux finis, seul l'appariement $T=1$ a été implémenté dans nos codes basés sur l'interaction de Gogny. Pour cette raison, nous nous limitons ici à l'étude du gap $T=1$ dans la matière nucléaire infinie. Les résultats obtenus avec les paramétrisations D1S (trait continu bleu), D1N (trait pointillé rouge) et D2A (trait continu rouge) sont confrontés au gap calculé avec l'interaction réaliste de Paris (trait continu noir) sur la Fig. III.11.

Les valeurs de gap obtenues avec les paramétrisations D1S et D1N sont très proches à toutes les densités. Elles atteignent la valeur maximale de 2.25 – 2.30 MeV à $k_F = 0.75 \text{ fm}^{-1}$. La paramétrisation D2A, quant à elle, produit un gap dont l'amplitude, de l'ordre de 4 MeV, est presque deux fois plus grande. La structure de l'appariement est donc très différente entre les paramétrisations D1S (ou D1N) et D2A. Aux densités inférieures à $\rho_0/2$, soit $k_F < 1.1 \text{ fm}^{-1}$, c'est la paramétrisation D1S (ou D1N) qui reproduit le mieux

le résultat de l'interaction de Paris. En revanche, pour les densités supérieures à $\rho_0/2$, soit $k_F > 1.1 \text{ fm}^{-1}$, c'est la paramétrisation D2A qui est la plus proche de l'interaction réaliste.

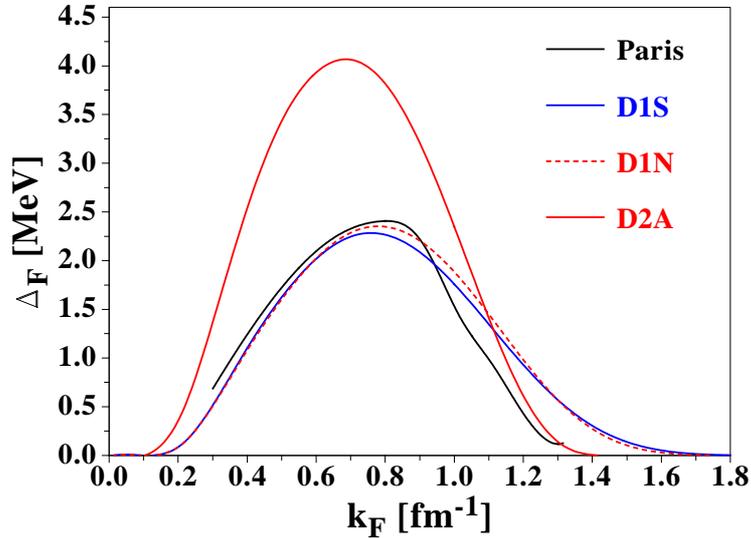


FIG. III.11 – Gap d'appariement $T=1$ dans la matière nucléaire en fonction de k_F . Les calculs réalisés avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et l'interaction réaliste de Paris sont présentés.

Si une paramétrisation de l'interaction de Gogny reproduisait, à toutes les densités, le gap d'appariement obtenu avec l'interaction réaliste de Paris, elle ne produirait pas suffisamment d'appariement dans les noyaux finis. Pour obtenir suffisamment d'appariement dans les noyaux, il est nécessaire que nos paramétrisations produisent un gap plus grand que l'interaction de Paris, dans un domaine ou un autre de densité. Pour la paramétrisation D1S (ou D1N), ce domaine est celui des densités supérieures à $\rho_0/2$, on parlera alors d'*appariement de volume*. Pour la nouvelle paramétrisation D2A, c'est aux densités inférieures à $\rho_0/2$ que le gap est nettement supérieur à celui de l'interaction réaliste, on parlera alors d'*appariement de surface*.

Il reste à comprendre pourquoi cette nouvelle paramétrisation D2A donne une forme de gap dans la matière nucléaire infinie si différente de celle obtenue avec la paramétrisation D1S (ou D1N). Pour cela, il faut revenir à l'écriture de l'interaction d'appariement définie comme la composante $S=0$, $T=1$ de l'interaction de Gogny. Nous travaillons dans cette thèse avec deux formes analytiques de l'interaction de Gogny, la forme (I.1) qui fût la première proposée par D. Gogny [8] et la forme (III.13) incluant un terme densité de portée finie. Les paramétrisations D1, D1S et D1N correspondent à la forme (I.1) de l'interaction de Gogny, la paramétrisation D2A concerne, quant à elle, la forme (III.13). Les expressions de l'interaction d'appariement correspondantes à ces deux formes analytiques de l'interaction de Gogny ont déjà été données en (III.21) et (III.22), nous les rappelons

ci-dessous.

$$V_{12}^{S=0,T=1}(r) = \sum_{i=1,2} (W_i - B_i - H_i + M_i) e^{-r^2/\mu_i^2} \quad : \text{D1, D1S, D1N} \quad (\text{III.23})$$

$$V_{12}^{S=0,T=1}(r) = \sum_{i=1,2} (W_i - B_i - H_i + M_i) e^{-r^2/\mu_i^2} + (W_3 - B_3 - H_3 + M_3) \frac{e^{-r^2/\mu_3^2}}{(\mu_3\sqrt{\pi})^3} \rho^\alpha \quad : \text{D2A.} \quad (\text{III.24})$$

Les expressions (III.23) et (III.24) montrent que la paramétrisation D2A fait intervenir dans l'interaction d'appariement un terme supplémentaire dépendant de la densité. On peut donc penser que ce dernier est responsable du bouleversement de la forme du gap d'appariement (Fig. III.11) quand on passe de la paramétrisation D1S (ou D1N) à la paramétrisation D2A.

La première interprétation qui vient à l'esprit est que, si ce terme densité est suffisamment attractif, il peut créer une augmentation des corrélations d'appariement et ainsi être à l'origine de la forte valeur du gap (4 MeV) observée aux basses densités avec la paramétrisation D2A. Cette interprétation doit être rejetée car la contribution du terme densité de la paramétrisation D2A est répulsive dans les états ($S=0, T=1$), $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3) = +600 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{3(\alpha+1)}$, et ne peut donc qu'atténuer l'amplitude du gap d'appariement. Les termes responsables de la grande amplitude du gap obtenu avec la paramétrisation D2A sont donc les deux termes Gaussiens de portées μ_1 et μ_2 indépendants de la densité.

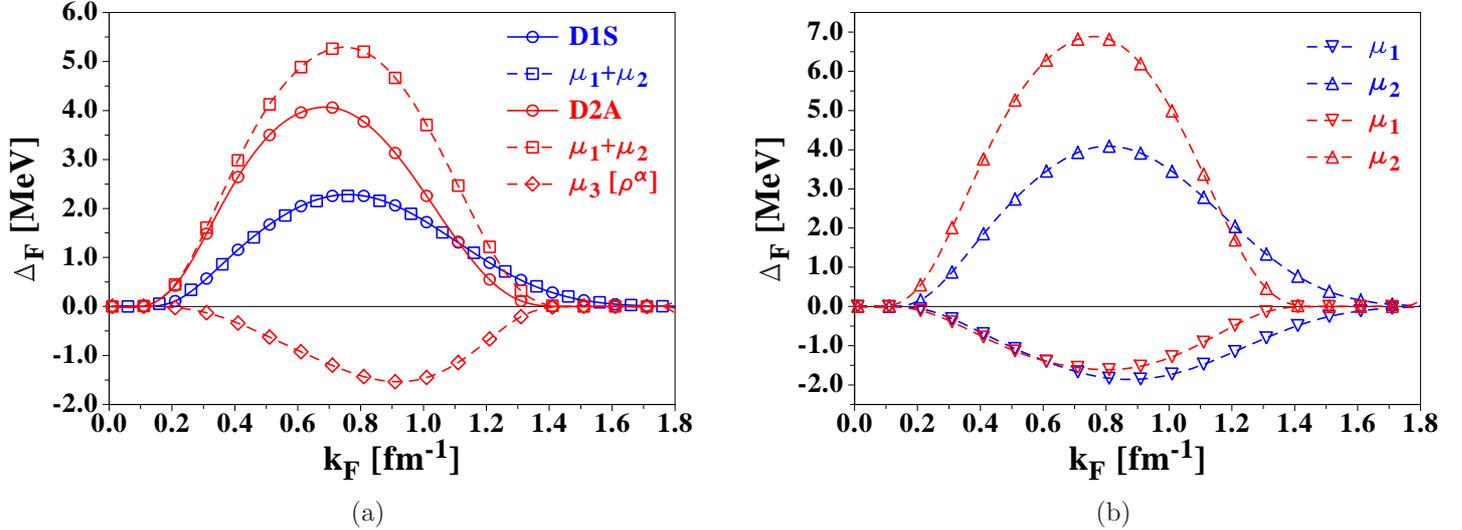


FIG. III.12 – Gap d'appariement $T=1$ dans la matière nucléaire en fonction de k_F .
 Partie (a) : Les résultats obtenus avec les paramétrisations D1S (cercles bleus) et D2A (cercles rouges) sont rappelés. Pour chacune de ces paramétrisations, la contribution des deux termes Gaussiens, notée $\mu_1 + \mu_2$, est isolée (carrés). Pour la paramétrisation D2A, la contribution supplémentaire du terme densité de portée finie, notée $\mu_3 [\rho^\alpha]$, est ajoutée (losanges). Partie (b) : Pour les paramétrisations D1S (en bleu) et D2A (en rouge), les contributions séparées des termes Gaussiens de portée μ_1 (triangles avec pointe en bas) et de portée μ_2 (triangles avec pointe en haut) sont présentées.

La Fig. III.12(a) confirme cette déduction. Sur cette figure, les contributions des différentes parties de l'interaction ont été isolées. Le gap d'appariement total est représenté par les cercles, de couleur bleue pour la paramétrisation D1S et de couleur rouge pour la paramétrisation D2A. La contribution des deux termes Gaussiens indépendants de la densité est représentée par les carrés et est notée symboliquement $(\mu_1 + \mu_2)$. La contribution du terme densité, seulement présente pour la paramétrisation D2A, est repérée par les losanges avec la notation $\mu_3 [\rho^\alpha]$. Cette figure montre que, pour la paramétrisation D2A, l'amplitude de l'attraction des termes Gaussiens $(\mu_1 + \mu_2)$ atteint 5.5 MeV et est responsable du gap total de 4.0 MeV. Le terme densité $\mu_3 [\rho^\alpha]$, bien que répulsif, n'est pas suffisant pour ramener le gap à des valeurs proches de celles obtenues avec la paramétrisation D1S. Notamment, aux basses densités, ce terme ne peut pas contribuer de manière significative à cause de sa dépendance en ρ^α .

La Fig. III.12(b) complète la Fig. III.12(a) en montrant les contributions séparées du terme Gaussien de portée μ_1 (triangles avec pointe en bas) et de celui de portée μ_2 (triangles avec pointe en haut). Cette séparation est faite pour les deux paramétrisations, D1S (en bleu) et D2A (en rouge). On remarque que, pour ces deux paramétrisations, c'est le terme de grande portée μ_2 qui est attractif, le terme μ_1 , au contraire, s'oppose au développement des corrélations d'appariement. De plus, pour le terme μ_1 , les deux paramétrisations donnent des contributions très semblables. En revanche, la contribution du terme μ_2 est significativement modifiée d'une paramétrisation à l'autre. En particulier, l'attraction maximale passe de 4.1 MeV à 7.0 MeV de la paramétrisation D1S à la paramétrisation D2A. Ces différences entre les contributions des deux paramétrisations ne peuvent être causées par les valeurs des portées μ_1 et μ_2 . Ces dernières restent en effet inchangées d'une paramétrisation à l'autre, $\mu_1^{D1S} = \mu_1^{D2A} = 0.7$ fm et $\mu_2^{D1S} = \mu_2^{D2A} = 1.2$ fm. Seules les valeurs des combinaisons de paramètres $(W_1 - B_1 - H_1 + M_1)$ et $(W_2 - B_2 - H_2 + M_2)$ peuvent donc expliquer la modification des contributions notées μ_1 et μ_2 sur la Fig. III.12(b) lorsqu'on passe de la paramétrisation D1S à la paramétrisation D2A. Ces combinaisons de paramètres sont reportées dans le Tab. III.2 pour les deux paramétrisations.

	D1S	D2A
$W_1 - B_1 - H_1 + M_1$ [MeV]	+193	+83
$W_2 - B_2 - H_2 + M_2$ [MeV]	-119	-141
$W_3 - B_3 - H_3 + M_3$ [MeV.fm $^{3(\alpha+1)}$]	/	+600

TAB. III.2 – Valeurs des combinaisons linéaires de paramètres dans le sous-espace S=0, T=1 pour les interactions D1S et D2A.

Ce tableau montre que les combinaisons de paramètres associées à la portée μ_2 restent assez proches pour les deux paramétrisations, avec 119 MeV d'attraction pour la paramétrisation D1S et 141 MeV pour la paramétrisation D2A, soit une différence de $\frac{141-119}{(141+119)/2} \simeq 17\%$. Les combinaisons de paramètres associées à la portée μ_1 sont elles très

différentes d'une paramétrisation à l'autre. La répulsion, égale à 193 MeV pour la paramétrisation D1S est réduite à 83 MeV pour la paramétrisation D2A, soit une diminution de $\frac{193-83}{(193+83)/2} \simeq 80\%$. Finalement, la grande amplitude du gap obtenue avec la paramétrisation D2A s'explique par la répulsion insuffisante du terme associé à la petite portée μ_1 . Quelle est l'origine d'une telle diminution de la combinaison $(W_1 - B_1 - H_1 + M_1)$ quand on passe de la paramétrisation D1S à la paramétrisation D2A ?

Le seul moyen de répondre à cette question est de revenir à la procédure de détermination des paramètres de l'interaction $(W_i, B_i, H_i, M_i)_{i=1,2}$. Plus précisément, nous nous intéressons ici aux combinaisons de paramètres du sous-espace $S=0, T=1$, $(W_i - B_i - H_i + M_i)_{i=1,2}$. Celles-ci sont déterminées par inversion d'un système 2-2 qui met en jeu les éléments de matrice de l'interaction dans les états $1s$ et $2s$ de l'oscillateur harmonique couplés à un spin total nul ($S=0$) et à un isospin total égal à 1 ($T=1$). On note ces éléments de matrice $\langle 1s, 1s|V|1s, 1s\rangle_{S=0,T=1}$ et $\langle 2s, 2s|V|2s, 2s\rangle_{S=0,T=1}$ ou encore sous la forme générique $\langle Ns, Ns|V|Ns, Ns\rangle_{S=0,T=1}$ avec $N = 1, 2$. Ce système à deux équations-deux inconnues s'écrit différemment selon que l'interaction a la forme analytique (I.1), comme D1, D1S ou D1N, ou la nouvelle forme (III.13) incluant un terme densité de portée finie, comme D2A.

Avec la forme analytique (I.1), le système 2-2 prend la forme ($N = 1, 2$) :

$$\begin{aligned} \langle Ns, Ns|V|Ns, Ns\rangle_{S=0,T=1} &= (W_1 - B_1 - H_1 + M_1) f_{Ns}(\mu_1) & \text{(III.25)} \\ &+ (W_2 - B_2 - H_2 + M_2) f_{Ns}(\mu_2) & \text{(III.26)} \end{aligned}$$

où les inconnues sont donc les combinaisons de paramètres $(W_1 - B_1 - H_1 + M_1)$ et $(W_2 - B_2 - H_2 + M_2)$. Les fonctions $f_{Ns}(\mu)$ avec $N = 1, 2$ ne sont autres que les intégrales spatiales de la Gaussienne de l'interaction avec les fonctions propres φ_{Ns} de l'oscillateur harmonique :

$$f_{Ns}(\mu) = \int e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu^2}} |\varphi_{Ns}(\vec{r}_1)|^2 |\varphi_{Ns}(\vec{r}_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2.$$

Les deux éléments de matrice $\langle Ns, Ns|V|Ns, Ns\rangle_{S=0,T=1}$ avec $N = 1, 2$ sont variés jusqu'à ce que les propriétés d'appariement dans les Etains, notamment les différences de masses pair-impair, soient correctement reproduites. Pour la paramétrisation D1S, leurs valeurs sont $\langle 1s, 1s|V|1s, 1s\rangle_{S=0,T=1} = -4.65$ MeV et $\langle 2s, 2s|V|2s, 2s\rangle_{S=0,T=1} = -1.90$ MeV.

Avec la forme (III.13) de l'interaction, ce système s'écrit ($N = 1, 2$) :

$$\begin{aligned} \langle Ns, Ns|V|Ns, Ns\rangle_{S=0,T=1} &= (W_1 - B_1 - H_1 + M_1) f_{Ns}(\mu_1) & \text{(III.27)} \\ &+ (W_2 - B_2 - H_2 + M_2) f_{Ns}(\mu_2) & \text{(III.28)} \\ &+ (W_3 - B_3 - H_3 + M_3) g_{Ns}(\rho^\alpha, \mu_3) & \text{(III.29)} \end{aligned}$$

Le terme densité de portée finie μ_3 apporte une contribution supplémentaire aux deux éléments de matrice. Pour simplifier le problème, la valeur de la combinaison de paramètres $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3)$ est choisie par l'utilisateur qui peut ainsi moduler la dépendance en densité mise en jeu dans l'appariement. La fonction $g_{Ns}(\alpha, \mu)$ avec $N = 1, 2$ est l'analogie des fonctions $f_{Ns}(\mu)$, elle s'écrit :

$$g_{Ns}(\alpha, \mu) = \int \frac{e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu^2}}}{(\mu\sqrt{\pi})^3} \frac{1}{2} [\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)] |\varphi_{Ns}(\vec{r}_1)|^2 |\varphi_{Ns}(\vec{r}_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2.$$

Pour obtenir des propriétés d'appariement correctes, il est nécessaire de garder pour les éléments de matrice $\langle Ns, Ns|V|Ns, Ns\rangle_{S=0, T=1}$ avec $N = 1, 2$ des valeurs proches de celles utilisées pour la paramétrisation D1S. Pour la paramétrisation D2A, on a $\langle 1s, 1s|V|1s, 1s\rangle_{S=0, T=1} = -4.55$ MeV et $\langle 2s, 2s|V|2s, 2s\rangle_{S=0, T=1} = -1.80$ MeV.

Comme le rappelle le Tab. III.2, le terme densité de la paramétrisation D2A est répulsif dans le sous-espace $S=0, T=1$ ($W_3 - B_3 - H_3 + M_3$) = +600 MeV.fm $^{3(\alpha+1)}$. Cette répulsion se retrouve dans le terme (III.29). Pour la compenser, et obtenir des éléments de matrice $\langle Ns, Ns|V|Ns, Ns\rangle_{S=0, T=1}$ ($N = 1, 2$) semblables à ceux de la paramétrisation D1S, il faut que les termes (III.27) et (III.28) fournissent une attraction supplémentaire par rapport à leurs homologues (III.25) et (III.26) de la paramétrisation D1S. Comme l'a montré le Tab. III.2, c'est principalement en diminuant la répulsion du terme ($W_1 - B_1 - H_1 + M_1$) (égal à +193 MeV pour la paramétrisation D1S contre seulement +83 MeV pour la paramétrisation D2A) que cette attraction supplémentaire est obtenue. Par conséquent, lorsqu'on inclut un terme densité répulsif dans la paramétrisation D2A, cela a pour effet de diminuer la répulsion du terme de portée μ_1 . Autrement dit, nous avons remplacé une partie de la répulsion du terme de portée μ_1 par la répulsion du terme densité de portée μ_3 . Cependant ces deux répulsions ne sont pas de même nature, l'une dépend de la densité (ρ^α) et l'autre pas. Ainsi, alors que la répulsion du terme de portée μ_1 est active dès les basses densités, celle du terme de portée μ_3 est fortement atténuée dans le domaine des faibles densités par le facteur ρ^α . Dans le cas de la paramétrisation D2A, ceci explique que, aux basses densités, la répulsion apportée par le terme de portée μ_3 , qui vient s'ajouter à la répulsion du terme de portée μ_1 , ne soit pas suffisante pour contre-balancer l'attraction du terme de portée μ_2 . L'amplitude du gap devient alors bien plus grande que celle obtenue avec la paramétrisation D1S.

Le moyen le plus simple de réduire l'amplitude du gap obtenu avec la paramétrisation D2A consiste à diminuer la répulsion du terme dépendant de la densité. On construit donc 4 paramétrisations, D2(+300), D2(+000), D2(-300) et D2(-600), à partir de la paramétrisation D2A en diminuant progressivement la répulsion de la combinaison linéaire ($W_3 - B_3 - H_3 + M_3$) associée au terme densité. Celle-ci valait +600 MeV.fm $^{3(\alpha+1)}$ pour la paramétrisation D2A, elle ne vaut plus que +300 MeV.fm $^{3(\alpha+1)}$ pour l'interaction D2(+300), et ainsi de suite jusqu'à une attraction de -600 MeV.fm $^{3(\alpha+1)}$ pour l'interaction D2(-600).

	D2A	D2(+300)	D2(+000)	D2(-300)	D2(-600)
$W_1 - B_1 - H_1 + M_1$ [MeV]	+83	+153	+223	+293	+363
$W_2 - B_2 - H_2 + M_2$ [MeV]	-141	-144	-148	-152	-156
$W_3 - B_3 - H_3 + M_3$ [MeV.fm $^{3(\alpha+1)}$]	+600	+300	+000	-300	-600

TAB. III.3 – Valeurs des combinaisons linéaires de paramètres dans le sous-espace $S=0, T=1$ pour les interactions D2A, D2(+300), D2(+000), D2(-300) et D2(-600).

Le Tab. III.3 montre de quelle façon se réajustent les combinaisons $(W_1 - B_1 - H_1 + M_1)$ et $(W_2 - B_2 - H_2 + M_2)$ quand on résout le système 2-2 précédent pour ces différentes valeurs de la combinaison $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3)$.

On constate que, lorsqu'on décrit les valeurs de +600, +300, +000, -300 et -600 (en $\text{MeV}\cdot\text{fm}^{3(\alpha+1)}$) pour la combinaison $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3)$, la combinaison $(W_2 - B_2 - H_2 + M_2)$ varie de $\frac{156-141}{(156+141)/2} \simeq 10\%$, donc relativement peu. La combinaison $(W_1 - B_1 - H_1 + M_1)$, par contre, augmente fortement, de $\frac{363-83}{(363+83)/2} \simeq 125\%$. Le système se réarrange donc de façon à ce que, lorsqu'on diminue la répulsion du terme densité, on augmente celle du terme de portée μ_1 . Autrement dit, en passant de la paramétrisation D2A à la paramétrisation D2(-600), on remplace progressivement la répulsion du terme densité par celle du terme de portée μ_1 . Cependant, comme il a déjà été mentionné, la répulsion du terme de portée μ_1 peut agir dans le domaine des basses densités et contrer efficacement l'attraction du terme de portée μ_2 , ce que ne pouvait pas faire le terme densité de portée μ_3 . On s'attend donc à voir l'amplitude du gap diminuer progressivement quand on passe de la paramétrisation D2A à la paramétrisation D2(-600). C'est bien cet effet que montre la Fig. III.13.

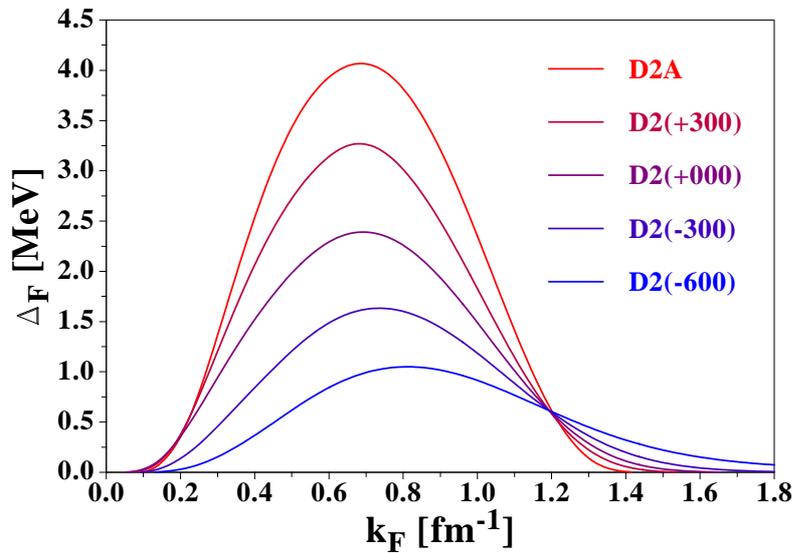


FIG. III.13 – Gap d'appariement T=1 dans la matière nucléaire en fonction de k_F . Les calculs réalisés avec les paramétrisations D2A, D2(+300), D2(+000), D2(-300) et D2(-600) sont présentés.

Sur cette figure, les gaps d'appariement T=1 obtenus avec les paramétrisations D2A, D2(+300), D2(+000), D2(-300) et D2(-600) sont représentés en fonction de l'impulsion de Fermi k_F . L'amplitude du gap qui atteint 4.05 MeV avec la paramétrisation D2A, n'est plus que de 2.30 MeV avec la paramétrisation D2(+000). La paramétrisation D2(+000), en affectant une intensité nulle dans le sous-espace S=0, T=1, $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3) = 0$, au terme dépendant de la densité, permet donc de retrouver une amplitude de gap proche de celle obtenue avec la paramétrisation D1S. Avec la dernière paramétrisation D2(-600), l'amplitude du gap est réduite jusqu'à 1.00 MeV à cause de la très forte répulsion du terme de portée μ_1 , $(W_1 - B_1 - H_1 + M_1) = +363 \text{ MeV}$.

Les différentes paramétrisations D2A, ..., D2(-600), construites en faisant varier la combinaison de paramètres ($W_3 - B_3 - H_3 + M_3$) de +600 à -600 MeV.fm^{3(α+1)}, montrent que cette combinaison de paramètres permet de contrôler efficacement la forme du gap dans la matière nucléaire, et en particulier son amplitude. Ce résultat constitue un guide précieux pour orienter la recherche de nouvelles paramétrisations, comme la paramétrisation D2B présentée dans la partie suivante.

III.5 La paramétrisation D2B

La paramétrisation précédente D2A produit un appariement que nous avons qualifié *de surface*. Ce qualificatif traduisait la forme du gap dans la matière nucléaire qui était très piquée (4.0 MeV) aux basses densités. Avec la paramétrisation D2B, nous souhaitons revenir à une forme de gap proche de celle obtenue avec la paramétrisation D1S. L'amplitude du gap est alors de l'ordre de celle calculée avec l'interaction réaliste de Paris (autour de 2.30 MeV). En revanche, le gap devient supérieur à celui obtenu avec l'interaction réaliste autour de $k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$, ce qui correspond à des densités voisines de $\rho_0 = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ typiques du coeur ou du *volume* du noyau. La paramétrisation D1S se caractérise donc plutôt par un appariement dit *de volume*.

La paramétrisation D2B présente une contribution répulsive relativement faible du terme densité dans le sous-espace (S=0, T=1), ($W_3 - B_3 - H_3 + M_3$) = +200 MeV.fm^{3(α+1)}. La forme du gap d'appariement qu'elle produit dans la matière nucléaire est présentée, en trait continu rouge, sur la Fig. III.14. Elle est comparée aux gaps obtenus avec l'interaction réaliste de Paris (trait continu noir), la paramétrisation D1S (trait continu bleu) et la paramétrisation D2A (trait pointillé rouge).

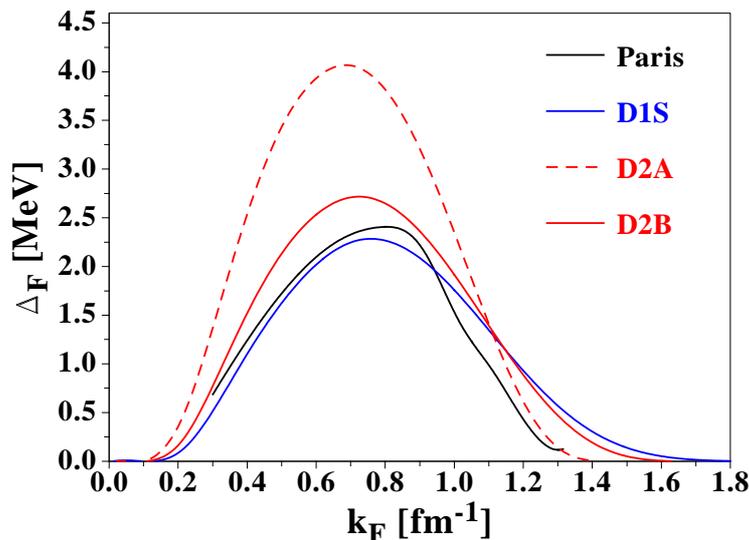


FIG. III.14 – Gap d'appariement T=1 dans la matière nucléaire en fonction de k_F . Les calculs réalisés avec les paramétrisations D1S, D2A, D2B et l'interaction réaliste de Paris sont présentés.

Avec la paramétrisation D2B, on retrouve bien une forme de gap très similaire à celle obtenue avec la paramétrisation D1S. On peut noter, malgré tout, une amplitude un peu plus forte avec la paramétrisation D2B, 2.71 MeV contre 2.26 MeV avec la paramétrisation D1S. Si on avait souhaité reproduire exactement la forme du gap de la paramétrisation D1S, il suffirait de choisir $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3) = 0$. Nous avons préféré affecter une légère répulsion de $+200 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{3(\alpha+1)}$ à cette combinaison de paramètres pour obtenir un meilleur comportement de l'énergie potentielle dans les sous-espaces (S, T) de la matière nucléaire. Ces sous-espaces sont présentés sur la Fig. III.15. Cette figure permet de comparer les énergies potentielles calculées avec les paramétrisations D1S, D1N et D2B. Ces résultats sont également confrontés à un calcul microscopique [58] basé sur la méthode de Bethe-Brueckner-Goldstone. Ce dernier calcul a été réalisé avec l'interaction réaliste AV14 seule (courbe avec triangles notée BBG) à laquelle peut aussi être ajoutée une interaction à trois corps (courbe avec carrés notée BBG+3C).

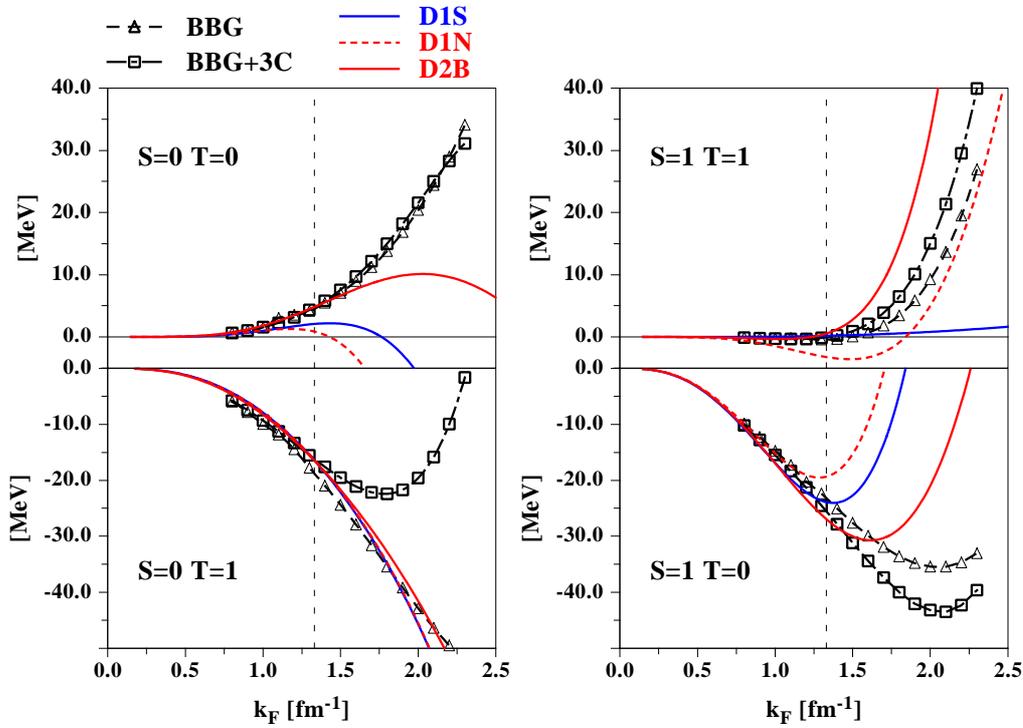


FIG. III.15 – Energie potentielle dans les différents sous-espaces ST pour D1S, D1N et D2B. Les symboles (triangles et carrés) correspondent à des calculs de type Bethe-Brueckner-Goldstone sans et avec forces à 3 corps (BBG et BBG+3C). La ligne pointillée représente le point de saturation $k_F = 1.33 \text{ fm}^{-1}$.

Dans le sous-espace singulet-impair ($S=0, T=0$), les calculs microscopiques BBG et BBG+3C prédisent une énergie potentielle répulsive à toutes les densités. La paramétrisation D1N s'oppose à ces prédictions en produisant une énergie potentielle fortement attractive au-delà de $k_F = 1.5 \text{ fm}^{-1}$, soit $\rho = 1.4\rho_0$. Avec la paramétrisation D2B, cette attraction n'apparaît qu'à des densités plus élevées, au-delà de $k_F = 2.8 \text{ fm}^{-1}$ soit $\rho = 9.3\rho_0$.

A de telles densités, de l'ordre de $10\rho_0$, la dynamique des quarks entre en jeu, et les nucléons ne peuvent plus être choisis comme les seuls degrés de liberté de la théorie. Les hypothèses de base de notre calcul ne sont alors plus vérifiées. Notre calcul est seulement valable jusqu'à des densités de l'ordre de $5\rho_0$, ce qui correspond à $k_F < 2.3 \text{ fm}^{-1}$. Dans ce domaine de densités, l'énergie potentielle calculée avec la paramétrisation D2B reste répulsive, en accord avec les prédictions microscopiques BBG et BBG+3C.

Dans le sous-espace triplet-impair ($S=1, T=1$), le principal défaut de la paramétrisation D1N concerne l'attraction un peu trop grande, 3.5 MeV par particule, qui apparaît aux densités voisines de la densité normale. Les calculs microscopiques BBG et BBG+3C prédisent au plus une attraction de 0.5 MeV. La paramétrisation D2B, avec une attraction maximale de 0.3 MeV, reproduit mieux ces résultats microscopiques.

Dans le sous-espace singulet-pair ($S=0, T=1$), la paramétrisation D2B produit une courbe d'énergie potentielle très proche de celles des paramétrisations D1S et D1N. Cette propriété s'explique par la très faible intensité de la dépendance en densité introduite par la paramétrisation D2B dans ce sous-espace. Les courbes obtenues avec les trois paramétrisations, D1S, D1N et D2B, sont également en bon accord avec les prédictions microscopiques BBG n'incluant pas l'effet des interactions à trois corps.

Dans le sous-espace triplet-pair ($S=1, T=0$), l'énergie potentielle calculée avec la paramétrisation D1S ou D1N suit la tendance des calculs microscopiques BBG et BBG+3C jusqu'à $k_F \simeq 1.33 \text{ fm}^{-1}$, soit à peu près la densité normale ρ_0 . La paramétrisation D2B permet de reproduire les valeurs microscopiques jusqu'à des densités plus élevées correspondant à $k_F = 1.5 \text{ fm}^{-1}$, soit encore $\rho = 1.4\rho_0$.

	D1N	D2A	D2B	Val. Emp.
ρ_0 (fm^{-3})	0.161	0.163	0.163	0.17 (± 0.02)
E_0/A (MeV)	-15.96	-15.97	-16.00	-16 (± 1)
K_∞ (MeV)	230	201	209	220 (± 10)
m^*/m	0.75	0.75	0.74	0.70 (± 0.05)
E_{sym} (MeV)	29.3	30.0	31.1	30 (± 2)

TAB. III.4 - Propriétés de la matière nucléaire infinie. Les valeurs calculées avec les interactions D1N, D2A et D2B sont confrontées aux valeurs empiriques (Val. Emp.).

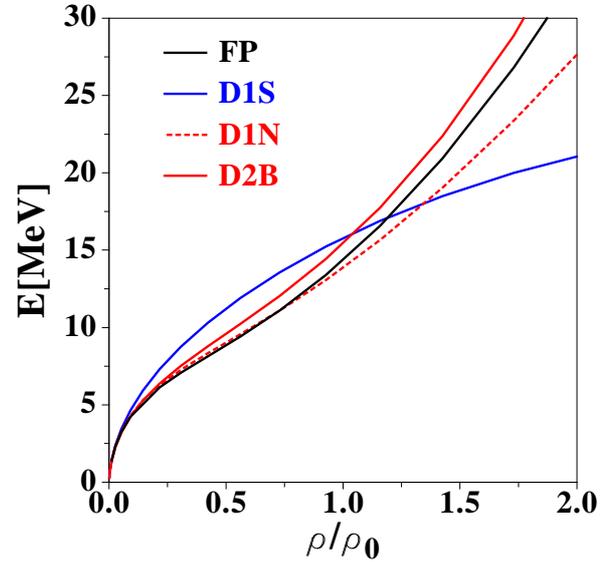


FIG. III.16 – Equation d'état de la matière neutronique calculée avec les interactions D1S, D1N et D2B, et comparaison aux prédictions VMC de Friedman et Pandharipande (FP) [11].

Les principales propriétés de la paramétrisation D2B dans la matière nucléaire sont comparées à celles des paramétrisations D1N et D2A dans le Tab. III.4. Les valeurs empiriques

sont répertoriées dans la colonne intitulée "Val. Emp.". Dans cette colonne, l'intervalle d'incompressibilité 210-230 MeV est issu de l'étude de l'énergie des vibrations monopolaires dans les noyaux [43]. Avec une incompressibilité de 209 MeV, la paramétrisation D2B est plus proche de cet intervalle que ne l'était la paramétrisation D2A dont l'incompressibilité de 201 MeV était un peu faible. La masse effective de 0.74 obtenue avec la nouvelle paramétrisation D2B est semblable à celles calculées avec les paramétrisations D1N et D2A. L'énergie de symétrie calculée avec la paramétrisation D2B est un peu plus forte qu'avec les deux autres paramétrisations, 31.1 MeV contre 30.0 MeV pour la paramétrisation D2A et 29.3 MeV pour la paramétrisation D1N.

Sur la Fig. III.16, l'équation d'état de la matière neutronique est présentée pour les paramétrisations D1S, D1N et D2B. Le calcul variationnel de Friedman-Pandharipande (FP) basé sur l'interaction réaliste UV14 est également représenté. Pour les densités comprises entre $\rho_0/2$ et ρ_0 , la paramétrisation D2B est moins précise que la paramétrisation D1N pour reproduire l'équation d'état du calcul variationnel. Par contre, au-delà de ρ_0 , la paramétrisation D2B donne une équation d'état capable de suivre la remontée raide de la courbe de Friedman-Pandharipande (FP). La paramétrisation D1N produit une pente trop douce dans ce domaine des hautes densités, et sous-estime les résultats du calcul variationnel.

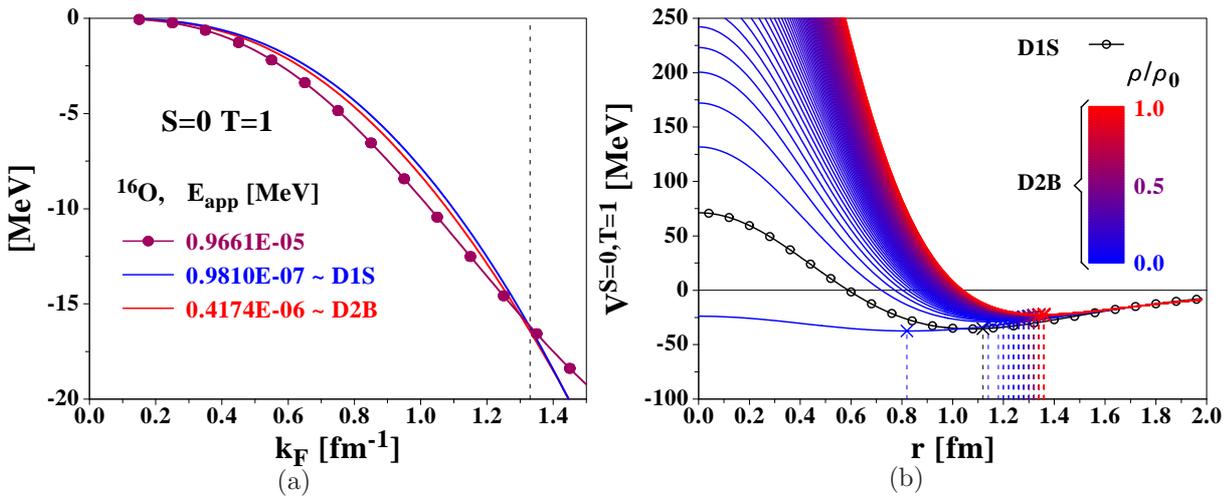


FIG. III.17 – Partie (a) : Courbes d'énergie potentielle ($S=0$, $T=1$) obtenues avec les paramétrisations D1S et D2B, et comparées à la contribution marquée par des cercles définie sur la Fig. III.5. Pour chaque paramétrisation, l'énergie d'appariement E_{app} obtenue dans l' ^{16}O est précisée. Partie (b) : Forme spatiale de l'interaction d'appariement avec les paramétrisations D1S (courbe noire marquée par les cercles) et D2B (courbes en couleur tracées jusqu'à la densité de saturation ρ_0 par pas de $\Delta\rho = 0.01\rho_0$). Sur chacune des courbes, les croix indiquent les positions des minima.

Nous terminons la présentation de la paramétrisation D2B en précisant ses propriétés dans le sous-espace $S=0$, $T=1$. Dans ce sous-espace, deux conditions nécessaires ont été énoncées pour obtenir un appariement réaliste. La Condition 1 qui requiert que, aux densités inférieures à la densité normale, l'énergie potentielle ne soit pas plus attractive

que la limite symbolisée par les cercles sur la Fig. III.17(a) est bien vérifiée par la paramétrisation D2B (courbe rouge). La Condition 2 concerne la forme spatiale de l'interaction d'appariement qui doit garder l'allure d'un potentiel moléculaire dont le minimum est situé autour de $r = 1.0$ fm. Pour la paramétrisation D1S, symbolisée par des cercles sur la Fig. III.17(b), le minimum se trouve en $r = 1.1$ fm. La paramétrisation D2B, représentée pour des densités allant jusqu'à la densité normale ρ_0 , reproduit bien l'allure d'un potentiel moléculaire dont le minimum décrit l'intervalle 0.8-1.4 fm. Cet intervalle est plus restreint que dans le cas de la paramétrisation D2A pour laquelle le minimum variait entre 0.6 et 1.6 fm. Les positions des minima sont, en effet, moins dispersées avec la paramétrisation D2B car elle intègre une dépendance en densité plus faible dans le sous-espace (S=0, T=1), $(W_3 - B_3 - H_3 + M_3) = +200 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{3(\alpha+1)}$ contre $+600 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^{3(\alpha+1)}$ pour la paramétrisation D2A.

La paramétrisation D2B vérifie donc bien les deux conditions nécessaires précédemment établies et donne une énergie d'appariement nulle dans les noyaux magiques. Sur la Fig. III.17(a), il est indiqué que, pour l' ^{16}O , l'énergie d'appariement obtenue avec la paramétrisation D2B est de $E_{\text{app}} = 0.4 \cdot 10^{-6} \text{ MeV}$.

III.6 Paramètres de Landau

Dans les noyaux rigides, les états collectifs de basse énergie ainsi que certaines résonances géantes peuvent être interprétés comme des vibrations harmoniques du système. Pour décrire ces vibrations de faible amplitude, la méthode de la Random Phase Approximation (RPA) reste la plus appropriée. Les équations de la RPA se déduisent de la linéarisation des équations Hartree-Fock dépendant du temps par rapport à de faibles variations de la matrice densité. Dans la matière nucléaire infinie, et à la limite des grandes longueurs d'onde, D. Gogny et R. Padjen [131] ont montré que ces équations se réduisent aux équations de transport de Landau [132]. Ces auteurs ont ainsi pu déterminer les paramètres de la théorie de Landau à partir de l'interaction nucléaire effective. Nous reprenons ici leur étude des paramètres de Landau avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B de l'interaction de Gogny.

Dans un système de nucléons, l'interaction résiduelle entre les quasi-particules de Landau est conventionnellement [133, 134] notée

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = N^{-1} \{ \mathcal{F}(\theta) + \mathcal{G}(\theta) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + \mathcal{F}'(\theta) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 + \mathcal{G}'(\theta) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 \},$$

où \vec{k}, \vec{k}' sont les vecteurs d'onde des deux quasi-particules en interaction à la surface de Fermi ($|\vec{k}| = |\vec{k}'| = k_F$), $N = \frac{2m^*k_F}{\hbar^2\pi^2}$ est la densité d'états à la surface de Fermi, et $\mathcal{F}, \mathcal{G}, \mathcal{F}', \mathcal{G}'$ sont des fonctions sans dimension de l'angle θ entre les vecteurs \vec{k} et \vec{k}' . Chacune de ces fonctions peut être développée sur la base des polynômes de Legendre $P_l(\cos \theta)$,

$$\mathcal{F}(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{F}_l P_l(\cos \theta), \quad \mathcal{G}(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{G}_l P_l(\cos \theta), \quad \mathcal{F}'(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{F}'_l P_l(\cos \theta), \quad \mathcal{G}'(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{G}'_l P_l(\cos \theta).$$

Les coefficients de ces développements, $\mathcal{F}_l, \mathcal{G}_l, \mathcal{F}'_l$ et \mathcal{G}'_l , sont appelés paramètres de Landau. Pour faire référence à ces paramètres, nous préférons utiliser ici la notation F_l^{ST} , introduite

par D. Gogny et R. Pajden [131], avec S le spin et T l'isospin de la paire particule-trou. Les relations de correspondance entre les deux notations sont les suivantes :

$$F_l^{00} \equiv \mathcal{F}_l, \quad F_l^{10} \equiv \mathcal{G}_l, \quad F_l^{01} \equiv \mathcal{F}'_l, \quad F_l^{11} \equiv \mathcal{G}'_l.$$

Différentes quantités physiques, la masse effective m^* , l'incompressibilité K ou encore l'énergie de symétrie a_τ , s'expriment simplement [135] en fonction des paramètres de Landau,

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{1}{3}F_1^{00}, \quad K = 3\frac{\hbar^2 k_F^2}{m^*}(1 + F_0^{00}), \quad a_\tau = \frac{\hbar^2 k_F^2}{6m^*}(1 + F_0^{01}).$$

La masse effective, en particulier, est complètement déterminée par le paramètre F_1^{00} . Les valeurs des masses effectives obtenues, à la densité normale ρ_0 , avec les paramétrisations D1N, D2A et D2B sont très proches, $(m^*/m)^{D1N} \simeq (m^*/m)^{D2A} \simeq (m^*/m)^{D2B} \simeq 0.75$. Par conséquent, on s'attend à ce que les valeurs du paramètre F_1^{00} calculées avec ces trois paramétrisations restent très voisines. Les valeurs des paramètres de Landau présentées dans le Tab. III.5 confirment cette prévision, avec $(F_1^{00})^{D1N} \simeq (F_1^{00})^{D2A} \simeq (F_1^{00})^{D2B}$. Avec la paramétrisation D1S, la valeur de ce paramètre est légèrement plus négative, $(F_1^{00})^{D1S} = -0.909$, du fait de sa masse effective plus faible, $(m^*/m)^{D1S} \simeq 0.70$.

Le même type de raisonnement permet d'expliquer les valeurs des paramètres de Landau F_0^{00} et F_0^{01} à partir des valeurs de l'incompressibilité K et de l'énergie de symétrie a_τ obtenues avec les différentes paramétrisations, D1S, D1N, D2A ou D2B. Pour chacune de ces paramétrisations, l'incompressibilité et l'énergie de symétrie restent d'ailleurs comprises dans des intervalles relativement restreints, $K \in [200; 230]$ MeV et $a_\tau \in [28; 32]$ MeV. C'est la raison pour laquelle les valeurs des paramètres F_0^{00} et F_0^{01} varient peu d'une paramétrisation à l'autre. En revanche, les paramètres de Landau F_0^{10} et F_0^{11} ne sont pas directement reliés à des grandeurs physiques sur lesquelles les paramétrisations de l'interaction ont été ajustées. Aussi, leurs valeurs peuvent être très différentes d'une paramétrisation à l'autre.

	F_0^{00}	F_0^{10}	F_0^{01}	F_0^{11}	F_1^{00}	S_1	S_2
D1S	-0.369	+0.466	+0.743	+0.631	-0.909	-0.162	-0.638
D1N	-0.243	+0.760	+0.793	+0.376	-0.757	0.203	1.136
D2A	-0.328	+0.171	+0.803	+0.903	-0.760	0.200	-1.723
D2B	-0.307	+0.198	+0.849	+0.962	-0.785	0.014	-2.109
Valeurs empiriques	+0.1 [136]	+1.15 [137, 138]	+0.7 [136]	+1.45 [137, 138]	-0.6 [137, 138]		

TAB. III.5 – Valeurs des paramètres de Landau, F_0^{00} , F_0^{10} , F_0^{01} , F_0^{11} et F_1^{00} , et des règles de somme, S_1 et S_2 , calculées avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B. Pour les paramètres de Landau, les valeurs empiriques [136, 137, 138] sont également indiquées.

Dans le Tab. III.5, nous avons également indiqué les valeurs empiriques des paramètres de Landau. Ces dernières ont été déterminées par J. Speth, L. Zamick et P. Ring [136, 137, 138] à partir des caractéristiques expérimentales (énergies d'excitation, probabilités de transition, ...) des états collectifs mesurés dans le ^{208}Pb . Pour le paramètre F_0^{00} , les

différentes paramétrisations, D1S, D1N, D2A ou D2B, sous-estiment la valeur empirique (+0.1). Pour retrouver cette valeur, il faudrait que les incompressibilités obtenues avec ces paramétrisations soient supérieures à 300 MeV, ce qui serait incompatible avec l'intervalle $K \in [210; 230]$ MeV déterminé par Blaizot *et al.* [43] à partir des vibrations monopolaires dans les noyaux. Pour les paramètres de Landau F_0^{01} et F_1^{00} , en relation avec l'énergie de symétrie et la masse effective, les valeurs empiriques sont semi-quantitativement reproduites par les quatre paramétrisations. Enfin, pour les paramètres F_0^{10} et F_0^{11} , les valeurs théoriques obtenues dépendent beaucoup de la paramétrisation utilisée. Pour F_0^{10} , c'est la paramétrisation D1N qui se rapproche le plus de la valeur empirique (+1.15). Pour F_0^{11} , ce sont les paramétrisations D2A et D2B qui reproduisent le mieux l'estimation empirique (+1.45). En outre, ce dernier paramètre F_0^{11} influence de manière significative, en particulier dans le ^{208}Pb , l'intensité et l'énergie de la résonance de Gamow-Teller [139]. Il semblerait donc que les deux paramétrisations D2A et D2B permettent une meilleure description de cette résonance, mais cette conjecture doit être confirmée par un calcul RPA complet.

Le principe d'exclusion de Pauli impose que l'amplitude de diffusion d'une paire particule-trou soit antisymétrique dans l'échange des deux quasiparticules entrantes ou sortantes. Cette condition d'antisymétrie permet de construire deux règles de somme [134, 140, 141] sur les paramètres de Landau, $S_1 = 0$ et $S_2 = 0$, avec

$$S_1 \equiv \sum_l \frac{F_l^{00}}{1 + F_l^{00}/(2l+1)} + \frac{F_l^{10}}{1 + F_l^{10}/(2l+1)} + \frac{F_l^{01}}{1 + F_l^{01}/(2l+1)} + \frac{F_l^{11}}{1 + F_l^{11}/(2l+1)},$$

$$S_2 \equiv \sum_l \frac{F_l^{00}}{1 + F_l^{00}/(2l+1)} - \frac{3F_l^{10}}{1 + F_l^{10}/(2l+1)} - \frac{3F_l^{01}}{1 + F_l^{01}/(2l+1)} + \frac{9F_l^{11}}{1 + F_l^{11}/(2l+1)}.$$

Ces règles de somme projettent respectivement sur les sous-espaces triplet-impair et singulet-impair (en couplage particule-particule), et elles assurent que l'amplitude de diffusion de deux quasiparticules sur un même état d'impulsion \vec{k} s'annule pour les ondes partielles impaires [134]. Dans l'hélium liquide, une seule règle de somme [142, 143, 144] s'applique car c'est seulement dans le sous-espace triplet que deux atomes d' ^3He peuvent former des états de parité impaire. Les règles de somme ne concernent pas les états de parité paire puisque la diffusion de deux fermions sur un même état d'impulsion \vec{k} n'est pas interdite pour l'onde partielle S .

Les valeurs des expressions S_1 et S_2 , calculées avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B, sont reportées dans le Tab. III.5. La première règle de somme se trouve bien vérifiée avec toutes les paramétrisations, et plus particulièrement avec la paramétrisation D2B pour laquelle $S_1^{D2B} = 0.014$. La deuxième règle de somme est, en revanche, moins précisément reproduite par les différentes paramétrisations.

Nous nous intéressons enfin aux conditions de stabilité établies par Migdal [135],

$$F_l^{ST} > -(2l+1),$$

qui doivent être vérifiées pour $l = 0, 1, \dots, \infty$ et $ST = 00, 10, 01, 11$. Le paramètre de Landau F_0^{ST} , calculé avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B, est représenté en

fonction de la densité sur la Fig. III.18. Pour ce dernier, la condition de stabilité s'écrit simplement $F_0^{ST} > -1$.

A la densité de saturation $\rho = \rho_0$, repérée par des flèches, cette condition se trouve vérifiée par toutes les paramétrisations et dans chacun des sous-espaces ST.

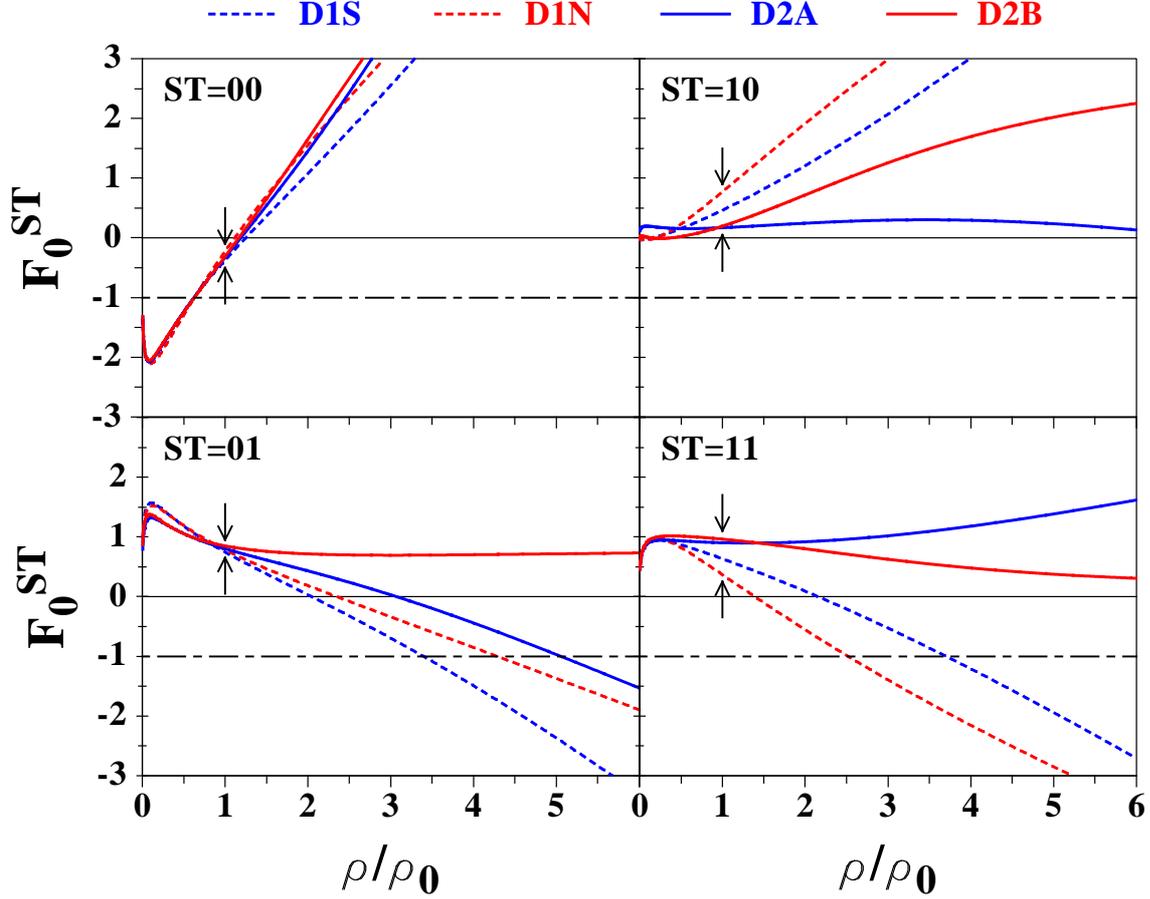


FIG. III.18 – Paramètre de Landau F_0^{ST} représenté en fonction de la densité, dans chacun des sous-espaces ST. Ces résultats ont été obtenus, dans la matière nucléaire symétrique, avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B.

Aux basses densités, $\rho < \rho_0$, la condition de stabilité n'est pas vérifiée dans le sous-espace ST=00. Cette instabilité apparaît avec toutes les paramétrisations, aux densités $\rho \leq 0.6\rho_0$. De nature isoculaire, elle est dominée par des fluctuations de la densité totale et peut donc être interprétée comme une transition de phase liquide-gaz (instabilité spinodale) [145, 146, 147].

Aux densités supérieures à la densité normale, $\rho > \rho_0$, des instabilités peuvent se développer avec les paramétrisations D1S, D1N et D2A. Pour chaque paramétrisation, on notera ρ_c la densité à laquelle apparaît la première instabilité. Avec la paramétrisation D1S, la première instabilité se produit dans le sous-espace ST=01, à $\rho_c^{D1S} = 3.4\rho_0$. Avec la paramétrisation D1N, elle apparaît dès $\rho_c^{D1N} = 2.5\rho_0$, dans le sous-espace ST=11. La paramétrisation D2A repousse cette instabilité à $\rho_c^{D2A} = 5.1\rho_0$, dans le sous-espace ST=01. Enfin, la paramétrisation D2B ne prédit aucune instabilité au-delà de la densité normale.

Les paramétrisations où le terme densité de l'interaction est de portée finie fournissent donc une matière nucléaire plus stable à haute densité que les paramétrisations classiques D1S et D1N. En particulier, la matière nucléaire homogène symétrique non-magnétique (spin total nul) est stable à toutes les densités $\rho > \rho_0$ avec la paramétrisation D2B.

Chapitre IV

Propriétés des noyaux finis avec les paramétrisations D2A et D2B

Les propriétés des noyaux finis auxquelles nous allons nous intéresser dans ce chapitre sont leur énergie de liaison, leur rayon de charge, leur déformation, leur moment d'inertie. Ces différentes propriétés seront calculées à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov en symétrie axiale.

Tout calcul Hartree-Fock-Bogoliubov fait intervenir deux types de champ, le champ moyen et le champ d'appariement. Ces champs sont construits à partir d'une interaction nucléaire effective donnée, l'interaction de Gogny dans notre cas. Leur expression dépend donc de la forme analytique de cette interaction.

Avec la forme (I.1) de l'interaction de Gogny, les expressions de ces champs ont déjà été développées. Elles ont été implémentées par M. Girod dans le code de calcul *AMEDEE*. Avec la nouvelle forme (III.13) de l'interaction, le terme densité de portée finie doit être pris en compte dans le calcul des champs moyen et d'appariement. Les expressions alors obtenues pour ces champs sont développées en Annexe C. Programmer ces expressions dans le code *AMEDEE*, tout en optimisant au maximum le temps de calcul, s'est révélé un véritable problème en soi. Mon approche face à cette problématique est exposée dans la partie suivante.

IV.1 Algorithme de calcul des champs avec un terme densité de portée finie

IV.1.1 Position du problème

La méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov est une généralisation immédiate de celle de Hartree-Fock. L'état fondamental du système, $|\tilde{0}\rangle$, est décrit comme le produit antisym-

métrisé de fonctions d'onde de quasi-particules indépendantes,

$$|\tilde{0}\rangle = \prod_{\mu} \xi_{\mu} |0\rangle$$

avec $|0\rangle$: le vide de particules,

ξ_{μ} : les opérateurs de quasiparticules définis par :

$$\xi_{\mu} = \sum_a (U_{\mu a} c_a + V_{\mu a} \bar{c}_a^{\dagger})$$

- où :
- c_a^{\dagger}, c_a sont les opérateurs de création et de destruction d'une particule dans l'état $|a\rangle$,
 - $\bar{c}_a^{\dagger}, \bar{c}_a$ sont les opérateurs obtenus par renversement du sens du temps à partir de c_a^{\dagger}, c_a ,
 - $U_{\mu a}, V_{\mu a}$ sont les coefficients de la transformation entre les opérateurs de particules et de quasi-particules.

Les coefficients $U_{\mu a}$ et $V_{\mu a}$ de la transformation sont déterminés de manière itérative, sur la base d'un principe de minimisation. Ce principe de minimisation est à l'origine des équations de Hartree-Fock-Bogoliubov qui sont résolues à chaque itération. Lorsque leurs solutions, qui ne sont autres que les coefficients $U_{\mu a}$ et $V_{\mu a}$, ne varient plus d'une itération à l'autre, le programme informatique s'arrête. On parle alors de convergence vers des solutions auto-cohérentes.

Pour atteindre ce résultat auto-cohérent, jusqu'à 300 ou 400 itérations peuvent être nécessaires dans certains cas. A chacune de ces itérations, les matrices U et V des coefficients de la transformation sont modifiées et les matrices ρ et κ définies par (cf. Annexe C) :

$$\rho = V^T V = \mathbb{I} - U^T U, \quad \kappa = U^T V = V^T U$$

doivent donc être recalculées. Il en est de même pour les différents champs explicités en Annexe C, Γ_{ac} , $\partial\Gamma_{ac}$, $\partial\Delta_{ac}$ et Δ_{ac} .

Considérons par exemple la partie échange du champ Γ_{ac} dans le cas $m_a = m_c = m$ de l'Annexe C. Le premier terme de l'expression (C.42) est de la forme

$$\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b \nu_d} \langle m\nu_a \ m'\nu_b | G(r) F[\rho] | m'\nu_d \ m\nu_c \rangle R_{m'\nu_d \nu_b}^{qs}, \quad (\text{IV.1})$$

où $R_{m'\nu_d \nu_b}^{qs}$ contient la dépendance dans la matrice densité ρ ,

$$R_{m'\nu_d \nu_b}^{qs} = \sum_{q'} \left[(M + H - (B + W)\delta_{qq'}) \Theta(m' + s) \rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q' m' + s} + (M - B\delta_{qq'}) \Theta(m' - s) \rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q' m' - s} \right].$$

Pour la partie spatiale de l'interaction (C.1), définie par le produit $G(r)F[\rho]$, nous étudions deux cas,

- $G(r) = e^{-r^2/p^2}$, $F[\rho] = 1$ et
- $G(r) = e^{-r^2/p^2}$, $F[\rho] = \frac{1}{2} (\rho^{\alpha}(\vec{r}_1) + \rho^{\alpha}(\vec{r}_2))$.

IV.1.1.1 Cas $G(r) = e^{-r^2/p^2}$, $F[\rho] = 1$

L'expression complète de l'interaction (C.1) prend dans ce cas la forme

$$\widehat{v}_{12} = (W + B\widehat{P}_\sigma - H\widehat{P}_\tau - M\widehat{P}_\sigma\widehat{P}_\tau)e^{-r^2/p^2}. \quad (\text{IV.2})$$

Selon la relation (C.158), l'élément de matrice de l'interaction s'exprime alors très simplement :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{m\nu_a\nu_c, m'\nu_b\nu_d} &= \langle m\nu_a \ m'\nu_b | G(r)F[\rho] | m'\nu_d \ m\nu_c \rangle \\ &= \sum_{\nu_\mu\nu_{\mu'}} T_{m\nu_a, m'\nu_d}^{\nu_\mu} T_{m'\nu_b, m\nu_c}^{\nu_{\mu'}} \langle 00, 00 | G | m' - m \ \nu_\mu, m - m' \ \nu_{\mu'} \rangle, \end{aligned}$$

et $\langle 00, 00 | G | m_\mu \ \nu_\mu, m_{\mu'} \ \nu_{\mu'} \rangle$ est explicité en (C.175).

L'expression (IV.1) du premier terme du champ échange devient ainsi

$$\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_{m' \geq 0 \ \nu_b\nu_d} \mathcal{I}_{m\nu_a\nu_c, m'\nu_b\nu_d} R_{m'\nu_d\nu_b}^{qs}. \quad (\text{IV.3})$$

La quantité $\mathcal{I}_{m\nu_a\nu_c, m'\nu_b\nu_d}$, qui représente l'élément de matrice de l'interaction, est ici indépendante de la matrice densité ρ . Par conséquent, même si, d'une itération à l'autre du programme, la matrice densité ρ est modifiée, la valeur de $\mathcal{I}_{m\nu_a\nu_c, m'\nu_b\nu_d}$ n'en sera pas affectée. En d'autres termes, la quantité $\mathcal{I}_{m\nu_a\nu_c, m'\nu_b\nu_d}$ peut être calculée une fois pour toutes en début de programme et sa valeur restera inchangée au cours des itérations. Par contre, le terme de champ $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$ doit être recalculé à chaque itération car il dépend de la matrice densité ρ à travers le terme $R_{m'\nu_d\nu_b}^{qs}$. Dans le calcul de ce terme de champ, la somme se concrétise numériquement par une boucle sur les indices m' , ν_b et ν_d . Cette boucle s'insère elle-même au sein d'une autre boucle plus externe sur les indices m , ν_a , ν_c , q et s . Les boucles à décrire à chaque itération pour recalculer le champ $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$ font donc intervenir les indices q , s , m , ν_a , ν_c , m' , ν_b et ν_d .

IV.1.1.2 Cas $G(r) = e^{-r^2/p^2}$, $F[\rho] = \frac{1}{2}(\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2))$

La forme complète de l'interaction (C.1) est ici

$$\widehat{v}_{12} = (W + B\widehat{P}_\sigma - H\widehat{P}_\tau - M\widehat{P}_\sigma\widehat{P}_\tau)e^{-r^2/p^2} \frac{1}{2}(\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)). \quad (\text{IV.4})$$

L'équation (C.68) donne la forme générale des éléments de matrice de cette interaction. On en déduit l'expression de l'élément de matrice particulier suivant

$$\begin{aligned} \langle m\nu_a \ m'\nu_b | G(r)F[\rho] | m'\nu_d \ m\nu_c \rangle &= \pi \int d^2\tilde{r} \ \rho^\alpha(\tilde{r}) \left[\phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m'|\nu_d}(\tilde{r}) \widetilde{G}_{m'\nu_b, m\nu_c}(\tilde{r}) \right. \\ &\quad \left. + \phi_{|m'|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m|\nu_c}(\tilde{r}) \widetilde{G}_{m\nu_a, m'\nu_d}(\tilde{r}) \right] \end{aligned}$$

Avec cette expression de l'élément de matrice de l'interaction, le terme de champ (IV.1) se développe comme suit

$$\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b \nu_d} \pi \int d^2 \tilde{r} \mathcal{J}_{m\nu_a \nu_c, m' \nu_b \nu_d}(\tilde{r}) \rho^\alpha(\tilde{r}) R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs},$$

$$\text{avec : } \mathcal{J}_{m\nu_a \nu_c, m' \nu_b \nu_d}(\tilde{r}) = \left[\phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m'| \nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m' \nu_b, m \nu_c}(\tilde{r}) \right. \\ \left. + \phi_{|m'| \nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m \nu_a, m' \nu_d}(\tilde{r}) \right].$$

La distribution spatiale de la densité $\rho(\tilde{r})$ et la quantité $R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs}$ dépendent de la matrice densité ρ et devront donc être recalculées à chaque itération. La quantité $\mathcal{J}_{m\nu_a \nu_c, m' \nu_b \nu_d}(\tilde{r})$, en revanche, ne fait pas intervenir la matrice densité, sa valeur ne sera donc pas modifiée au cours des itérations.

L'intégrale sur $\tilde{r} = (r_\perp, z)$ est approximée numériquement par une somme sur les points de Laguerre-Gauss et Hermite-Gauss $(r_{\perp i}, z_j)$,

$$\int d^2 \tilde{r} f(\tilde{r}) = \int r_\perp dr_\perp dz f(r_\perp, z) \\ \simeq \sum_{i,j} v_i w_j r_{\perp i} e^{r_{\perp i}^2} e^{z_j^2} f(r_{\perp i}, z_j).$$

Les valeurs des points de Laguerre-Gauss et de Hermite-Gauss, $r_{\perp i}$ et z_j , ainsi que des pondérations associées, v_i et w_j , sont données dans le livre de Abramowitz-Stegun [148]. Numériquement, le calcul du terme de champ prend donc la forme

$$\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b \nu_d} \pi \sum_{i,j} v_i w_j r_{\perp i} e^{r_{\perp i}^2} e^{z_j^2} \mathcal{J}_{m\nu_a \nu_c, m' \nu_b \nu_d}(r_{\perp i}, z_j) \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs} \\ = \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b \nu_d} \sum_{i,j} \mathcal{L}_{m\nu_a \nu_c, m' \nu_b \nu_d}(r_{\perp i}, z_j) \mathcal{R}_{m' \nu_d \nu_b}^{qs}(r_{\perp i}, z_j), \quad (\text{IV.5})$$

$$\text{où l'on a défini, } \mathcal{L}_{m\nu_a \nu_c, m' \nu_b \nu_d}(r_{\perp i}, z_j) = \pi v_i w_j r_{\perp i} e^{r_{\perp i}^2} e^{z_j^2} \mathcal{J}_{m\nu_a \nu_c, m' \nu_b \nu_d}(r_{\perp i}, z_j), \\ \text{et } \mathcal{R}_{m' \nu_d \nu_b}^{qs}(r_{\perp i}, z_j) = \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs}.$$

A chaque itération, le calcul du terme de champ $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$ nécessite donc de réaliser une boucle sur chacun des indices $q, s, m, \nu_a, \nu_c, m', \nu_b, \nu_d, i$ et j . Ces différentes boucles sont représentées schématiquement sur la Fig. IV.1(b). Les indices q et s correspondant à l'isospin et au spin ne peuvent prendre que deux valeurs $-1/2$ et $+1/2$. Chacun des autres indices décrit un ensemble de valeurs limitées par la taille de la base. L'indice m , par exemple, peut prendre toutes les valeurs entières positives inférieures à $N_m - 1$, $m = 0, 1, 2, \dots, N_m - 1$. L'indice ν_a est la contraction des indices $n_{\perp a}$ et $n_{z a}$, $\nu_a = (n_{\perp a}, n_{z a})$. Sur la Fig. IV.1(b), les valeurs que décrit cet indice, $\nu_a = 0, 1, 2, \dots, N_{\nu_a} - 1$, correspondent donc à différents couples $(n_{\perp a}, n_{z a})$. Il en est de même pour les indices ν_c, ν_b et ν_d . Enfin, les points de Laguerre $r_{\perp i}$ et de Hermite z_j peuvent décrire respectivement N_i et N_j valeurs différentes.

Ces boucles imbriquées permettent de réaliser la somme S qui correspond au terme

de champ $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$. Au sein des boucles, l'instruction qui permet de construire la somme S comprend deux opérations, une multiplication entre $\mathcal{L}_{m\nu_a\nu_c, m'\nu_b\nu_d}(r_{\perp i}, z_j)$ et $\mathcal{R}_{m'\nu_d\nu_b}^{qs}(r_{\perp i}, z_j)$, et une addition. Cette instruction est exécutée N_b fois avec

$$N_b = 2 \times 2 \times N_m \times N_{\nu_a} \times N_{\nu_c} \times N_{m'} \times N_{\nu_b} \times N_{\nu_d} \times N_i \times N_j.$$

En notant $t[\times]$ le temps d'exécution d'une multiplication et $t[+]$ celui d'une addition, on peut donc exprimer le temps d'exécution T_b de la procédure de la Fig. IV.1(b) comme

$$T_b = N_b (t[\times] + t[+]).$$

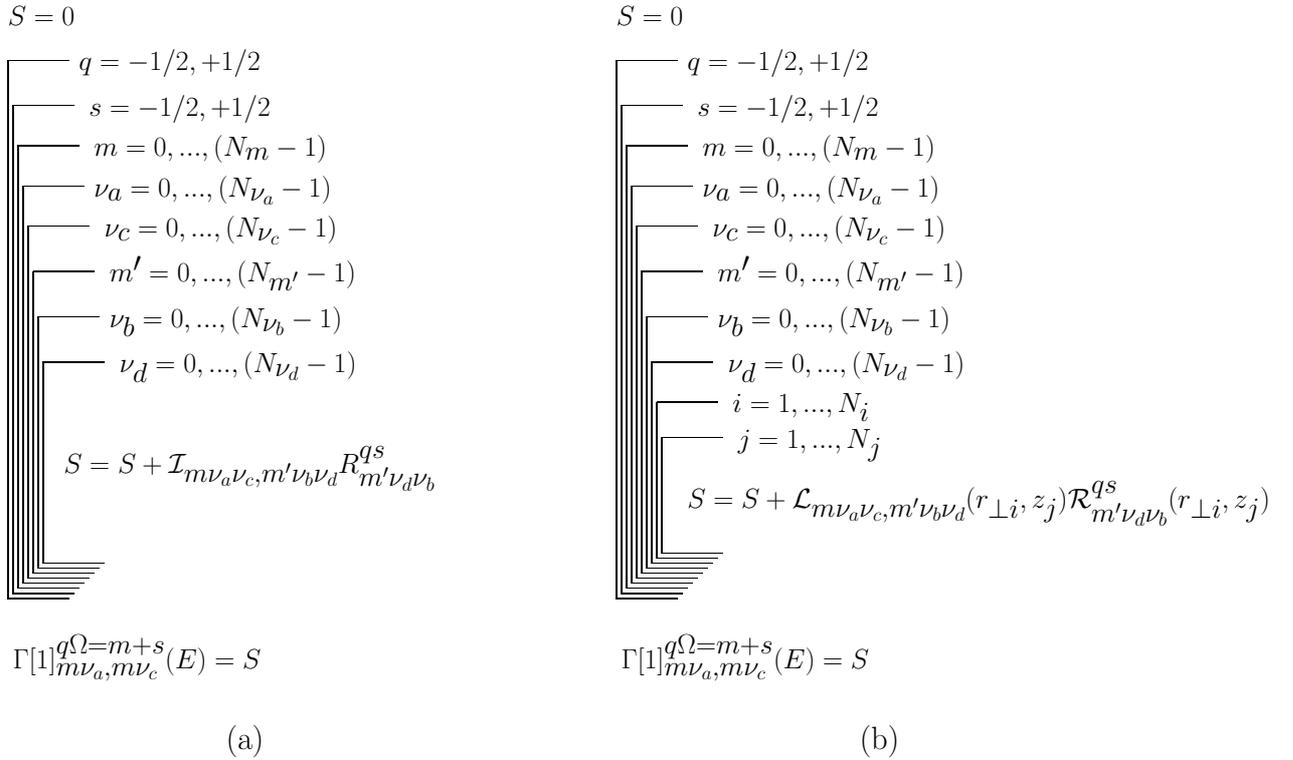


FIG. IV.1 – Structures de boucles pour le calcul du terme de champ échange. Partie (a) : expression (IV.3), Partie (b) : expression (IV.5).

La Fig. IV.1(a) revient sur le cas $G(r) = e^{-r^2/p^2}$ et $F[\rho] = 1$. Dans ce cas, le terme de champ $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$ prend la forme (IV.3). Les boucles à réaliser, représentées sur la figure, concernent alors les indices q , s , m , ν_a , ν_c , m' , ν_b et ν_d . L'instruction exécutée à l'intérieur de ces boucles met en jeu, une multiplication entre $\mathcal{I}_{m\nu_a\nu_c, m'\nu_b\nu_d}$ et $\mathcal{R}_{m'\nu_d\nu_b}^{qs}$, ainsi qu'une addition qui permet de réaliser la somme S . Le temps d'exécution total T_a de cette procédure est égal à

$$T_a = N_a (t[\times] + t[+]),$$

$$\text{avec } N_a = 2 \times 2 \times N_m \times N_{\nu_a} \times N_{\nu_c} \times N_{m'} \times N_{\nu_b} \times N_{\nu_d}.$$

Les temps d'exécution T_a et T_b ont été évalués respectivement avec les interactions modèles (IV.2) et (IV.4). Dans la forme analytique initiale (I.1) de l'interaction de Gogny, l'interaction modèle (IV.2) apparaît à deux reprises, avec les portées $p = \mu_1$ et $p = \mu_2$. La partie de portée finie de l'interaction de Gogny (I.1) donne donc un temps de calcul égal à $2T_a$. En outre, les temps de calcul associés aux termes de portée nulle étant très brefs, ils peuvent être négligés devant T_a . Aussi, avec la forme (I.1) de l'interaction de Gogny, le temps de calcul du terme de champ $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$ est

$$T_{(I.1)} = 2T_a.$$

Ce terme de champ étant le plus difficile à calculer au cours d'une itération, son temps de calcul donne une bonne idée du temps d'exécution de l'itération.

Dans la nouvelle forme analytique (III.13) de l'interaction de Gogny, un troisième terme de portée finie intervient, le terme densité. Ce terme correspond à l'interaction modèle (IV.4) avec la portée $p = \mu_3$. Son traitement nécessite un temps de calcul additionnel égal à T_b . Le temps d'exécution d'une itération devient alors

$$\begin{aligned} T_{(III.13)} &= 2T_a + T_b \\ &= (2 + N_i N_j)T_a \\ &= \left(1 + \frac{1}{2}N_i N_j\right) T_{(I.1)}. \end{aligned} \quad (IV.6)$$

Les temps d'exécution d'une itération $T_{(I.1)}$ et $T_{(III.13)}$ ainsi définis sont représentés en fonction de la taille de la base N_0 sur la Fig. IV.2.

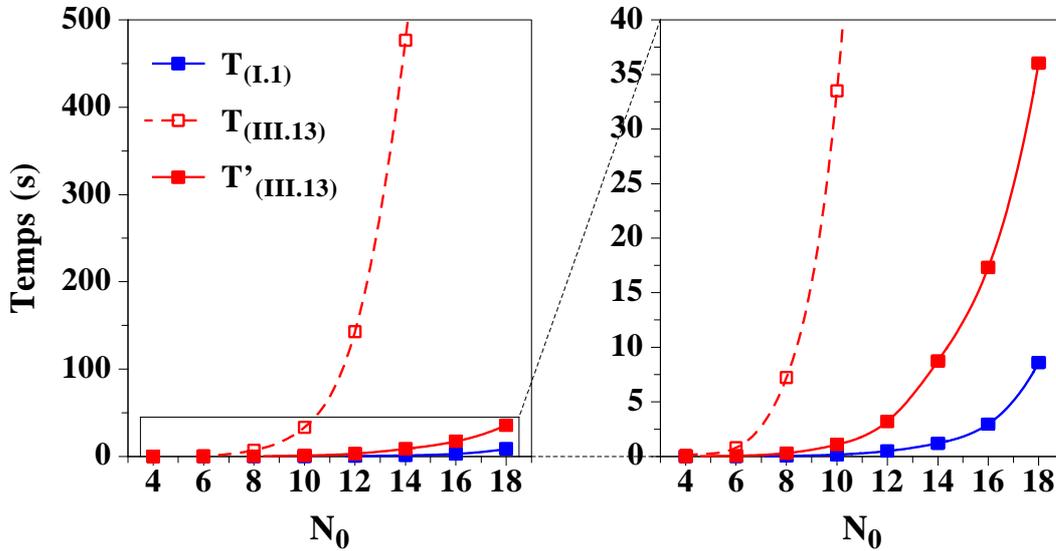


FIG. IV.2 – Temps d'exécution d'une itération du programme Hartree-Fock-Bogoliubov en fonction de la taille de la base N_0 . Le temps $T_{(I.1)}$ a été obtenu avec la forme (I.1) de l'interaction de Gogny. Les temps $T_{(III.13)}$ et $T'_{(III.13)}$ correspondent, quant à eux, à la nouvelle forme (III.13) intégrant un terme densité de portée finie. Pour obtenir le temps $T'_{(III.13)}$, la structure de boucles représentée sur la Fig. IV.1(b) a été réorganisée.

La taille de la base N_0 fixe les bornes supérieures des boucles représentées sur les Fig. IV.1(a) et (b). Les valeurs des indices de boucle m et $\nu = (n_\perp, n_z)$ sont en effet limitées par la relation

$$(2n_\perp + m + 1)\hbar\omega_\perp + (n_z + 1/2)\hbar\omega_z \leq (N_0 + 2)\hbar\omega_0,$$

où ω_\perp et ω_z sont les deux paramètres de l'oscillateur axial et $\omega_0^3 = \omega_\perp^2\omega_z$. Ainsi, plus la taille de la base N_0 sera grande, plus les limites des boucles ($N_m, N_{\nu_a}, N_{\nu_c}, \dots$) seront élevées et plus le temps d'exécution sera long. Cette tendance se retrouve sur les différentes courbes de la Fig. IV.2.

Pour la forme (I.1) de l'interaction de Gogny, les deux termes Gaussiens de portée $p = \mu_1$ et $p = \mu_2$ sont traités selon la procédure de la Fig. IV.1(a). Le temps d'exécution $T_{(I.1)}$ alors obtenu est représenté par la courbe bleue sur la Fig. IV.2. Il est comparé au temps d'exécution $T_{(III.13)}$ (courbe pointillée rouge) associé à la nouvelle forme analytique (III.13) de l'interaction de Gogny. Ce dernier a été calculé à partir de $T_{(I.1)}$ selon la relation (IV.6). Dans cette relation, les nombres de points d'intégration de Laguerre N_i et de Hermite N_j dépendent de la taille de la base. Dans le cas d'un noyau sphérique, la dépendance $N_i = N_j = 2N_0$ est choisie. La Fig. IV.2 montre que le temps d'exécution $T_{(III.13)}$ déduit de la relation (IV.6) est beaucoup plus long que le temps $T_{(I.1)}$ associé à la forme initiale (I.1) de l'interaction de Gogny. Le terme densité de portée finie intervenant dans la nouvelle forme (III.13) de l'interaction augmente donc abusivement le temps de calcul lorsqu'il est traité selon la procédure de la Fig. IV.1(b). Cependant, en réorganisant la structure de boucles schématisée sur la Fig. IV.1(b), il est possible de réduire considérablement le temps de calcul T_b associé au terme densité de portée finie. Cette méthode de restructuration des boucles du programme est présentée en détail dans la partie suivante. La nouvelle architecture du programme permet alors d'accéder à un temps d'exécution $T'_{(III.13)}$ beaucoup plus compétitif. La Fig. IV.2 montre avec la courbe en trait continu rouge que ce nouveau temps de calcul $T'_{(III.13)}$ est seulement 5 ou 6 fois plus long que le temps d'exécution initial $T_{(I.1)}$.

Les données de la Fig. IV.2 sont reprises en chiffres dans le Tab. IV.1.

N_0	4	6	8	10	12	14	16	18
$T_{(I.1)}$ (s)	0.003	0.011	0.056	0.167	0.494	1.212	2.976	8.616
$T_{(III.13)}$ (s)	0.099	0.803	7.224	33.50	142.9	476.4	1527	5592
$T'_{(III.13)}$ (s)	0.012	0.068	0.309	1.087	3.218	8.741	17.31	36.04
$\frac{T_{(III.13)}}{T_{(I.1)}}$	33	73	129	201	289	393	513	649
$\frac{T'_{(III.13)}}{T_{(I.1)}}$	4.0	6.2	5.5	6.5	6.5	7.2	5.8	4.2

TAB. IV.1 – Temps d'exécution d'une itération du programme Hartree-Fock-Bogoliubov en fonction de la taille de la base N_0 (cf. légende de la Fig. IV.2).

Lorsque le terme densité de portée finie de l'interaction (III.13) est traité selon la procédure de la Fig. IV.1(b), le temps d'exécution d'une itération $T_{(III.13)}$ s'avère être prohi-

bitivement long. Le rapport $\frac{T_{(III.13)}}{T_{(I.1)}}$ montre en effet que, en base $N_0 = 4$, le programme est 33 fois plus lent qu'avec l'interaction initiale (I.1). Ce facteur de ralentissement augmente avec la taille de la base et, pour $N_0 = 18$, le temps d'exécution devient 649 fois plus long. Cette lenteur excessive constitue un véritable handicap pour réaliser des calculs Hartree-Fock-Bogoliubov extensifs avec la nouvelle interaction (III.13). Comme mentionné précédemment, la résolution de ce problème passe par la restructuration des boucles schématisées sur la Fig. IV.1(b). La partie suivante montre comment cette réorganisation des boucles permet de réduire le temps de calcul. Ce traitement numérique revisité de la contribution du terme densité de portée finie conduit au temps d'exécution $T'_{(III.13)}$. Le Tab. IV.1 montre que le facteur de ralentissement alors obtenu varie peu avec la taille de la base et reste compris entre 4.0 et 7.2.

IV.1.2 Traitement numérique du terme densité de portée finie

Dans cette partie, nous souhaitons étudier l'influence de l'organisation des boucles sur le temps de calcul. Nous menons tout d'abord cette étude dans un cas simple pour illustrer notre démarche et introduire la méthode de restructuration des boucles. Nous appliquerons ensuite cette méthode au cas du terme de champ échange $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$.

IV.1.2.1 Introduction de la méthode par un cas simple

Considérons la quantité s suivante à calculer,

$$s = \sum_{a=1}^N \sum_{b=1}^N \sum_{c=1}^N f_1(a) f_2(a, b) f_3(b, c).$$

D'un point de vue numérique, cette somme multiple se programme sous la forme d'un ensemble de boucles imbriquées. Il existe plusieurs façons d'organiser ces boucles, certaines étant plus coûteuses que d'autres en ce qui concerne le temps d'exécution du programme. La structure de boucles la plus simple pour calculer la quantité s est représentée sur la Fig. IV.3.

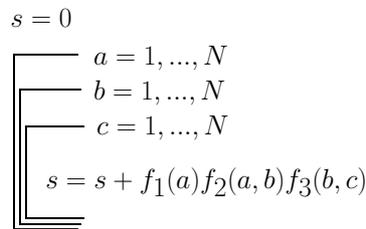


FIG. IV.3 – Structure de boucles la plus simple pour calculer s .

Au coeur des boucles, trois opérations sont réalisées, deux multiplications et une addition. Avec cette structure, le temps de calcul T_s de la quantité s est donc

$$T_s = N^3 (2t[\times] + t[+]),$$

avec $t[\times]$ le temps d'exécution d'une multiplication et $t[+]$ celui d'une addition.

Nous allons montrer qu'il existe une organisation des boucles qui réduit le nombre d'opérations mises en jeu. Pour rechercher cette structure optimale, nous reformulons le problème pour le modéliser graphiquement.

Prescription pour la représentation graphique : La quantité s fait intervenir une somme sur l'ensemble d'indices $\{a, b, c\}$. Ces indices sont corrélés par des fonctions, par exemple $f_2(a, b)$ corrèle les indices a et b , de même $f_3(b, c)$ corrèle b et c . Ces fonctions forment ainsi des blocs insécables : $f_2(a, b) \neq f_{2.1}(a) \cdot f_{2.2}(b)$, que l'on peut représenter par des points. De plus, ces différentes fonctions sont connectées entre elles par leurs indices communs : $f_1(a)$ et $f_2(a, b)$ sont connectées par l'indice a , de même, l'indice b connecte $f_2(a, b)$ et $f_3(b, c)$. Nous représentons une connection entre deux fonctions par une ligne labellée par l'indice commun. Par exemple, la ligne reliant $f_1(a)$ et $f_2(a, b)$ sera labellée par l'indice a . Ainsi, nous obtenons, pour la quantité s , la représentation graphique de la Fig. IV.4.

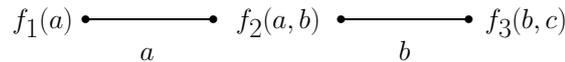


FIG. IV.4 – Représentation graphique de la quantité s .

L'intérêt de cette représentation graphique est de mettre clairement en évidence quelles fonctions sont connectées par des indices communs. L'étape suivante consiste à déterminer l'indice de la somme à réaliser en premier, a , b ou c .

La représentation graphique de la Fig. IV.4 montre que,

- la somme sur l'indice a fait intervenir les fonctions $f_1(a)$ et $f_2(a, b)$. Pour l'effectuer, il faut donc réaliser deux boucles, l'une sur l'indice a qui est sommé et l'autre sur l'indice b qui est ici spectateur.
- la somme sur l'indice b met en jeu les fonctions $f_2(a, b)$ et $f_3(b, c)$. Il y a donc trois indices à boucler : l'indice de sommation b et les deux indices spectateurs a et c .
- la somme sur l'indice c concerne la seule fonction $f_3(b, c)$. Il y a alors deux indices de boucles : l'indice de sommation c et l'indice spectateur b .

Cette analyse montre qu'il n'est pas avantageux de faire la somme sur l'indice b en premier. En effet, celle-ci nécessite trois boucles imbriquées portant sur les indices a , b et c .

Il reste maintenant à discriminer entre les sommes sur les indices a et c . Toutes les deux impliquent seulement deux boucles imbriquées. Cependant, le graphe montre que ces deux sommes ne sont pas équivalentes : un lien est labellé par l'indice a , alors qu'aucun ne l'est par l'indice c . Ce lien représente la multiplication entre les fonctions $f_1(a)$ et $f_2(a, b)$. Cette multiplication, coûteuse en temps de calcul, défavorise la somme sur l'indice a . La première somme que nous faisons est donc celle sur l'indice c , $g(b) = \sum_c f_3(b, c)$. Avec cette présomme, la quantité s se réécrit : $s = \sum_{a,b} f_1(a) f_2(a, b) g(b)$. La représentation

graphique correspondante, donnée sur la Fig. IV.5, est obtenue avec la même prescription que précédemment.

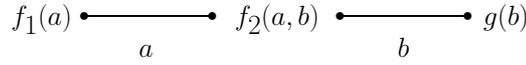


FIG. IV.5 – Représentation graphique de la quantité s .

Ce graphe montre que les indices a et b "voient" le même type d'environnement constitué par : une fonction à une variable ($f_1(a)$ pour a et $g(b)$ pour b), une fonction à deux variables ($f_2(a, b)$ pour a et b) et un lien. Ainsi, les sommes sur les indices a et b sont équivalentes du point de vue du temps de calcul. Nous choisissons d'effectuer en premier la somme sur l'indice b , $h(a) = \sum_b f_2(a, b) g(b)$. La quantité s se réécrit alors comme $s = \sum_a f_1(a) h(a)$, et le problème est résolu.

Pour construire les présommes $g(b)$ et $h(a)$, et finalement calculer s , la structure de boucles est la suivante :

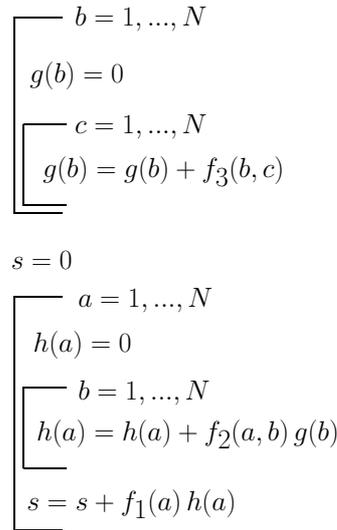


FIG. IV.6 – Structure de boucles qui permet d'optimiser le temps de calcul de s .

Au sein de cette nouvelle structure, le calcul de la présomme $g(b)$ nécessite N^2 additions. La deuxième présomme $h(a)$ fait intervenir N^2 multiplications et autant d'additions. Enfin, le calcul final de la quantité s fait intervenir N multiplications et additions. Ainsi, le temps d'exécution de cette nouvelle structure de boucles est

$$\begin{aligned}
 T'_s &= N^2 t[+] + N^2 (t[\times] + t[+]) + N (t[\times] + t[+]) \\
 &= N^2 t[+] + N(N + 1) (t[\times] + t[+]).
 \end{aligned}$$

Numériquement, le temps d'exécution d'une addition est négligeable devant celui d'une multiplication, $t[+] \ll t[\times]$. Les expressions des temps de calculs T_s et T'_s deviennent alors

$$\left. \begin{aligned}
 T_s &= 2N^3 t[\times] \\
 T'_s &= N(N + 1) t[\times]
 \end{aligned} \right\} \Rightarrow T'_s \leq T_s \text{ pour tout } N \geq 1.$$

Ces équations montrent que le temps d'exécution T'_s est systématiquement plus court que T_s . Par rapport au premier schéma de la Fig. IV.3, la nouvelle structure de boucles présentée sur la Fig. IV.6 permet donc de réduire le temps de calcul de la quantité s . Pour mettre en place cette structure de boucles optimisée, nous nous sommes appuyés sur une représentation graphique de la quantité s . Dans le cas simple de la quantité s qui ne fait intervenir que trois fonctions (f_1 , f_2 et f_3) et trois indices (a , b et c), cette représentation graphique peut sembler de peu d'intérêt et l'organisation optimale des boucles peut être directement déterminée à partir de l'expression $s = \sum_{a,b,c} f_1(a) f_2(a,b) f_3(b,c)$.

Toutefois, dans les cas des champs moyen et d'appariement de la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov, les expressions sont plus compliquées. Les sommes portent sur un plus grand nombre d'indices, ces derniers étant couplés par plusieurs fonctions. La représentation graphique de ces expressions permet alors de mieux visualiser l'ordre selon lequel les indices doivent être sommés pour réduire le temps de calcul. Cet ordre détermine complètement l'organisation et la structure des boucles dans le programme. Dans la partie suivante, nous appliquons cette technique au cas du terme de champ échange $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$.

IV.1.2.2 Application au cas du terme de champ $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$

Pour le terme de champ $\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$, nous avons jusqu'à maintenant travaillé avec l'expression (IV.5). Cette expression présentait l'avantage de séparer, sous forme de deux fonctions distinctes $\mathcal{L}_{m\nu_a\nu_c, m'\nu_b\nu_d}(r_{\perp i}, z_j)$ et $\mathcal{R}_{m'\nu_d\nu_b}^{qs}(r_{\perp i}, z_j)$, les parties indépendantes de la matrice densité de celles qui en dépendent. Ces dernières devront être recalculées à chaque itération pour tenir compte de l'évolution de la matrice densité.

En développant cette expression (IV.5), nous obtenons la forme suivante

$$\Gamma[1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b \nu_d} \sum_{i,j} \pi v_i w_j r_{\perp i} e^{r_{\perp i}} e^{z_j^2} \left[\phi_{|m|\nu_a}(r_{\perp i}, z_j) \phi_{|m'|\nu_d}(r_{\perp i}, z_j) \tilde{G}_{m'\nu_b, m\nu_c}(r_{\perp i}, z_j) \right. \\ \left. + \nu_a \leftrightarrow \nu_c, \nu_b \leftrightarrow \nu_d \right] \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) R_{m'\nu_d\nu_b}^{qs}.$$

Au sein des crochets, le deuxième terme s'obtient à partir du premier en changeant ν_a en ν_c et ν_c en ν_a ($\nu_a \leftrightarrow \nu_c$), et de même pour ν_b et ν_d ($\nu_b \leftrightarrow \nu_d$). Ces deux termes possédant une structure identique, ils se programmeront de la même manière. Aussi, nous considérons seulement le premier d'entre eux en définissant le terme de champ $\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$ comme

$$\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b \nu_d} \sum_{i,j} \pi v_i w_j r_{\perp i} e^{r_{\perp i}} e^{z_j^2} \phi_{|m|\nu_a}(r_{\perp i}, z_j) \phi_{|m'|\nu_d}(r_{\perp i}, z_j) \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) \\ \times \tilde{G}_{m'\nu_b, m\nu_c}(r_{\perp i}, z_j) R_{m'\nu_d\nu_b}^{qs}.$$

La fonction $\phi_{|m|\nu_a}$ n'est autre que la fonction de l'oscillateur harmonique axial $\phi_{m\nu_a}$ définie en (C.109) et (C.111) privée de sa phase $e^{im\varphi}$. Pour cette fonction, ainsi que pour la fonction $\tilde{G}_{m'\nu_b, m\nu_c}$ définie par (C.66), les parties radiales et axiales peuvent être séparées sous la forme

$$\phi_{|m|\nu_a}(r_{\perp i}, z_j) = \phi_{|m|n_{\perp a}}(r_{\perp i}) \phi_{n_{za}}(z_j) \quad \text{et} \quad \tilde{G}_{m'\nu_b, m\nu_c}(r_{\perp i}, z_j) = \tilde{G}_{m'n_{\perp b}, mn_{\perp c}}(r_{\perp i}) \tilde{G}_{n_{zb}, n_{zc}}(z_j).$$

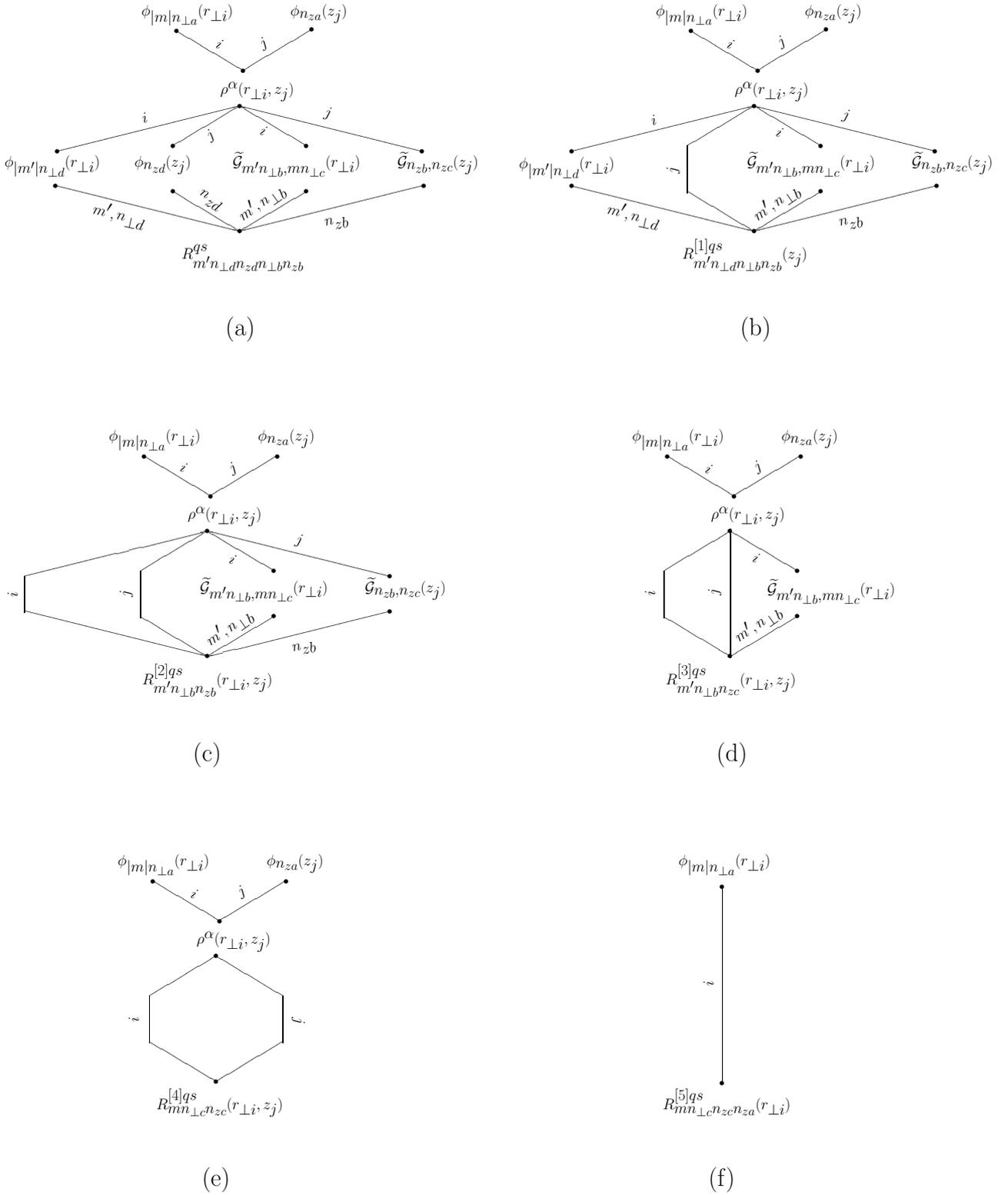


FIG. IV.7 – Représentations graphiques du terme de champ échange $\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$.

Enfin, en définissant

$$\tilde{\mathcal{G}}_{m'n_{\perp b}, mn_{\perp c}}(r_{\perp i}) = v_i r_{\perp i} e^{r_{\perp i}} \tilde{\mathcal{G}}_{m'n_{\perp b}, mn_{\perp c}}(r_{\perp i}) \quad \text{et} \quad \tilde{\mathcal{G}}_{n_{zb}, n_{zc}}(z_j) = \pi w_j e^{z_j^2} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{zb}, n_{zc}}(z_j),$$

le terme de champ $\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$ prend la forme

$$\begin{aligned} \Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = & \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b \nu_d} \sum_{i, j} \phi_{|m|n_{\perp a}}(r_{\perp i}) \phi_{n_{za}}(z_j) \phi_{|m'|n_{\perp d}}(r_{\perp i}) \phi_{n_{zd}}(z_j) \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) \\ & \times \tilde{\mathcal{G}}_{m'n_{\perp b}, mn_{\perp c}}(r_{\perp i}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{zb}, n_{zc}}(z_j) R_{m'n_{\perp d} n_{zd} n_{\perp b} n_{zb}}^{qs}. \end{aligned}$$

La Fig. IV.7(a) donne la représentation graphique de cette expression selon la prescription introduite dans la partie précédente. Sur cette figure, les liens entre deux fonctions sont le plus souvent labellés par les indices i ou j correspondant aux points de Laguerre $r_{\perp i}$ ou de Hermite z_j . L'indice i des points de Laguerre labelle trois liens qui connectent entre elles les quatre fonctions $\phi_{|m|n_{\perp a}}(r_{\perp i})$, $\rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j)$, $\phi_{|m'|n_{\perp d}}(r_{\perp i})$ et $\tilde{\mathcal{G}}_{m'n_{\perp b}, mn_{\perp c}}(r_{\perp i})$. Pour réaliser la somme sur i , une boucle sur les huit indices suivants est donc nécessaire : i (indice sommé), j , m , $n_{\perp a}$, $n_{\perp c}$, m' , $n_{\perp d}$ et $n_{\perp b}$ (indices spectateurs). Par le même raisonnement, on trouve que la somme sur l'indice j des points de Hermite implique une boucle sur six indices, j , i , n_{za} , n_{zc} , n_{zb} et n_{zd} . Les autres sommes qui interviennent dans le calcul du terme de champ $\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$ concernent les indices m' , $n_{\perp b}$, n_{zb} , $n_{\perp d}$ et n_{zd} . Parmi elles, les sommes sur les indices $n_{\perp d}$ ou n_{zd} sont les plus avantageuses avec, à chaque fois, seulement cinq indices spectateurs. Ce décompte des indices spectateurs exclut les indices d'isospin q et de spin s qui ne peuvent prendre que deux valeurs $-1/2$ et $+1/2$. Finalement, les sommes sur les indices j , $n_{\perp d}$ ou n_{zd} sont les moins coûteuses en temps de calcul. Elles impliquent, pour chacune d'entre elles, seulement six indices à boucler dont un indice sommé et cinq indices spectateurs. Nous choisissons de réaliser en premier la somme sur l'indice n_{zd} , $R_{m'n_{\perp d} n_{\perp b} n_{zb}}^{[1]qs}(z_j) = \sum_{n_{zd}} \phi_{n_{zd}}(z_j) R_{m'n_{\perp d} n_{zd} n_{\perp b} n_{zb}}^{qs}$. Avec cette présomme, l'expression du terme de champ prend la forme

$$\begin{aligned} \Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = & \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b n_{\perp d}} \sum_{i, j} \phi_{|m|n_{\perp a}}(r_{\perp i}) \phi_{n_{za}}(z_j) \phi_{|m'|n_{\perp d}}(r_{\perp i}) \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) \\ & \times \tilde{\mathcal{G}}_{m'n_{\perp b}, mn_{\perp c}}(r_{\perp i}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{zb}, n_{zc}}(z_j) R_{m'n_{\perp d} n_{\perp b} n_{zb}}^{[1]qs}(z_j). \end{aligned}$$

La représentation graphique correspondante est schématisée sur la Fig. IV.7(b). Les sommes sur les indices i et j des points de Laguerre-Hermite font chacune intervenir huit indices. Cette figure montre également les sommes sur m' et sur $n_{\perp b}$ nécessitent la même structure de boucles formée par les huit indices m' , $n_{\perp b}$, n_{zb} , $n_{\perp d}$, m , $n_{\perp c}$, i et j . Encore une fois, nous omettons les indices d'isospin q et de spin s . Enfin, les sommes sur $n_{\perp d}$ et n_{zb} mettent chacune en jeu six indices dont cinq sont communs aux deux sommes, m' , $n_{\perp b}$, n_{zb} , $n_{\perp d}$ et j . Le sixième indice est i (n_{zc}) pour la somme sur $n_{\perp d}$ (n_{zb}). Avec seulement six indices de boucles, les deux sommes sur $n_{\perp d}$ et n_{zb} donnent les temps de calculs les plus rapides. Ces deux sommes étant globalement équivalentes, nous faisons le choix arbitraire

de privilégier la somme sur $n_{\perp d}$, $R_{m'n_{\perp b}n_{zb}}^{[2]qs}(r_{\perp i}, z_j) = \sum_{n_{\perp d}} \phi_{|m'|n_{\perp d}}(r_{\perp i}) R_{m'n_{\perp d}n_{\perp b}n_{zb}}^{[1]qs}(z_j)$. Cette nouvelle présomme définie, le terme de champ s'écrit

$$\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b} \sum_{i, j} \phi_{|m|n_{\perp a}}(r_{\perp i}) \phi_{n_{za}}(z_j) \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) \\ \times \tilde{\mathcal{G}}_{m'n_{\perp b}, mn_{\perp c}}(r_{\perp i}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{zb}, n_{zc}}(z_j) R_{m'n_{\perp b}n_{zb}}^{[2]qs}(r_{\perp i}, z_j).$$

La représentation graphique associée est donnée sur la Fig. IV.7(c). Les cinq sommes à considérer portent sur les indices i , j , m' , $n_{\perp b}$ et n_{zb} . Cette dernière somme sur n_{zb} est la plus simple à calculer avec seulement cinq indices spectateurs, i , j , m' , $n_{\perp b}$ et n_{zc} . En définissant $R_{m'n_{\perp b}n_{zc}}^{[3]qs}(r_{\perp i}, z_j) = \sum_{n_{zb}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{zb}, n_{zc}}(z_j) R_{m'n_{\perp b}n_{zb}}^{[2]qs}(r_{\perp i}, z_j)$, l'expression du terme de champ s'écrit

$$\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_{m' \geq 0} \sum_{n_{\perp b}} \sum_{i, j} \phi_{|m|n_{\perp a}}(r_{\perp i}) \phi_{n_{za}}(z_j) \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) \\ \times \tilde{\mathcal{G}}_{m'n_{\perp b}, mn_{\perp c}}(r_{\perp i}) R_{m'n_{\perp b}n_{zc}}^{[3]qs}(r_{\perp i}, z_j).$$

Sa représentation graphique correspond à la Fig. IV.7(d). On peut alors faire les sommes sur les deux indices m' et $n_{\perp b}$ pour construire la quantité $R_{mn_{\perp c}n_{zc}}^{[4]qs}(r_{\perp i}, z_j) = \sum_{m' \geq 0} \sum_{n_{\perp b}} \tilde{\mathcal{G}}_{m'n_{\perp b}, mn_{\perp c}}(r_{\perp i}) R_{m'n_{\perp b}n_{zc}}^{[3]qs}(r_{\perp i}, z_j)$. Le terme de champ s'exprime alors

$$\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_{i, j} \phi_{|m|n_{\perp a}}(r_{\perp i}) \phi_{n_{za}}(z_j) \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) R_{mn_{\perp c}n_{zc}}^{[4]qs}(r_{\perp i}, z_j).$$

Sa représentation graphique devient alors très simple comme le montre la Fig. IV.7(e). Les deux sommes restantes portent sur les indices i et j des points de Laguerre-Hermite. Chacune de ces deux sommes fait intervenir cinq indices spectateurs, sans compter les indices q et s . Nous traitons d'abord la somme sur j , $R_{mn_{\perp c}n_{za}}^{[5]qs}(r_{\perp i}, z_j) = \sum_j \phi_{n_{za}}(z_j) \rho^\alpha(r_{\perp i}, z_j) R_{mn_{\perp c}n_{zc}}^{[4]qs}(r_{\perp i}, z_j)$. Cette présomme conduit finalement à l'expression du terme de champ, représentée sur la Fig. IV.7(f), et de la forme

$$\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E) = \sum_i \phi_{|m|n_{\perp a}}(r_{\perp i}) R_{mn_{\perp c}n_{za}}^{[5]qs}(r_{\perp i}, z_j).$$

La dernière somme effectuée porte donc sur l'indice i des points de Laguerre.

Chacune des présommes précédemment définies est calculée numériquement par un ensemble de boucles imbriquées. Ces boucles portent sur l'indice sommé, ainsi que sur les indices spectateurs. En s'appuyant sur les représentations graphiques du terme de champ $\Gamma[1.1]_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s}(E)$ données sur les Fig. IV.7(a-f), nous avons construit ces présommes de manière à optimiser leur temps de calcul numérique. La structure de boucles finale ainsi obtenue permet de calculer les termes du champ échange en un minimum de temps. Toute cette procédure s'applique également très bien pour traiter numériquement le champ de réarrangement. En particulier, la partie échange, explicitée en (C.94), fait intervenir un grand nombre d'indices corrélés par différentes fonctions. Encore une fois, en représentant ce champ graphiquement, il est possible d'isoler les présommes les moins coûteuses en temps de calcul. Le temps d'exécution d'une itération, $T'_{(\text{III.13})}$, obtenu avec cette procédure a été présenté sur la Fig. IV.2 et dans le Tab. IV.1.

IV.2 Structure des noyaux finis

IV.2.1 Les noyaux sphériques

IV.2.1.1 Masses effectives et états à une particule

Les masses effectives m^*/m obtenues avec les paramétrisations D2A et D2B, respectivement égales à 0.75 et 0.74, sont très proches de la valeur (0.75) trouvée avec la paramétrisation D1N. Ces valeurs de masse effective, aussi présentées dans le Tab. V.4, ont été calculées dans la matière nucléaire infinie symétrique. Dans le cas d'une matière asymétrique, les masses effectives neutron et proton ne sont plus égales et ne peuvent donc plus être caractérisées par une valeur commune m^*/m . Leurs valeurs distinctes sont alors notées m_n^*/m pour les neutrons et m_p^*/m pour les protons. Les théories microscopiques basées sur l'approche de Bethe-Brueckner-Goldstone, qu'elles soient relativistes [79] ou non [75], prédisent une masse effective neutron supérieure à la masse effective proton, $m_n^*/m > m_p^*/m$, dans la matière riche en neutrons. Ces prédictions sont confortées par l'étude phénoménologique de Bao-An Li [149]. Cet auteur montre que la condition $m_n^*/m > m_p^*/m$ est nécessaire pour reproduire la dépendance en énergie du potentiel de Lane contraint par les données expérimentales de diffusion nucléon-noyau. Qu'en est-il des différentes paramétrisations de l'interaction de Gogny ? Quel comportement prédisent-elles pour les masses effectives neutron et proton dans la matière asymétrique ?

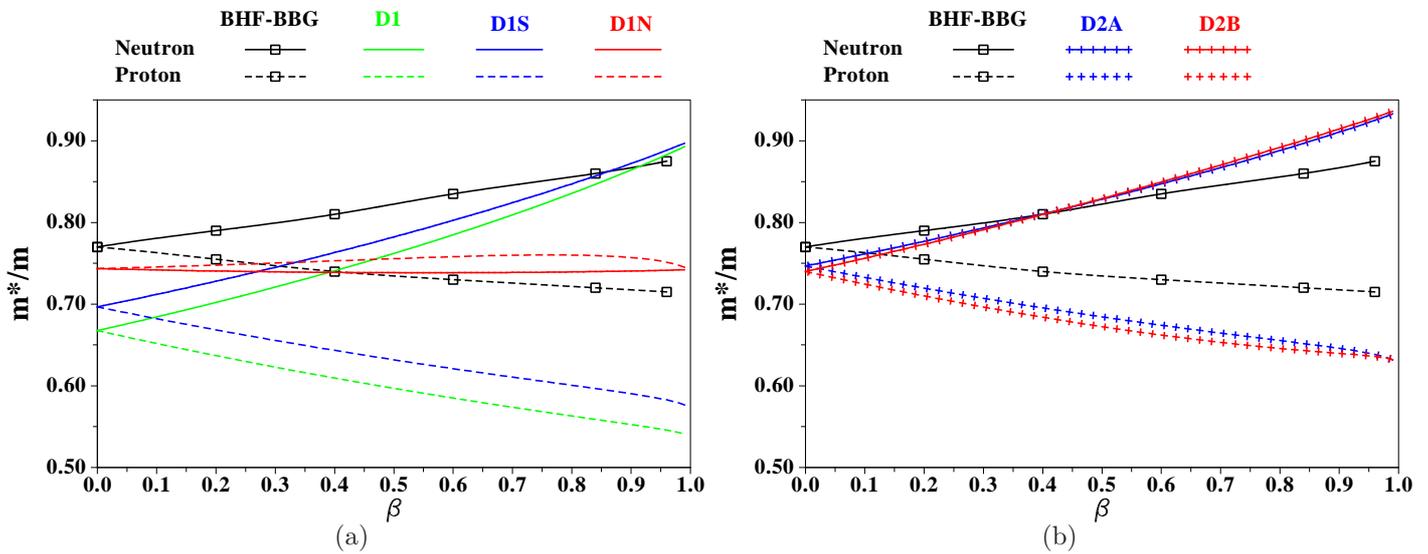


FIG. IV.8 – Séparation des masses effectives neutron et proton en fonction de l'asymétrie β du milieu. Les résultats obtenus avec les paramétrisations D1, D1S, D1N, D2A et D2B de l'interaction de Gogny sont confrontés aux prédictions microscopiques [75], notées BHF-BBG, déduites de l'approximation Brueckner-Hartree-Fock de la théorie de Bethe-Brueckner-Goldstone.

Pour répondre à ces questions, nous représentons ces masses effectives en fonction de l'asymétrie β du milieu, définie comme $\beta = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho_n + \rho_p}$ avec ρ_n et ρ_p les densités neutron et proton. Ces courbes ont déjà été tracées dans les cas des paramétrisations D1, D1S et D1N sur la Fig. II.6. Ces résultats sont également repris sur la Fig. IV.8(a). Ils sont comparés aux calculs microscopiques de la Ref. [75] fondés sur l'approximation Brueckner-Hartree-Fock de la théorie de Bethe-Brueckner-Goldstone et notés BHF-BBG sur les figures. Ces calculs prédisent une séparation des masses effectives telle que $m_n^*/m > m_p^*/m$ lorsque l'asymétrie β augmente. Pour l'asymétrie maximale $\beta = 1$, correspondant à la matière neutronique, la séparation obtenue avec ces calculs microscopiques BHF-BBG atteint $(m_n^*/m - m_p^*/m) = 0.16$. Avec les paramétrisations D1 et D1S, l'amplitude de la séparation des masses effectives est deux fois plus grande, mais conserve le signe prédit par les approches microscopiques, $(m_n^*/m - m_p^*/m) > 0$. Ce signe se trouve par contre inversé avec la paramétrisation D1N. Dans le chapitre II, nous avons interprété cette inversion comme une conséquence des contraintes imposées aux paramètres de l'interaction. Pour la paramétrisation D1N, la nouvelle contrainte imposée concerne la reproduction, aux basses densités, de l'équation d'état variationnelle [11] de la matière neutronique. Cette nouvelle contrainte semble donc être à l'origine de l'inversion de la séparation des masses effectives, $m_p^*/m > m_n^*/m$, observée avec la paramétrisation D1N.

Pour les nouvelles paramétrisations D2A et D2B, incluant un terme densité de portée finie, la séparation des masses effectives neutron et proton est représentée sur la Fig. IV.8(b). Les courbes obtenues avec ces deux paramétrisations sont très similaires. Dans les deux cas, la masse effective neutron reste supérieure à la masse effective proton, $m_n^*/m > m_p^*/m$, en accord avec les prédictions microscopiques BHF-BBG. Les amplitudes de séparation $(m_n^*/m - m_p^*/m)$ sont proches de celles obtenues avec les paramétrisations D1 ou D1S en atteignant $(m_n^*/m - m_p^*/m) = 0.30$ dans la matière neutronique ($\beta = 1$).

Tout comme la paramétrisation D1N, les paramétrisations D2A et D2B ont été ajustées pour reproduire, aux basses densités, l'équation d'état variationnelle [11] de la matière neutronique (cf. Fig. III.9 et III.16). Pour la paramétrisation D1N, cette contrainte supplémentaire sur les valeurs des paramètres est à l'origine de l'inversion de la séparation des masses effectives neutron et proton avec $m_p^*/m > m_n^*/m$. Paradoxalement, les paramétrisations D2A et D2B, bien qu'également soumises à cette contrainte sur l'équation d'état de la matière neutronique, sont capables de reproduire l'ordre de séparation prédit par les approches microscopiques, $m_n^*/m > m_p^*/m$. Pour expliquer ce paradoxe, il faut revenir aux formes analytiques des paramétrisations D1N, D2A et D2B. La paramétrisation D1N, basée sur la forme analytique (I.1) de l'interaction de Gogny, contient deux termes de portée finie ; ce sont les termes Gaussiens de portées μ_1 et μ_2 . Seuls ces termes de portée finie interviennent dans les expressions des masses effectives neutron et proton, les termes de portée nulle comme le terme densité ne contribuant pas. Dans le cas des paramétrisations D2A et D2B, nous avons fait évoluer ce dernier terme densité pour lui affecter une portée finie μ_3 et l'interaction de Gogny se présente désormais sous la forme analytique (III.13). Ce nouveau terme de portée finie, dépendant de la densité, apporte une contribution supplémentaire dans les expressions des masses effectives neutron et proton, grâce à laquelle l'ordre de séparation $m_n^*/m > m_p^*/m$ peut être reproduit.

La corrélation entre les masses effectives proton et neutron et les spectres d'états à une particule est présentée sur la Fig. IV.9. Les cas de trois noyaux sont étudiés, le ^{40}Ca , le ^{90}Zr et le ^{208}Pb .

Dans ce qui précède, nous avons défini l'asymétrie β de la matière nucléaire par $\beta = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho_n + \rho_p}$ où ρ_n et ρ_p sont respectivement les densités neutron et proton. La matière nucléaire étant un milieu homogène et isotrope, les densités de nucléons ne dépendent pas du vecteur position et peuvent être définies par $\rho_n = N/V$ et $\rho_p = Z/V$, avec N (Z) le nombre de neutrons (protons) occupant le volume V de matière. Dans la matière nucléaire, l'asymétrie peut donc également être définie comme $\beta = \frac{N-Z}{N+Z}$. L'avantage de cette deuxième définition est qu'elle est directement transposable au cas des noyaux finis, comme le ^{40}Ca .

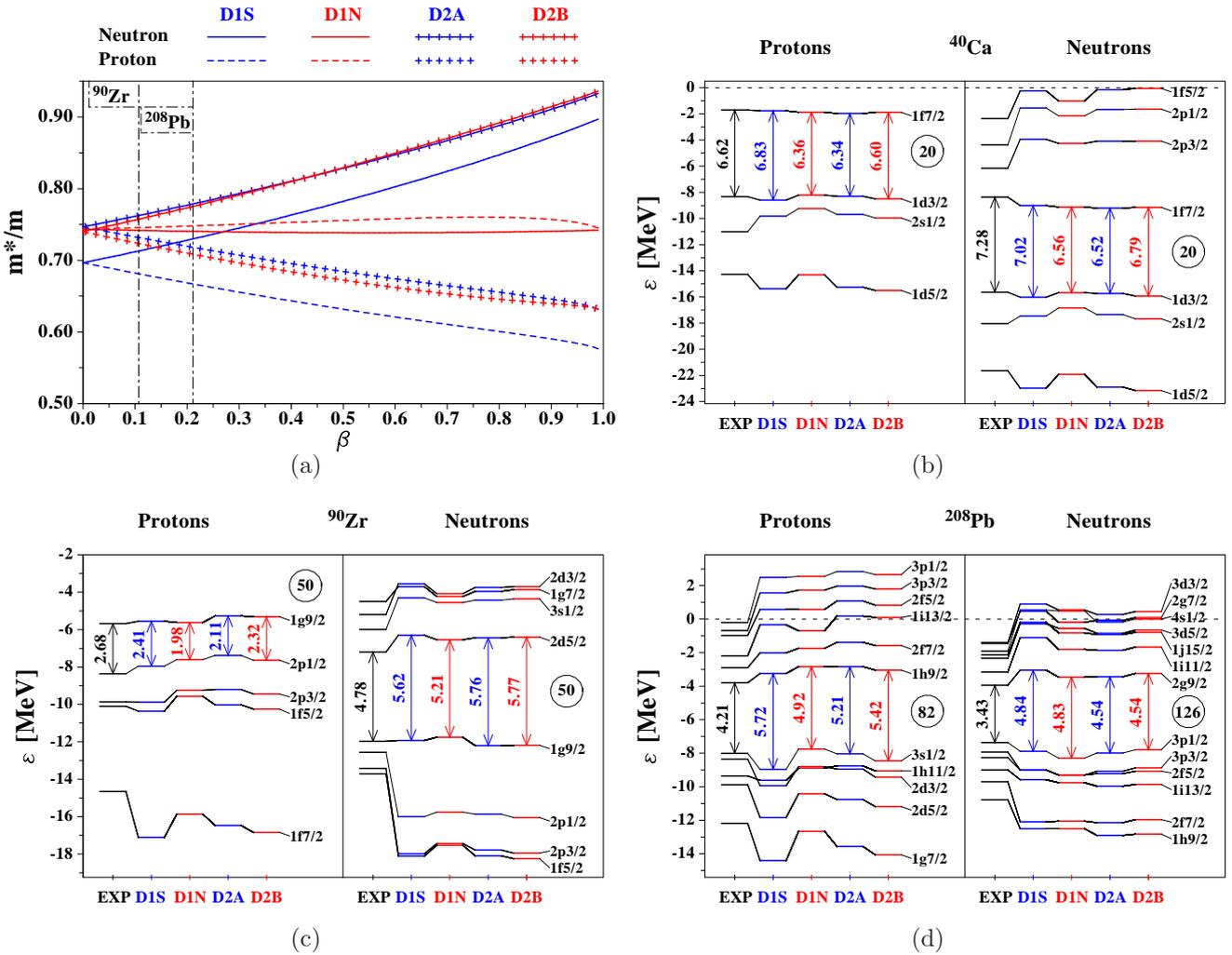


FIG. IV.9 – Partie (a) : Comportement des masses effectives neutron et proton en fonction de l'asymétrie β pour les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B. Parties (b), (c) et (d) : Spectres d'états à une particule calculés à l'approximation Hartree-Fock avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B dans les cas de trois noyaux, le ^{40}Ca , le ^{90}Zr et le ^{208}Pb . Les spectres d'états expérimentaux, notés EXP, sont également représentés.

Le noyau de ^{40}Ca , avec 20 protons et 20 neutrons, présente une asymétrie nulle $\beta = 0$. Dans ce cas, les masses effectives neutron m_n^*/m et proton m_p^*/m sont égales, leur valeur commune étant notée m^*/m . Les quatre paramétrisations que nous considérons ici, avec entre parenthèses les masses effectives correspondantes, sont D1S (0.700), D1N (0.744), D2A (0.747) et D2B (0.740). Pour les trois premières paramétrisations, les masses effectives sont donc telles que $(m^*/m)^{D1S} < (m^*/m)^{D1N} \simeq (m^*/m)^{D2A}$. Plus la masse effective m^*/m est élevée, plus le spectre d'états à une particule est comprimé, produisant un gap au niveau de Fermi ΔE_F de plus faible amplitude. Selon ce raisonnement, on s'attend à ce que les gaps au niveau de Fermi obéissent aux relations $\Delta E_F^{D1S} > \Delta E_F^{D1N} \simeq \Delta E_F^{D2A}$. Ces prédictions déduites des valeurs des masses effectives se trouvent confirmées par le calcul Hartree-Fock du spectre d'états. Ce dernier est représenté pour les différentes paramétrisations sur la Fig. IV.9(b). La colonne "EXP" correspond au spectre d'états mesuré expérimentalement [108, 109, 110, 111, 44]. Cette figure montre que, aussi bien pour les protons que pour les neutrons, le gap au niveau de Fermi obtenu avec la paramétrisation D1S est supérieur aux gaps calculés avec les paramétrisations D1N et D2A, ces derniers étant quasiment identiques. Ces relations entre les gaps correspondent bien à celles que nous avons présumées à partir des valeurs des masses effectives. Pour la paramétrisation D2B, les relations que l'on peut déduire des masses effectives sont moins bien vérifiées. Par exemple, les masses effectives très proches des paramétrisations D1N et D2B, $(m^*/m)^{D1N} \simeq (m^*/m)^{D2B}$, laissent supposer que les gaps au niveau de Fermi obtenus avec ces deux paramétrisations seront très voisins. La Fig. IV.9(b) montre le contraire avec une différence de $\Delta E_{Fp}^{D2B} - \Delta E_{Fp}^{D1N} = 240$ keV entre les gaps protons de ces paramétrisations.

Le noyau de ^{90}Zr présentant une asymétrie non nulle, $\beta \simeq 0.11$, les masses effectives neutron et proton doivent être considérées séparément. À cette asymétrie, les masses effectives neutron des paramétrisations D2A et D2B sont quasiment égales, $(m_n^*/m)^{D2A} = 0.763$ et $(m_n^*/m)^{D2B} = 0.758$. Il n'est donc pas surprenant d'obtenir des valeurs de gaps neutron presque identiques avec ces deux paramétrisations, $\Delta E_{Fn}^{D2A} = 5.76$ MeV et $\Delta E_{Fn}^{D2B} = 5.77$ MeV. La valeur du gap obtenue avec la paramétrisation D1N est seulement de $\Delta E_{Fn}^{D1N} = 5.21$ MeV, soit une diminution de 550 keV par rapport au gap de la paramétrisation D2A. On assiste donc à une compression du spectre lorsqu'on passe de la paramétrisation D2A à la paramétrisation D1N. Les valeurs des masses effectives ne permettent pas d'expliquer cette compression. En effet, avec $(m_n^*/m)^{D2A} = 0.763$ et $(m_n^*/m)^{D1N} = 0.742$, soit $(m_n^*/m)^{D2A} > (m_n^*/m)^{D1N}$, l'effet attendu était plutôt une dilatation. Les gaps neutron calculés avec les différentes paramétrisations surestiment la valeur expérimentale $\Delta E_{Fn}^{EXP} = 4.78$ MeV. Pour les protons, la valeur expérimentale $\Delta E_{Fp}^{EXP} = 2.68$ MeV est au contraire sous-estimée par nos calculs théoriques. Au-delà de l'approximation Hartree-Fock, la prise en compte des corrélations induites par l'interaction résiduelle, comme le couplage particule-vibration, aura pour effet de comprimer les spectres d'états théoriques et donc de diminuer les valeurs calculées des gaps au niveau de Fermi. Aussi, il est préférable que les valeurs théoriques des gaps obtenues à l'approximation Hartree-Fock surestiment, comme dans le cas des neutrons, la valeur expérimentale.

Le noyau de ^{208}Pb est le plus asymétrique avec $\beta = 0.21$. Pour ce noyau, les ampli-

tudes des gaps calculés avec les différentes paramétrisations sont cohérentes avec les valeurs des masses effectives. Nous définissons d’abord, pour chaque isospin $q = p, n$, la différence $\Delta' E_{Fq}^{D1S}$ entre le gap calculé avec la paramétrisation D1S et le gap expérimental, $\Delta' E_{Fq}^{D1S} = \Delta E_{Fq}^{D1S} - \Delta E_{Fq}^{EXP}$. Il est intéressant de remarquer que les valeurs numériques de cette différence, évaluées pour les protons et les neutrons, sont assez proches : $\Delta' E_{Fp}^{D1S} = 1.51$ MeV et $\Delta' E_{Fn}^{D1S} = 1.41$ MeV. Si l’on définit le même type de quantité $\Delta' E_{Fq}^{D1N}$ avec la paramétrisation D1N, on constate que les valeurs du côté ”Protons” ($q = p$) et du côté ”Neutrons” ($q = n$) ne sont alors plus comparables, $\Delta' E_{Fp}^{D1N} = 0.71$ MeV et $\Delta' E_{Fn}^{D1N} = 1.40$ MeV. Ce changement de situation s’explique par l’inversion de la séparation des masses effectives neutron et proton. Avec la paramétrisation D1S, la différence entre les masses effectives neutron et proton est positive, $(m_n^*/m)^{D1S} - (m_p^*/m)^{D1S} = +0.063$; elle devient négative avec la paramétrisation D1N, $(m_n^*/m)^{D1N} - (m_p^*/m)^{D1N} = -0.008$. Avec la paramétrisation D2A, la séparation des masses effectives neutron et proton redevient de signe positif et d’amplitude comparable à celle obtenue avec la paramétrisation D1S, $(m_n^*/m)^{D2A} - (m_p^*/m)^{D2A} = +0.060$. On retrouve alors, comme dans le cas de la paramétrisation D1S, des différences $\Delta' E_{Fq}^{D2A}$ de valeurs proches pour les deux isospins $q = p, n$, $\Delta' E_{Fp}^{D2A} = 1.00$ MeV et $\Delta' E_{Fn}^{D2A} = 1.11$ MeV. Cette discussion peut être reprise à l’identique pour la paramétrisation D2B avec laquelle on trouve $\Delta' E_{Fp}^{D2B} = 1.21$ MeV et $\Delta' E_{Fn}^{D2B} = 1.11$ MeV. La prise en compte du couplage particule-vibration dans la théorie réduira les gaps calculés à l’approximation Hartree-Fock d’une quantité δ_p pour les protons et δ_n pour les neutrons. De plus, si l’on suppose que les effets de ce couplage ne dépendent pas de l’isospin, on peut écrire $\delta = \delta_p = \delta_n$. Les nouvelles valeurs des gaps théoriques seront alors $\Delta E_{Fq}^P - \delta$ où P symbolise la paramétrisation, $P = D1S, D1N, D2A$ ou $D2B$. Les différences avec les gaps expérimentaux seront donc de la forme $\Delta'' E_{Fq}^P = \Delta' E_{Fq}^P - \delta$, avec $q = p, n$ l’isospin. Par conséquent, pour obtenir l’écart $\Delta'' E_{Fq}^P$ entre théorie et expérience le plus petit possible, à la fois pour les protons et pour les neutrons, il faut que $\Delta' E_{Fp}^P \simeq \Delta' E_{Fn}^P$. Cette condition se trouve vérifiée seulement pour les paramétrisations $P = D1S, D2A$ et $D2B$. Avec l’hypothèse que le couplage particule-vibration comprime de la même manière les spectres proton et neutron ($\delta = \delta_p = \delta_n$), on ne peut espérer, avec la paramétrisation D1N, reproduire simultanément les valeurs expérimentales des gaps proton et neutron.

IV.2.1.2 La chaîne isotopique de l’Etain

IV.2.1.2 – a L’oscillation de masses pair-impair

L’oscillation de masses pair-impair a été identifiée dès les débuts de la physique nucléaire [114]. Ce phénomène a été expliqué comme la manifestation des corrélations d’appariement entre les nucléons [150]. Pour quantifier ces corrélations, les différences de masses pair-impair sont les plus pertinentes. Des études [122, 123], fondées sur l’analyse microscopique des contributions de champ moyen et d’appariement, ont montré que la différence de masses à trois points, centrée sur un noyau impair, permet d’évaluer l’amplitude du gap

d'appariement. Cette différence est définie comme

$$\Delta^{(3)}(A) = \frac{(-1)^A}{2} [E(A+1) - 2E(A) + E(A-1)], \quad A \text{ impair},$$

où $E(A-1)$, $E(A)$ et $E(A+1)$ représentent les énergies de liaison (négatives) des systèmes contenant $A-1$, A et $A+1$ nucléons. Cette différence de masses peut être calculée dans la chaîne isotopique de l'Étain. Le calcul à partir des énergies de liaison expérimentales [15] est représenté par les cercles noirs sur la Fig. IV.10(a). Les énergies de liaison peuvent également être évaluées théoriquement à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov, avec la prescription du blocking [9] pour les noyaux impairs. Les valeurs alors obtenues pour la différence de masses $\Delta^{(3)}(A)$ sont présentées sur la même figure pour les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B.

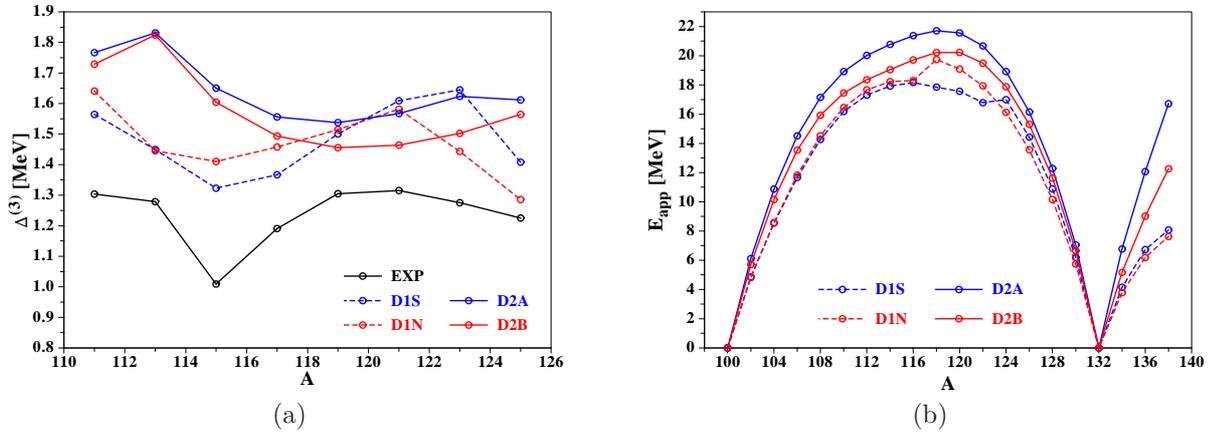


FIG. IV.10 – Partie (a) : Différences de masses pair-impair $\Delta^{(3)}$ en fonction du nombre de nucléons A dans la chaîne isotopique de l'Étain. Les résultats obtenus avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B sont comparés aux données expérimentales (EXP). Partie (b) : Énergie d'appariement neutron E_{app} en fonction du nombre de nucléons A dans la chaîne isotopique de l'Étain. Les calculs réalisés avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B sont présentés.

Les courbes théoriques obtenues avec les paramétrisations D1S ou D1N reproduisent correctement l'allure de la courbe expérimentale. En particulier, elles présentent, en accord avec l'expérience, un minimum en $A = 115$. Ce minimum reflète la diminution des corrélations d'appariement associée à la fermeture de la sous-couche $1g_{7/2}$ dans ^{114}Sn . Avec les paramétrisations D2A et D2B, la fermeture de cette sous-couche se manifeste également sur les courbes, sous la forme d'une diminution nette des valeurs des différences de masses entre $A = 113$ et $A = 115$, $\Delta^{(3)}(113) > \Delta^{(3)}(115)$. Cette diminution se poursuit jusqu'en $A = 119$, point à partir duquel les courbes redeviennent croissantes. Ainsi, avec les paramétrisations D2A et D2B, le minimum des différences de masses $\Delta^{(3)}(A)$ se trouve déplacé en $A = 119$.

Il faut cependant noter que nos résultats théoriques ne prennent pas en compte les effets de l'interaction résiduelle au-delà du champ moyen, comme le couplage particule-vibrations.

Ce couplage peut apporter un supplément d'énergie de liaison, $\delta E(A) < 0$, de quelques centaines de keV dans les noyaux impairs. Les nouvelles valeurs théoriques des différences de masses à trois points seraient alors

$$\begin{aligned}\Delta'^{(3)}(A) &= \frac{(-1)^A}{2} [E(A+1) - 2(E(A) + \delta E(A)) + E(A-1)] \\ &= \Delta^{(3)}(A) + \delta E(A), \quad A \text{ impair.}\end{aligned}\tag{IV.7}$$

Par conséquent, si la contribution $\delta E(A)$ apportée par le couplage particule-vibrations dépend, ne serait-ce que légèrement, du nombre de nucléons A , l'allure des nouvelles courbes théoriques $\Delta'^{(3)}(A)$ peut être assez différente des courbes initiales $\Delta^{(3)}(A)$. En particulier, les minimas prédits en $A = 119$ avec les paramétrisations D2A et D2B à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov avec blocking peuvent se trouver déplacés une fois le couplage particule-vibrations traité. Il faudrait alors que les nouveaux minimas obtenus soient situés en $A = 115$, conformément aux données expérimentales.

La relation (IV.7) montre également que, après traitement du couplage particule-vibrations, les valeurs théoriques $\Delta^{(3)}(A)$ seront réduites par la contribution négative $\delta E(A)$. Les nouvelles courbes de différences de masses $\Delta'^{(3)}(A)$ seront alors abaissées, en se rapprochant ainsi significativement de la courbe expérimentale. A l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov avec blocking, il est donc tout à fait justifié que nos résultats théoriques obtenus avec les différentes paramétrisations, de D1S à D2B, surestiment les différences de masses expérimentales.

Pour terminer, nous remarquons que la paramétrisation D2A produit les différences de masses $\Delta^{(3)}(A)$ les plus élevées, et ce indépendamment de l'isotope d'Étain considéré. Cette paramétrisation produira donc plus d'appariement que les trois autres. Cette conclusion est confirmée par l'étude des énergies d'appariement neutron E_{app} . Celles-ci sont représentées, en valeur absolue, sur la Fig. IV.10(b) pour les isotopes pair-pair, de l' ^{100}Sn à l' ^{138}Sn . Cette figure montre encore que les corrélations d'appariement les plus fortes sont obtenues avec la paramétrisation D2A. Les énergies d'appariement calculées avec la dernière paramétrisation D2B sont plus proches des valeurs obtenues avec les paramétrisations D1S ou D1N.

IV.2.1.2 – b Les spins des isotopes impairs de l'Étain

Les états fondamentaux et excités de plusieurs isotopes impairs de l'Étain ont pu être peuplés expérimentalement. Leurs spins, leurs parités et leurs énergies, ainsi accessibles à la mesure, sont publiés dans la base de données ENSDF du site internet de National Nuclear Data Center¹. Nous avons représenté ces spectres expérimentaux (EXP) sur la Fig. IV.11 pour 11 isotopes impairs, de l' ^{111}Sn à l' ^{131}Sn . Ils sont comparés aux spectres théoriques calculés, à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov avec blocking, avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B. Pour l'ensemble des spectres, expérimentaux et théoriques, l'énergie de l'état fondamental est prise comme origine.

Pour l' ^{111}Sn , nos calculs théoriques avec les trois paramétrisations prédisent un état fondamental de spin-parité $7/2^+$, en accord avec l'expérience. L'énergie d'excitation du premier

¹<http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>

état $1/2^+$, mesurée à 250 keV, est sous-estimée à 57 keV avec la paramétrisation D1S. Les paramétrisations D2A et D2B prédisent pour cet état des énergies d'excitation de 326 et 380 keV, plus proches de la valeur expérimentale.

Pour ^{113}Sn , l'état fondamental mesuré expérimentalement devient de spin-parité $1/2^+$. L'état $7/2^+$ expérimental acquiert alors une énergie d'excitation de 80 keV, correctement reproduite avec les paramétrisations D2A et D2B (103 keV et 95 keV, respectivement). La paramétrisation D1S surestime cette énergie à 315 keV. Elle surévalue également à 1310 keV l'énergie de l'état $11/2^-$ mesurée expérimentalement à 740 keV. Les paramétrisations D2A et D2B améliorent l'accord avec l'expérience en prédisant cet état $11/2^-$ à 982 et 944 keV.

Jusqu'à ^{119}Sn , l'état fondamental déterminé par l'expérience reste de spin-parité $1/2^+$, ce que prédisent correctement nos trois spectres théoriques.

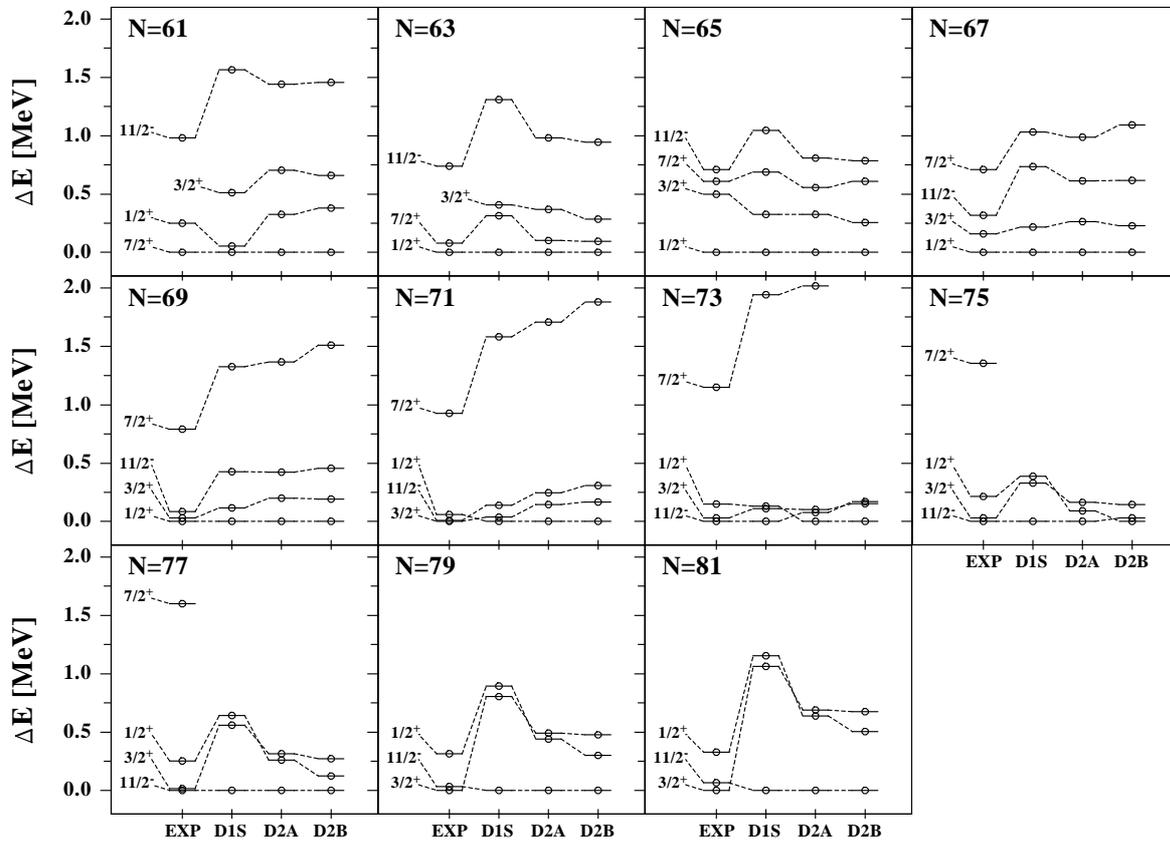


FIG. IV.11 – Energies et spins-parités de l'état fondamental et des premiers états excités dans un ensemble d'isotopes impairs de l'Étain, de ^{111}Sn à ^{131}Sn . Pour chaque spectre, les énergies ΔE ont pour origine l'énergie de l'état fondamental. Les spectres théoriques ont été calculés, à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov avec blocking, avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B. Pour chaque isotope, ces spectres sont confrontés au spectre expérimental (EXP).

L' ^{121}Sn est le premier isotope pour lequel nos calculs théoriques ne reproduisent pas le spin-parité expérimental, $3/2^+$, de l'état fondamental. Les calculs réalisés avec les trois paramétrisations affectent, en effet, le spin-parité $1/2^+$ à l'état de plus basse énergie. L'état $3/2^+$ théorique possède néanmoins une énergie d'excitation très faible, notamment avec la paramétrisation D1S (36 keV). Il reste possible que le couplage particule-vibrations, une fois inclus dans la théorie, permute les états $1/2^+$ et $3/2^+$ très proches en énergie pour finalement retrouver, en accord avec l'expérience, l'état $3/2^+$ comme fondamental. Ces considérations restent cependant spéculatives, seul un calcul complet tenant compte des effets de ce couplage permettrait de les confirmer ou, au contraire, de les infirmer. Enfin, l'énergie d'excitation expérimentale de l'état $7/2^+$ est surestimée de plus de 500 keV par les trois paramétrisations.

Dans l' ^{123}Sn , l'état fondamental mesuré expérimentalement devient de spin-parité $11/2^-$, il est correctement reproduit avec la paramétrisation D1S. En revanche, les paramétrisations D2A et D2B prédisent encore l'état $1/2^+$ comme le fondamental. Cependant, on remarque que l'énergie de l'état $11/2^-$ calculée avec ces deux paramétrisations ne cesse de diminuer depuis le premier isotope, l' ^{111}Sn . Aussi, cet état $11/2^-$ devient finalement celui de plus basse énergie à partir de l' ^{125}Sn pour la paramétrisation D2A et à partir de l' ^{127}Sn pour la paramétrisation D2B. Dans ce dernier noyau, les trois paramétrisations prédisent donc, en accord avec l'expérience, un état fondamental de spin-parité $11/2^-$.

Dans l' ^{129}Sn et l' ^{131}Sn , les spectres expérimentaux sont construits sur l'état fondamental de spin-parité $3/2^+$. Nos prédictions théoriques avec les différentes paramétrisations s'avèrent incorrectes, elles privilégient l'état $11/2^-$ comme fondamental. L'état $3/2^+$ calculé avec la paramétrisation D1S possède une énergie d'excitation significative, égale à 1062 keV dans l' ^{131}Sn . Avec les paramétrisations D2A et D2B, cette énergie d'excitation diminue à 689 keV et 675 keV respectivement, permettant ainsi une meilleure comparaison au spectre expérimental.

Ces différents résultats montrent que la structure à une particule obtenue avec D2A et D2B est plus proche de l'expérience que celle calculée avec D1S. Il reste cependant des désaccords notables, en particulier au voisinage de la fermeture de couches $N = 82$.

IV.2.1.2 – c Distributions spatiales des nucléons et des paires corrélées

La distribution spatiale des nucléons d'isospin $\tau = p, n$ sera caractérisée par la densité locale $\rho_\tau(\vec{r})$ définie comme

$$\rho_\tau(\vec{r}) = \sum_{i,j,\sigma} \phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \phi_j(\vec{r}, \sigma, \tau) \rho_{ji}. \quad (\text{IV.8})$$

En présence de corrélations d'appariement, la densité de paires corrélées sera définie par

$$\kappa_\tau(\vec{r}) = \sum_{i,j,\sigma} \phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \phi_j(\vec{r}, \sigma, \tau) \kappa_{ji}. \quad (\text{IV.9})$$

Dans ces définitions, nous avons noté

- \vec{r}, σ et τ : le vecteur position, l'indice de spin et l'indice d'isospin respectivement,
- $\phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau)$: la fonction d'onde de l'état i associé à une représentation donnée,
- ρ_{ji} et κ_{ji} : la matrice densité et le tenseur d'appariement (tous deux symétriques).

Dans ces définitions, les distributions spatiales des nucléons $\rho_\tau(\vec{r})$ et des paires corrélées $\kappa_\tau(\vec{r})$ sont construites à partir des fonctions d'onde d'une représentation donnée. Si la représentation choisie est celle de la base canonique², seuls les états i et j proches (en énergie) du niveau de Fermi contribuent au tenseur d'appariement κ_{ji} . La densité de paires $\kappa_\tau(\vec{r})$ se réduit alors à une somme, sur un nombre limité d'états voisins du niveau de Fermi, d'un produit de fonctions d'onde. Dans le cas de l'¹¹⁶Sn qui nous intéresse ici, le niveau de Fermi pour les neutrons est au cœur de la couche majeure comprise entre les nombres magiques $N = 50$ et $N = 82$. Les fonctions d'onde mises en jeu dans cette couche correspondent aux états $2d_{5/2}$, $1g_{7/2}$, $3s_{1/2}$, $2d_{3/2}$ et $1h_{11/2}$. Leurs formes spatiales sont représentées sur la Fig. IV.12(b). La fonction d'onde $3s_{1/2}$ se caractérise par sa contribution non-nulle à l'origine.

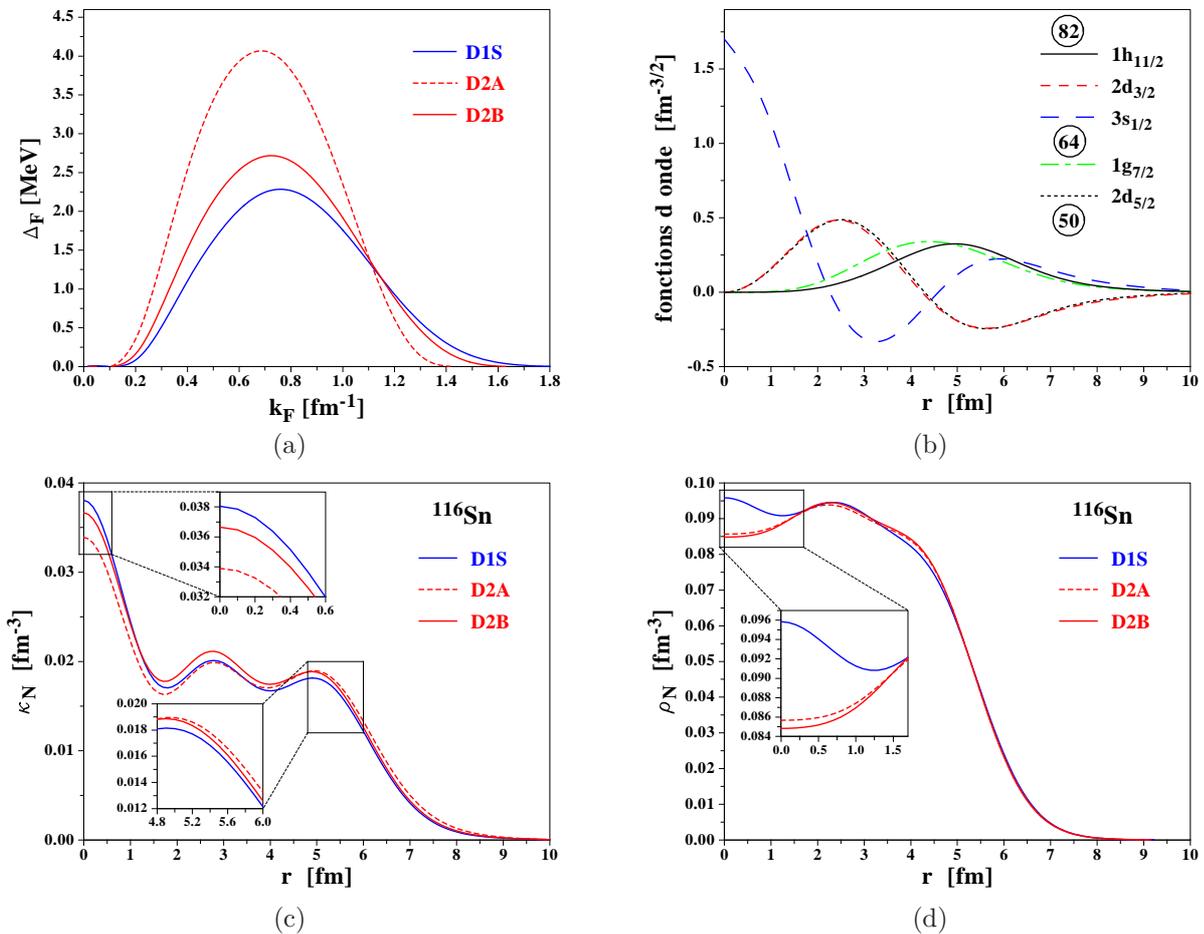


FIG. IV.12 – Partie (a) : Gap d'appariement Δ_F dans la matière nucléaire en fonction du moment de Fermi k_F . Partie (b) : Formes spatiales des fonctions d'onde de la couche majeure $N = 50 - 82$. Parties (c) et (d) : Distributions spatiales de la densité de paires de neutrons corrélées $\kappa_n(r)$ et de la densité de neutrons $\rho_n(r)$. Pour les parties (a), (c) et (d), les résultats obtenus avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B sont représentés.

²La base canonique permet, dans la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov, de diagonaliser la matrice densité ρ_{ji} et d'obtenir une forme canonique pour le tenseur d'appariement κ_{ji} .

Considérons maintenant la distribution spatiale des paires corrélées de neutrons, $\kappa_n(\vec{r})$, telle que définie en (IV.9). Le noyau d' ^{116}Sn étant sphérique, cette densité de paires est isotrope; elle dépend donc seulement de la norme r du vecteur position, $\kappa_n(\vec{r}) = \kappa_n(r)$. La Fig. IV.12(c) montre cette distribution spatiale des corrélations d'appariement, $\kappa_n(r)$, issue d'un calcul Hartree-Fock-Bogoliubov avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B. La contribution de la fonction d'onde $3s_{1/2}$, piquée en $r = 0$ (Fig. IV.12(b)), explique la valeur maximale $\kappa_n(0)$ de la densité de paires au centre du noyau. Jusqu'à $r = 1$ fm, la densité de paires suit le comportement décroissant de la fonction d'onde $3s_{1/2}$, puis présente deux maxima locaux en $r = 2.6$ fm et $r = 5.2$ fm. Cette structure à plus grande distance s'interprète également à partir des formes spatiales des fonctions d'onde sous-jacentes.

Les courbes obtenues avec les trois paramétrisations D1S, D2A et D2B présentent de légères différences sur lesquelles nous avons réalisé deux zooms. Le premier zoom montre que, au centre et en volume (V) du noyau, la densité de paires obtenue avec la paramétrisation D1S, $\kappa_{n,V}^{D1S}$, domine celle calculée avec la paramétrisation D2B, $\kappa_{n,V}^{D2B}$, elle-même supérieure au résultat de la paramétrisation D2A, $\kappa_{n,V}^{D2A}$,

$$\kappa_{n,V}^{D1S} > \kappa_{n,V}^{D2B} > \kappa_{n,V}^{D2A}. \quad (\text{IV.10})$$

Le deuxième zoom porte sur la surface (S) du noyau, située à 5 ou 6 fm du centre. Dans cette zone, les densités de paires $\kappa_{n,S}^{D1S}$, $\kappa_{n,S}^{D2A}$ et $\kappa_{n,S}^{D2B}$ obtenues avec les trois paramétrisations sont telles que

$$\kappa_{n,S}^{D1S} < \kappa_{n,S}^{D2B} < \kappa_{n,S}^{D2A}. \quad (\text{IV.11})$$

Les relations (IV.10) et (IV.11) peuvent être interprétées à partir de la dépendance en densité du gap d'appariement Δ_F dans la matière nucléaire. Celle-ci est représentée sur la Fig. IV.12(a) avec, en abscisse, le moment de Fermi k_F relié à la densité par $\rho = \frac{2k_F^3}{3\pi^2}$. Cette figure montre que les courbes calculées avec les trois paramétrisations D1S, D2A et D2B se croisent en $k_F = 1.1 \text{ fm}^{-1}$, soit $\rho \simeq \rho_0/2$. Au-delà du point de croisement, le domaine $k_F > 1.1 \text{ fm}^{-1}$ correspond à des densités $\rho > \rho_0/2$, typiquement rencontrées au coeur du volume (V) du noyau. Dans ce domaine, les valeurs du gap d'appariement calculées avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B seront notées $\Delta_{F,V}^{D1S}$, $\Delta_{F,V}^{D2A}$ et $\Delta_{F,V}^{D2B}$. Elles vérifient les relations

$$\Delta_{F,V}^{D1S} > \Delta_{F,V}^{D2B} > \Delta_{F,V}^{D2A}. \quad (\text{IV.12})$$

En-deçà du point de croisement, le domaine $k_F < 1.1 \text{ fm}^{-1}$ est celui des basses densités, $\rho < \rho_0/2$, typiques de la surface (S) du noyau. Les valeurs des gaps $\Delta_{F,S}^{D1S}$, $\Delta_{F,S}^{D2A}$ et $\Delta_{F,S}^{D2B}$ obtenues avec les trois paramétrisations obéissent alors aux inégalités

$$\Delta_{F,S}^{D1S} < \Delta_{F,S}^{D2B} < \Delta_{F,S}^{D2A}. \quad (\text{IV.13})$$

Les relations (IV.12) entre les gaps d'appariement dans la matière nucléaire, valables pour les densités $\rho > \rho_0/2$, sont cohérentes avec les relations (IV.10) concernant les distributions de paires corrélées au centre du noyau d' ^{116}Sn . De même, pour les densités $\rho < \rho_0/2$ caractéristiques de la surface du noyau, les relations (IV.13), entre les gaps d'appariement d'une part, et (IV.11), entre les densités de paires d'autre part, sont en accord.

Enfin, nous avons représenté sur la Fig. IV.12(d) la distribution spatiale de la densité de neutrons $\rho_n(r)$ obtenue, dans l' ^{116}Sn , avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B. Les profils de densités calculés avec les paramétrisations D2A et D2B sont très similaires. Ils se distinguent du résultat prédit par la paramétrisation D1S, principalement dans la région centrale du noyau, $r \leq 1.5$ fm. Le zoom réalisé sur cette région montre le comportement décroissant, signature de la fonction d'onde $3s_{1/2}$, de la courbe calculée avec la paramétrisation D1S. Avec les deux autres paramétrisations, D2A et D2B, cette fonction d'onde est dépeuplée, ainsi, sa contribution au profil de densité est diminuée. Les densités alors obtenues au centre du noyau sont plus faibles, ce déficit étant compensé par un excès de neutrons en surface.

Les distributions de neutrons sont difficilement accessibles à la mesure. En particulier, pour le profil de densité neutron de l' ^{116}Sn , aucune information expérimentale n'est reportée dans la littérature. Aussi il nous est impossible de discriminer, par confrontation avec l'expérience, entre les prédictions des paramétrisations D1S et D2A (ou D2B).

Les distributions de charges, relatives aux protons, sont en revanche mieux connues expérimentalement [14], par exemple dans le ^{208}Pb . Ce noyau présente l'intérêt de faire intervenir la fonction d'onde $3s_{1/2}$ dans sa mer de Fermi proton. Cette fonction d'onde contribue donc aux profils de densité de protons et de densité de charges de ce noyau. De plus, le taux d'occupation de cette fonction d'onde varie beaucoup selon la paramétrisation utilisée, comme nous l'avons illustré dans le cas de l' ^{116}Sn . Aussi, on peut s'attendre à obtenir des distributions de protons et de charges très différentes avec les paramétrisations D1S et D2A (ou D2B). La comparaison aux données expérimentales disponibles permettrait alors de déterminer quelle paramétrisation offre la meilleure description des profils de densités. Cette étude fait l'objet de la partie suivante.

IV.2.1.3 La chaîne isotopique du Plomb

IV.2.1.3 – a Distributions de charges et de neutrons dans le ^{208}Pb

Dans la partie précédente, nous avons mis en évidence la contribution de la fonction d'onde $3s_{1/2}$ sur la distribution de neutrons dans l' ^{116}Sn . Cette fonction d'onde doit également contribuer à la distribution de charges dans le ^{208}Pb , puisqu'elle appartient à la mer de Fermi proton de ce noyau. Les distributions de charges, calculées en tenant compte des facteurs de forme des protons, sont représentées sur la Fig. IV.13. Les calculs ont été réalisés pour les paramétrisations D1S, D2A et D2B avec les méthodes Hartree-Fock (HF) et Random Phase Approximation (RPA).

Pour la paramétrisation D1S, la distribution de charges obtenue avec la méthode HF reproduit correctement les données expérimentales (EXP) au-delà de $r = 2$ fm. Au centre du noyau, $r \leq 2$ fm, le calcul D1S-HF se distingue de la courbe expérimentale en prédisant un maximum trop prononcé comme le montre le zoom sur la Fig. IV.13. Ce maximum à l'origine, $\rho_{D1S-HF}(0) = 0.077 \text{ fm}^{-3}$, provient de la contribution de la fonction d'onde $3s_{1/2}$ et surestime la valeur expérimentale, $\rho_{EXP}(0) = 0.063 \text{ fm}^{-3}$.

L'ajout de corrélations dans l'état fondamental par la méthode RPA améliore significativement l'accord avec la distribution expérimentale. En particulier, la densité obtenue au

centre du noyau, $\rho_{D1S-RPA}(0) = 0.069 \text{ fm}^{-3}$, réduit d'un facteur deux l'écart à la valeur expérimentale. Celle-ci reste donc légèrement surestimée de 0.006 fm^{-3} .

Pour les paramétrisations D2A et D2B, seuls les calculs avec la méthode Hartree-Fock (HF) ont pu être réalisés. Ces deux paramétrisations donnent les mêmes résultats, aussi bien pour les distributions de charges que de neutrons, représentés par les courbes D2A/D2B-HF. Pour la distribution de charges, par rapport à la paramétrisation D1S, la valeur maximale au centre est réduite de 0.002 fm^{-3} . Cette légère amélioration de nos résultats à l'approximation HF doit être confirmée par des calculs RPA. En effet, comme nous l'avons illustré dans le cas de la paramétrisation D1S, le traitement des corrélations de type RPA peut modifier de manière significative la distribution de charges au centre du noyau.

La distribution de neutrons est moins bien déterminée expérimentalement, en particulier au centre du noyau. Ces incertitudes de mesures sont représentées par des barres d'erreur verticales sur la Fig. IV.13. Dans la région centrale, $r \leq 3 \text{ fm}$, la distribution obtenue avec la paramétrisation D1S à l'approximation HF présente des oscillations d'amplitude légèrement trop grande par rapport à la courbe expérimentale. Avec les paramétrisations D2A et D2B, l'amplitude de ces oscillations est réduite, et la distribution D2A/D2B-HF s'inscrit mieux dans les barres d'erreur expérimentales.

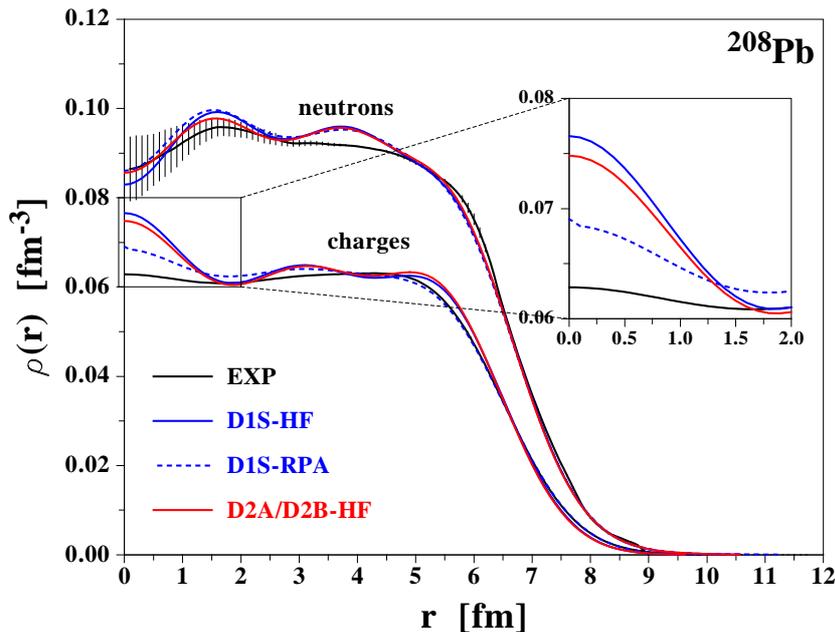


FIG. IV.13 – Distributions de charges et de neutrons dans le ^{208}Pb . Pour la paramétrisation D1S, les résultats sont présentés avec la méthode Hartree-Fock (HF), et avec la méthode plus générale de la Random Phase Approximation (RPA). Pour les deux paramétrisations D2A et D2B, seuls les calculs avec la méthode HF ont été réalisés. Les distributions obtenues avec ces deux paramétrisations sont identiques, aussi une seule courbe est présentée. Ces prédictions théoriques sont comparées aux distributions expérimentales (EXP) [14].

IV.2.1.3 – b Variation isotopique des rayons de charge

La variation isotopique des rayons de charge³ constitue un test exigeant de nos modèles théoriques. Les prédictions de ces modèles peuvent être confrontées aux mesures expérimentales de rayons de charge obtenues par spectroscopie avec faisceau laser atomique. Ces mesures ont permis de déterminer, avec une grande précision, la variation des rayons de charge le long de différentes chaînes isotopiques.

Dans la chaîne isotopique du Plomb, les rayons de charge expérimentaux présentent un point anguleux au niveau du ^{208}Pb . En d'autres termes, pour les noyaux plus lourds que le ^{208}Pb , les rayons de charge ne suivent pas la même tendance que pour les isotopes plus légers. Cet effet est représenté sur la Fig. IV.14.

Sur cette figure, la quantité Δr_c^2 est définie comme

$$\Delta r_c^2 = r_c^2(A) - r_c^2(208), \quad (\text{IV.14})$$

où nous avons noté $r_c(A)$ le rayon de charge de l'isotope de masse A . Pour toutes les courbes, le point de référence est donc le ^{208}Pb . La courbe EXP a été obtenue à partir des rayons de charge expérimentaux [151]. Pour les quatre autres courbes, les rayons de charge ont été calculés à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B.

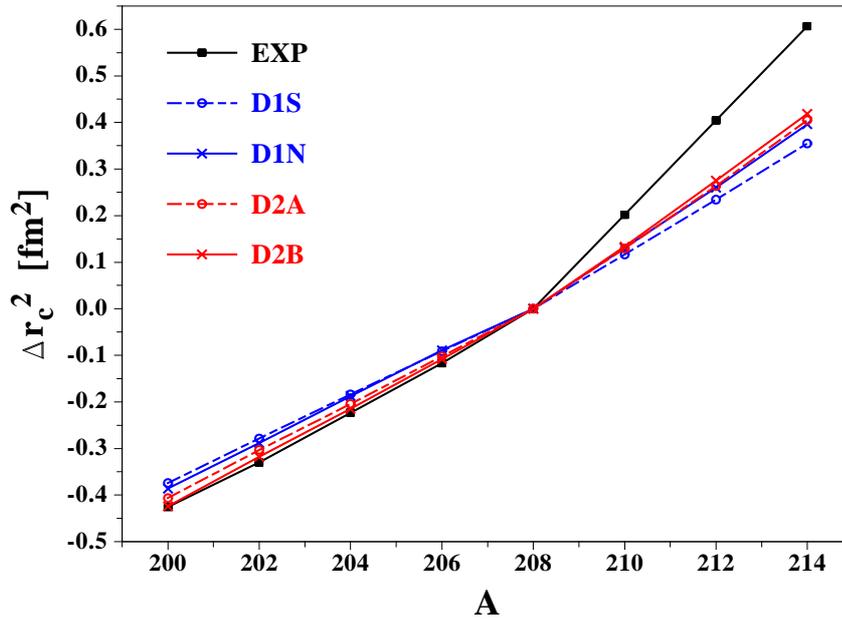


FIG. IV.14 – Variation isotopique des rayons de charge pour les isotopes du Plomb. La différence Δr_c^2 , définie en (IV.14), est représentée en fonction du nombre de masse A . Les prédictions théoriques obtenues, à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov, avec les paramétrisations D1S, D1N, D2A et D2B sont comparées aux données expérimentales (EXP).

³On appellera ici rayon de charge, la racine du rayon carré de charge, c'est-à-dire la racine du rayon carré moyen de la distribution de protons convoluée avec le facteur de forme du proton.

Les données expérimentales se caractérisent par un changement de pente au niveau du ^{208}Pb . L'angle θ défini entre les deux segments de part et d'autre du ^{208}Pb est alors de 2.7° . Nos calculs théoriques ne parviennent pas à reproduire un point anguleux aussi prononcé. Les angles obtenus avec les différentes paramétrisations sont donnés dans le Tab. IV.2. Avec un angle de 0.7° , la paramétrisation D1S prédit un changement de pente négligeable. Une légère amélioration est obtenue avec les paramétrisations D1N, D2A et D2B, l'angle produit est alors de 1.0° . On remarque de plus que, pour les isotopes de masse $A < 208$, la paramétrisation D2B reproduit avec une très bonne précision la variation isotopique expérimentale des rayons de charge.

	EXP	D1S	D1N	D2A	D2B
$\theta(^\circ)$	2.7	0.7	1.0	1.0	1.0

TAB. IV.2 – Angle θ (en degrés) entre les segments de part et d'autre du ^{208}Pb .

Les paramétrisations standards (SkM*, SIII, SGII, Sly4, ...) de l'interaction de Skyrme souffrent de la même pathologie, elles ne reproduisent pas correctement le point anguleux des rayons de charge expérimentaux. Aussi, différentes études ont été menées pour améliorer ces paramétrisations.

N. Tajima *et al.* [152], en particulier, sont parvenus à reproduire le changement de pente des rayons de charge expérimentaux en introduisant une interaction d'appariement dépendante de la densité agissant à la surface du noyau.

Les autres études s'inspirent du succès des approches de champ moyen relativistes. Ces approches relativistes [153], fondées sur les Lagrangiens effectifs, permettent en effet une très bonne reproduction de la variation isotopique des rayons de charge expérimentaux. Dans ces théories, l'interaction spin-orbite émerge naturellement du couplage des mésons σ et ω au nucléon de Dirac, et présente une légère dépendance isovectorielle. En s'appuyant sur ces résultats, Reinhard-Flocard [154] ou, plus récemment, de Sharma *et al.* [155] ont généralisé le terme spin-orbite de l'interaction de Skyrme pour y introduire une composante isovectorielle. Leurs travaux montrent qu'il devient alors possible de décrire avec une bonne précision les rayons de charge expérimentaux, et notamment le point anguleux au niveau du ^{208}Pb .

Selon ces études, la structure du terme spin-orbite joue un rôle essentiel dans la reproduction des rayons de charge expérimentaux le long des chaînes isotopiques. Or, la composante spin-orbite de l'interaction de Gogny actuelle étant de portée nulle, elle ne possède d'éléments de matrice non-nuls que dans le sous-espace triplet-impair ($S=1$, $T=1$) des états à deux nucléons. Sa dépendance isovectorielle est donc très particulière [154].

Une première façon de remédier à ce problème serait d'introduire une portée finie dans cette composante, ce qui lui permettrait d'agir dans les deux sous-espaces ($S=1$, $T=1$) et ($S=1$, $T=0$). Le poids relatif des deux sous-espaces pourrait être contrôlé par un paramètre de mélange X_T ajustable.

Une seconde façon, proposée par Pearson et Farine [156], consiste à postuler une composante spin-orbite toujours de portée nulle mais dépendant des densités proton et neutron.

L'interaction qui en résulte dépend de deux paramètres supplémentaires qui permettent de simuler la forme du champ spin-orbite déduit des approches de champ moyen relativiste.

La première solution possède le désavantage de nécessiter le calcul d'un champ spin-orbite d'échange et d'un champ d'appariement spin-orbite non triviaux, contrairement à la seconde solution. En revanche, elle a l'avantage de fournir des éléments de matrice de l'interaction résiduelle entre états de particule qui tendent vers zéro quand le moment de transfert devient infini. Cet aspect est important dans la perspective des extensions de la théorie de champ moyen à l'approche QRPA et aux méthodes de mélanges de configuration particule-trou les plus généraux.

IV.2.2 Les propriétés relatives à la déformation des noyaux

IV.2.2.1 Moments d'inertie de quelques terres rares et actinides

Dans les régions des terres rares et des actinides, les états de basse énergie de nombreux noyaux pair-pair ont pu être caractérisés expérimentalement. Les énergies des premiers états excités construits sur le fondamental 0^+ ont été mesurées. Le premier état excité, dans la grande majorité des noyaux pair-pair, est de spin-parité 2^+ . Les valeurs expérimentales de l'énergie d'excitation de cet état, $E(2^+)$, sont compilées, de ${}^4\text{He}$ au ${}^{256}\text{Fm}$, dans la Réf. [17]. Dans cette même référence, sont également reportées les mesures de probabilité de transition quadrupolaire électrique, $B(E2) \uparrow$, entre l'état fondamental 0^+ et le premier état 2^+ .

A partir de l'énergie mesurée du premier état 2^+ , il est possible de déduire la valeur expérimentale du moment d'inertie, $J_{EXP} = 3/E(2^+)$ [MeV^{-1}]. Pour qu'une telle définition du moment d'inertie soit justifiée, il est nécessaire que le spectre des premiers états excités soit rotationnel. Les quelques terres rares et actinides que nous étudions ici vérifient cette condition. Nous avons représenté leurs moments d'inertie expérimentaux par les cercles noirs sur les Fig. IV.15(a) et IV.15(b).

Les mesures de $B(E2) \uparrow$ permettent, quant à elles, de déterminer une estimation expérimentale du paramètre de déformation β_{EXP} . Cette estimation, bien que dépendante d'un modèle nucléaire particulier, pourra être comparée aux valeurs théoriques de déformation prédites par nos calculs. Le modèle nucléaire en question suppose une distribution de charge uniforme sur un rayon $R(\theta, \varphi)$ et nulle au-delà. Il permet de déduire la valeur expérimentale de la déformation β_{EXP} à partir des mesures de $B(E2) \uparrow$,

$$\beta_{EXP} = (4\pi/ZR_0^2) [B(E2) \uparrow / e^2]^{1/2},$$

où R_0 est pris égal à $1.2 A^{1/3}$ fm, et $B(E2) \uparrow$ est exprimé en $e^2 b^2$.

Ces estimations expérimentales du paramètre de déformation β_{EXP} sont représentées par les cercles noirs sur les Fig. IV.15(a) et IV.15(b). Les barres d'erreur proviennent des incertitudes de mesures sur les valeurs des $B(E2) \uparrow$.

Sur les mêmes figures sont reportées nos prédictions théoriques obtenues avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B. Selon la procédure proposée par M. Girod *et al.* [28], les

valeurs des moments d'inertie, calculées à l'approximation Inglis-Belyaev [26, 27], ont été multipliées par le facteur 1.33 pour reproduire les valeurs que l'on attend avec la méthode de Thouless-Valatin [25].

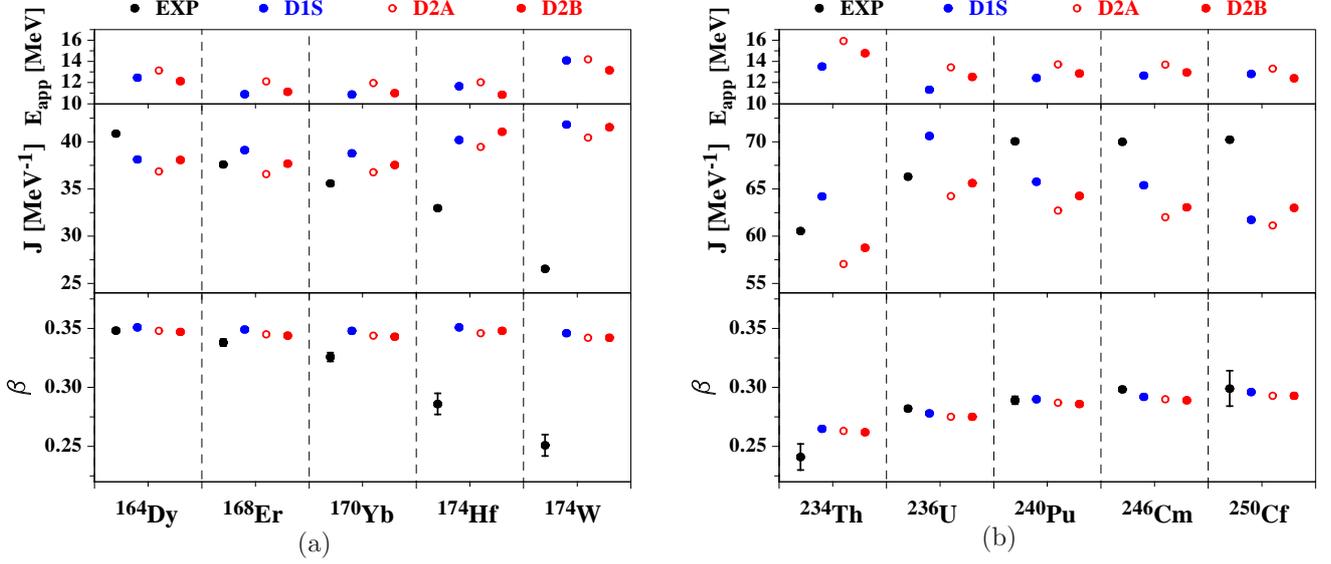


FIG. IV.15 – Energies d'appariement E_{app} (en valeur absolue), moments d'inertie J et déformations β calculés, à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov, avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B. Pour les moments d'inertie et les déformations, nos calculs sont confrontés aux données expérimentales, notées EXP et issues de la Réf. [17].

Partie (a) : Terres rares, Partie (b) : Actinides.

Pour les terres rares ^{164}Dy , ^{168}Er et ^{170}Yb , les moments d'inertie calculés avec les trois paramétrisations reproduisent correctement, avec une précision de 5 MeV^{-1} , les données expérimentales. Cet accord théorie-expérience se dégrade pour le ^{174}Hf et le ^{174}W . Les paramètres de déformation présentent le même type de comportement, les trois paramétrisations assurent une bonne reproduction des valeurs expérimentales sauf pour le ^{174}Hf et le ^{174}W . Cette similitude entre les rapports théorie-expérience des moments d'inertie et des déformations suggère une relation forte entre ces deux quantités. Expérimentalement, cette relation entre les moments d'inertie et les déformations a été mise en évidence et peut être paramétrisée sous la forme [9]

$$J_{EXP} \simeq \frac{\beta_{EXP}^2 A^{7/3}}{400} [\text{MeV}^{-1}]. \quad (\text{IV.15})$$

Si cette relation s'appliquait également aux déformations et moments d'inertie théoriques, l'écart $(\beta_{D1S}^2 - \beta_{EXP}^2) = 0.056$ dans le ^{174}W produirait une différence $(J_{D1S} - J_{EXP}) = 23.7 \text{ MeV}^{-1}$. La Fig. IV.15(a) montre que cette différence est en réalité sensiblement plus faible, soit $(J_{D1S} - J_{EXP}) = 15.3 \text{ MeV}^{-1}$. La relation (IV.15) permet donc d'expliquer semi-quantitativement l'écart entre les moments d'inertie J_{EXP} et J_{D1S} à partir des déformations β_{EXP} et β_{D1S} . Cette discussion peut être reprise, de la même manière, pour les paramétrisations D2A ou D2B.

Nous souhaitons maintenant comparer entre elles les prédictions des paramétrisations D1S, D2A et D2B. Les paramètres de déformation, β_{D1S} , β_{D2A} et β_{D2B} , obtenus avec ces trois paramétrisations sont très proches pour tous les noyaux considérés. Les valeurs des moments d'inertie, en revanche, dépendent de la paramétrisation utilisée. Avec la paramétrisation D2A, les valeurs obtenues sont systématiquement inférieures à celles prédites avec les paramétrisations D1S ou D2B. Pour comprendre cette tendance, il est intéressant de comparer les propriétés d'appariement de ces paramétrisations. Dans ce but, nous avons représenté les énergies d'appariement E_{app} (en valeur absolue) pour chacun des noyaux. Que ce soit pour les terres rares ou pour les actinides, la paramétrisation D2A est celle qui produit l'énergie d'appariement la plus forte. Cette paramétrisation favorise donc la développement d'une phase superfluide à l'origine de la diminution des valeurs des moments d'inertie. Cette diminution reste un effet faible pour la plupart des noyaux, sauf dans les cas du ^{234}Th et de ^{236}U . La différence entre les prédictions des paramétrisations D1S et D2A dépasse alors 5 MeV^{-1} .

La prise en compte, par la méthode du mélange de configurations, de l'étalement de la fonction d'onde dans l'espace des déformations peut encore légèrement modifier nos prédictions théoriques [28]. Aussi, nous sommes restés prudents dans la comparaison de nos résultats théoriques aux valeurs expérimentales des moments d'inertie.

IV.2.2.2 Les barrières de fission

La description du processus de fission nucléaire est l'un des aboutissements majeurs de nos calculs théoriques avec l'interaction de Gogny. La modélisation théorique de ce processus nécessite de connaître les propriétés statiques et dynamiques du système fissionnant. En particulier, les configurations nucléaires statiques hors équilibre, le couplage entre degrés de liberté collectifs et intrinsèques, ainsi que la dynamique des mouvements collectifs de grande amplitude doivent être pris en compte. Aussi, le calcul théorique consiste en deux étapes, un calcul statique permet de déterminer la surface d'énergie potentielle et les inerties collectives, puis un calcul dynamique, s'appuyant sur ces résultats, décrit l'évolution temporelle du système jusqu'à la fission.

Dans cette partie, nous nous contentons de tester l'étape statique de cette approche, en déterminant, à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov avec contraintes, les surfaces d'énergie potentielle de différents actinides le long du chemin de fission symétrique. Ces restrictions de symétrie proviennent du fait que la nouvelle forme analytique (III.13) de l'interaction de Gogny n'a été implémentée que dans le code Hartree-Fock-Bogoliubov à symétrie axiale conservant la parité.

Les surfaces d'énergie potentielle ainsi obtenues pour ^{238}U , le ^{240}Pu , le ^{242}Cm et le ^{250}Cf sont représentées en fonction de la déformation quadrupolaire axiale β sur les Fig. IV.16(a), (b), (c) et (d). Pour chacun de ces noyaux, le calcul Hartree-Fock-Bogoliubov avec contraintes a été réalisé avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B. Pour les paramétrisations D2A et D2B, nous avons translaté verticalement les surfaces d'énergie potentielle de façon à ce que les trois courbes possèdent le même minimum. De plus, les corrections d'énergie de point zéro rotationnelles ont été prises en compte afin que les courbes représentent le potentiel collectif du système fissionnant.

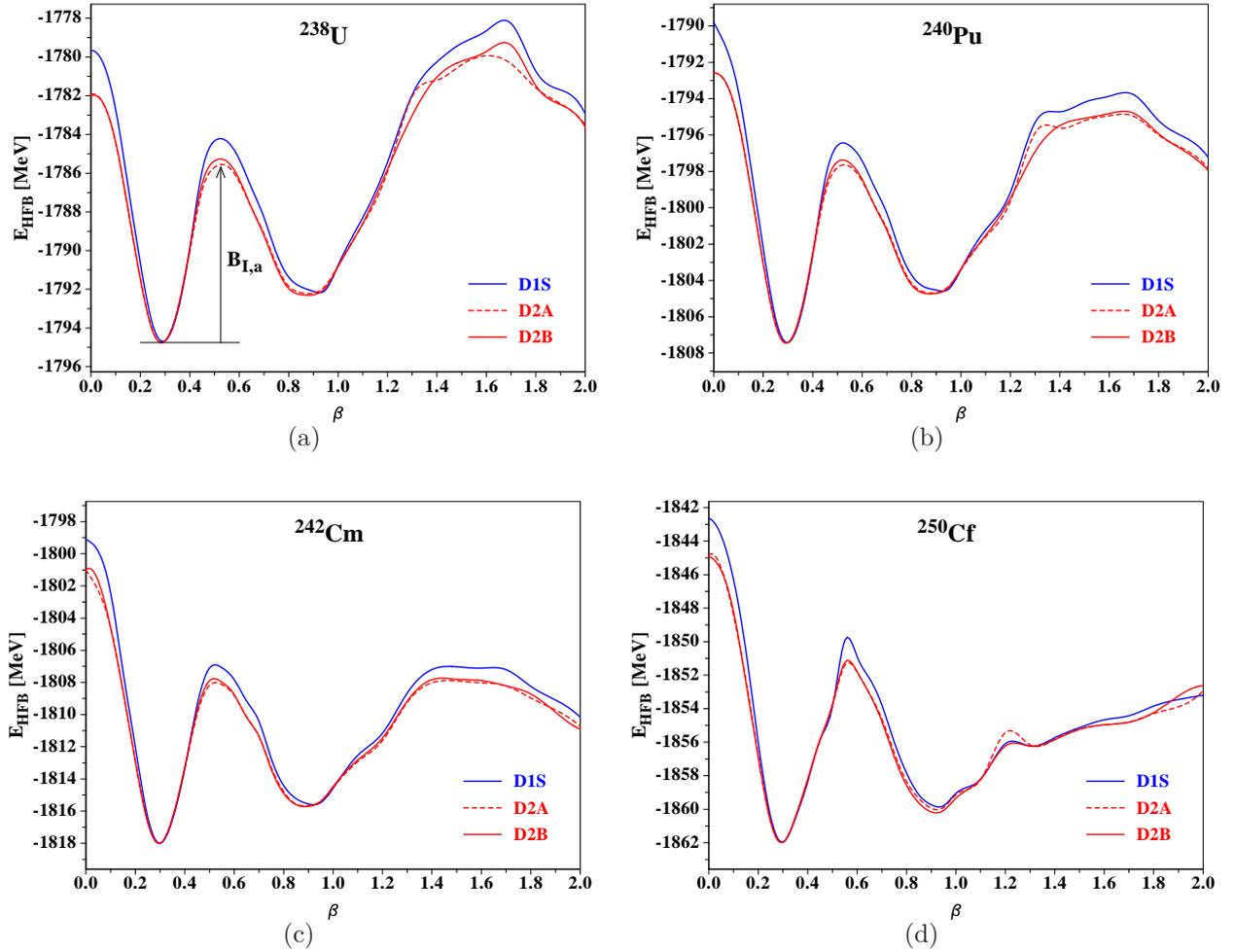


FIG. IV.16 – Surfaces d'énergie potentielle E_{HFB} représentées en fonction de la déformation quadrupolaire axiale β . L'énergie E_{HFB} a été calculée, à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov, avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B pour (a) l' ^{238}U , (b) le ^{240}Pu , (c) le ^{242}Cm et (d) le ^{250}Cf . Les surfaces d'énergie potentielle calculées avec les paramétrisations D2A et D2B ont été translatées verticalement pour que leur minimum coïncide avec celui prédit par la paramétrisation D1S.

Les surfaces d'énergie potentielle des quatre noyaux étudiés présentent deux puits aux déformations $\beta \sim 0.3$ et $\beta \sim 0.9$. Le premier d'entre eux, aussi le plus profond, correspond à l'état fondamental du système, le deuxième à un isomère de forme, l'isomère de fission. Ces deux puits sont séparés par une première barrière dont nous mesurons la hauteur $B_{I,a}$ par rapport au fond du premier puits. La Fig. IV.16 montre que, dans les quatre noyaux présentés, les hauteurs de barrière $B_{I,a}^{D2A}$ et $B_{I,a}^{D2B}$ obtenues avec les paramétrisations D2A et D2B sont inférieures d'environ un MeV aux hauteurs $B_{I,a}^{D1S}$ prédites par la paramétrisation D1S.

	²³⁴ U	²³⁸ U	²³⁸ Pu	²⁴⁰ Pu	²⁴⁴ Pu	²⁴² Cm	²⁴⁴ Cm	²⁵⁰ Cf	²⁵² Cf
B_I^{EXP} [MeV]	4.8	6.3	5.6	6.1	5.7	6.7	6.2	5.6	5.3
$B_{I,a}^{D1S}$ [MeV]	8.7	10.6	10.3	11.1	12.2	11.2	11.4	12.3	10.7
$B_{I,a}^{D2A}$ [MeV]	7.8	9.2	9.2	9.9	9.7	10.0	10.3	10.7	9.5
$B_{I,a}^{D2B}$ [MeV]	8.0	9.5	9.4	10.2	9.9	10.2	10.5	10.8	10.1

TAB. IV.3 – Hauteurs des premières barrières de fission pour différents noyaux. Nos prédictions théoriques, $B_{I,a}^{D1S}$, $B_{I,a}^{D2A}$ et $B_{I,a}^{D2B}$, calculées en symétrie axiale avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B sont comparées aux hauteurs de barrières déterminées expérimentalement B_I^{EXP} [157, 158].

Les valeurs exactes des hauteurs de barrière sont données dans le Tab. IV.3 pour neuf noyaux, dont les quatre auxquels nous nous sommes intéressés jusqu'ici. Ce tableau montre que, pour cet ensemble de noyaux, les barrières calculées avec les paramétrisations D2A et D2B sont de 500 keV à 2 MeV plus basses que celles obtenues avec la paramétrisation D1S. Les hauteurs de barrière évaluées expérimentalement [157, 158] sont rassemblées dans la ligne B_I^{EXP} du tableau. Leur comparaison directe avec nos résultats théoriques doit cependant être nuancée comme nous allons l'expliquer maintenant.

D'une part, les hauteurs de barrière expérimentales sont définies par rapport à l'état fondamental du noyau. L'énergie de point zéro dans le premier puits étant de l'ordre de 500 keV, les barrières théoriques doivent être diminuées d'autant. D'autre part, les calculs [159] avec la paramétrisation D1S montrent que les hauteurs de barrière triaxiales $B_{I,t}$ sont réduites de 2 à 3 MeV, selon les noyaux, par rapport aux valeurs axiales $B_{I,a}$. Avec ces réductions, les nouvelles hauteurs de barrières obtenues avec la paramétrisation D1S surévaluent encore de 1 à 2 MeV les valeurs expérimentales, notamment dans les isotopes de l'Uranium et du Plutonium.

Il serait évidemment intéressant de répéter ce calcul triaxial avec les paramétrisations D2A et D2B. En tout état de cause, les résultats en symétrie axiale montrent que les hauteurs de barrière calculées avec ces deux nouvelles paramétrisations sont inférieures à celles prédites par la paramétrisation D1S, améliorant ainsi l'accord avec les données expérimentales.

IV.2.3 La description des énergies de liaison

Von Weizsäcker fut le premier à proposer, dès 1935, une formule de masses semi-empirique permettant d'estimer les énergies de liaison des noyaux [29]. Les améliorations successives de cette première formule ont permis de développer les formules de masses macroscopiques-microscopiques. Ces dernières prennent en compte, phénoménologiquement, les corrections microscopiques à la contribution du terme de goutte liquide [160]. Dans ces modèles, les propriétés microscopiques et macroscopiques sont traitées indépendamment et leurs paramètres sont ajustés sur les énergies de liaison expérimentales. Malgré leur succès empirique, ces formules de masse n'établissent aucun lien cohérent entre le terme macroscopique et la correction microscopique. De plus, leurs prédictions dans les noyaux très exotiques peuvent être assez différentes d'un ensemble de paramètres

à l'autre. Ces problèmes rendent peu fiables les extrapolations de ces formules de masse aux régions non encore connues expérimentalement.

Pour améliorer le pouvoir prédictif de ces formules de masse, il est nécessaire de les fonder sur des théories plus microscopiques. En particulier, les théories de champ moyen auto-cohérent [161] constituent une approche mieux justifiée théoriquement et s'appuyant sur la définition d'une interaction nucléaire effective. Dans ce contexte, nous avons calculé, en symétrie axiale et à l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), les énergies de liaison B_{HFB} de 1818 noyaux pairs-pairs. Pour les comparer aux énergies de liaison expérimentales B_{EXP} [15, 16], nous définissons la différence

$$\Delta B_{HFB} = B_{EXP} - B_{HFB}, \quad (\text{IV.16})$$

expression dans laquelle les énergies de liaison expérimentales et théoriques, B_{EXP} et B_{HFB} , sont positives.

Sur la Fig. IV.17, nous présentons d'abord quatre chaînes isotopiques, celles du Soufre, de l'Etain, du Gadolinium et du Thorium. Pour chacune d'elles, nous avons calculé la quantité ΔB_{HFB} en fonction du nombre de neutrons N avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B.

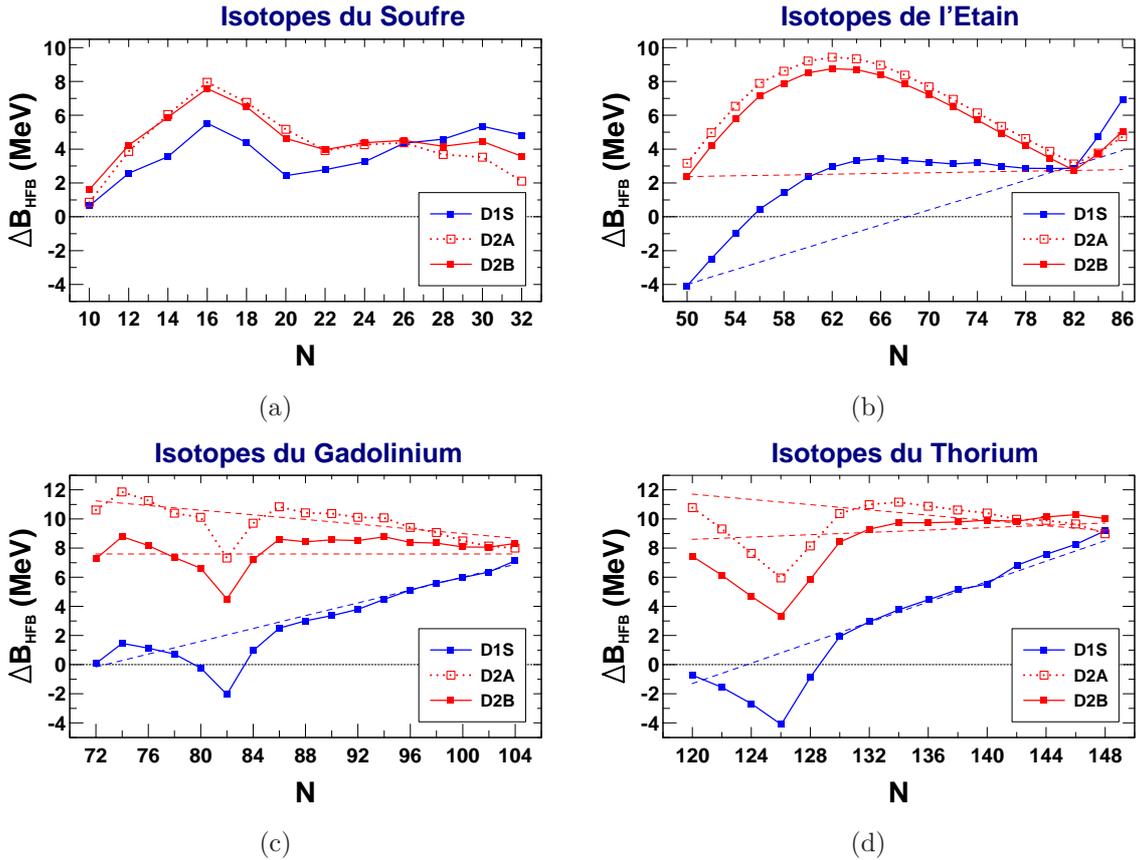


FIG. IV.17 – Différence ΔB_{HFB} , définie en (IV.16), représentée en fonction du nombre de neutrons N pour les chaînes isotopiques de quatre éléments, (a) le Soufre, (b) l'Etain, (c) le Gadolinium et (d) le Thorium. Pour chaque chaîne isotopique, les résultats obtenus avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B sont comparés.

Pour les isotopes du Soufre, les énergies de liaison prédites par les trois paramétrisations sont peu différentes. Elles sous-estiment les valeurs expérimentales, $B_{HFB} < B_{EXP}$, soit encore $\Delta B_{HFB} > 0$. Au-delà de l'approximation HFB, on s'attend à ce qu'un traitement plus général des corrélations entre les nucléons modifie nos prédictions en apportant une énergie de corrélation positive, $B_{corr} > 0$. Avec les nouvelles énergies de liaison théoriques ainsi obtenues, $B_{HFB} + B_{corr}$, la différence entre énergies de liaison expérimentales et théoriques sera diminuée pour devenir $\Delta B_{HFB} - B_{corr}$.

Dans la chaîne isotopique de l'Étain, les courbes représentatives des différences ΔB_{HFB} se caractérisent par une forme en arche ancrée sur les noyaux doublement magiques ^{100}Sn et ^{132}Sn . Nous savons que l'amplitude de cette arche sera significativement diminuée par le traitement dynamique des corrélations quadrupolaires. Ces corrélations concernent seulement les noyaux à couche ouverte, de ^{102}Sn à ^{130}Sn , et produisent un gain d'énergie de liaison. En revanche, les énergies de liaison des deux noyaux magiques, ^{100}Sn et ^{132}Sn , ne seront pas affectées par ces corrélations. La ligne droite pointillée joignant les deux extrémités de l'arche montre que, avec la paramétrisation D1S, les valeurs de ΔB_{HFB} dérivent de -4.1 à 2.9 MeV de ^{100}Sn à ^{132}Sn . Cette dérive est corrigée avec les paramétrisations D2A ou D2B, les valeurs de ΔB_{HFB} des deux noyaux magiques deviennent alors très proches.

Pour les isotopes du Gadolinium et du Thorium, les valeurs de ΔB_{HFB} varient linéairement, sauf à proximité des nombres magiques $N = 82$ ou $N = 126$, en fonction du nombre de neutrons N . Cette linéarité est matérialisée, pour chaque paramétrisation, par une ligne droite pointillée. Pour la paramétrisation D1S, la pente de cette ligne est positive et vaut, selon la chaîne isotopique, $a^{D1S} = 0.22$ MeV (Gadolinium) et $a^{D1S} = 0.35$ MeV (Thorium). Ces valeurs des pentes trahissent la dérive, en fonction du nombre de neutrons N , de nos prédictions théoriques par rapport aux énergies de liaison expérimentales. Avec la paramétrisation D2A, la pente de cette dérive change de signe et devient plus douce, $a^{D2A} = -0.08$ MeV pour les isotopes du Gadolinium et du Thorium. Les pentes obtenues avec la paramétrisation D2B sont quasiment nulles, cette paramétrisation corrige donc complètement la dérive des énergies de liaison le long de ces deux chaînes isotopiques.

Sur la Fig. IV.18 sont rassemblés les résultats obtenus pour l'ensemble des 1818 noyaux pairs-pairs calculés. Pour chaque paramétrisation, D1S, D2A et D2B, les valeurs de ΔB_{HFB} sont représentées en fonction du nombre de neutrons N et chaque ligne correspond à une chaîne isotopique donnée. Aux nombres magiques de neutrons, $N = 20, 50, 82$ et 126 , les courbes passent par des minima prononcés sur lesquels s'appuie une structure en forme d'arches. Hormis ces singularités localisées à proximité des nombres magiques, les valeurs de ΔB_{HFB} suivent un comportement linéaire le long des chaînes isotopiques, en particulier pour les éléments lourds. La pente de cette variation linéaire mesure la dérive des énergies de liaison théoriques B_{HFB} par rapport aux valeurs expérimentales B_{EXP} . Cette dérive, très marquée avec la paramétrisation D1S, se trouve significativement réduite, en changeant de signe, avec la paramétrisation D2A. La paramétrisation D2B est la seule capable de supprimer toute dérive, les pentes définies le long des chaînes isotopiques deviennent alors quasiment nulles.

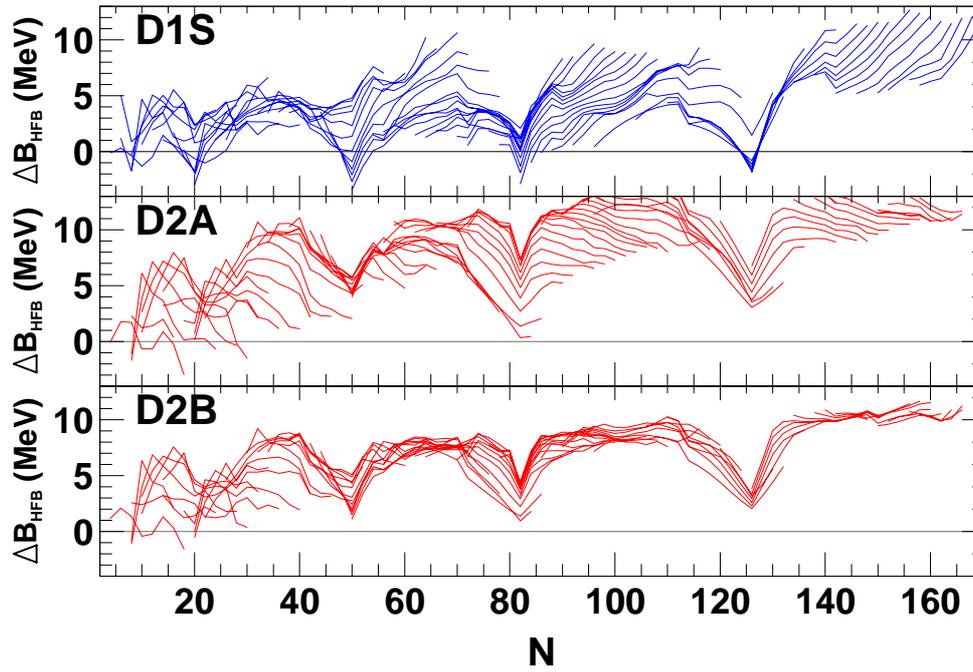


FIG. IV.18 – Différence ΔB_{HFB} , définie en (IV.16), représentée en fonction du nombre de neutrons N pour un ensemble de 1818 noyaux pairs-pairs. Les résultats, obtenus avec les paramétrisations D1S, D2A et D2B, sont donnés sous forme de faisceaux de lignes, où chaque ligne connecte les noyaux d'une même chaîne isotopique.

Conclusions

Ce travail a consisté à mettre au point des améliorations de l'interaction effective de Gogny. Dans un premier temps, nous avons réajusté les paramètres de l'interaction D1S pour reproduire l'équation d'état de la matière neutronique prédite par les approches Monte-Carlo variationnelle [11]. La nouvelle paramétrisation D1N ainsi obtenue permet une meilleure description des énergies de liaison le long des chaînes isotopiques. La dérive par rapport aux valeurs expérimentales qui se produisait avec la paramétrisation D1S se trouve en effet corrigée, conséquence directe de l'ajustement de la matière neutronique et de l'énergie de symétrie. Malgré ces améliorations, la paramétrisation D1N prédit, pour les masses effectives proton et neutron dans la matière nucléaire asymétrique, une séparation opposée aux résultats microscopiques. Elle produit également une liaison excessive dans le sous-espace singulet-impair de la matière nucléaire. Pour remédier à ces problèmes, nous avons décidé de faire évoluer le terme dépendant de la densité vers une portée finie.

Dans la deuxième partie du travail de thèse, nous avons donc introduit une nouvelle forme analytique de l'interaction de Gogny incluant un terme densité de portée finie. Cette évolution se trouve également justifiée par des arguments théoriques plus fondamentaux. En particulier, l'utilisation de l'interaction effective dans les approches au-delà du champ moyen de type QRPA ou, plus généralement, fondées sur des développements multiparticules-multitrous nécessite une portée non nulle dans les composantes de l'interaction. Avec cette modification, nous avons dû réajuster les paramètres pour finalement aboutir à deux paramétrisations intéressantes D2A et D2B. Ces deux nouvelles paramétrisations permettent de remédier aux pathologies de la paramétrisation D1N tout en conservant ses bonnes propriétés.

Nous choisissons de ne garder, à l'issue de ce travail de thèse, que la paramétrisation D2B qui nous semble la mieux adaptée sur différents points. D'abord, elle reproduit aux basses densités le gap d'appariement dans la matière nucléaire obtenu avec l'interaction réaliste de Paris. Ensuite, elle autorise une meilleure description des énergies de liaison le long des chaînes isotopiques en corrigeant complètement la dérive en fonction du nombre de neutrons. Concernant les autres propriétés, elle fournit une qualité de description équivalente à la paramétrisation D2A.

Pour cette raison, nous donnons ici les valeurs des paramètres de D2B, que nous appellerons désormais simplement D2. Cette nouvelle paramétrisation devrait constituer, seule, la seconde génération de l'interaction de Gogny.

	i	μ_i	W_i	B_i	H_i	M_i	α	W_{ls}
D2	1	0.8	-1176.440	800.000	-927.366	1115.573	-	130
	2	1.3	93.741	-162.161	122.414	-223.859	-	
	3	0.6	1800.000	600.000	400.000	-600.000	1/3	

TAB. - Valeurs des paramètres de l'interaction D2B, renommée finalement D2.

Ce travail ouvre un certain nombre de perspectives. Tout d'abord, il reste à compléter nos calculs pour tester notamment l'interaction résiduelle fournie par notre nouvelle paramétrisation D2. Pour cela, il faudrait implémenter cette paramétrisation dans les codes de calcul RPA, QRPA et de mélange de configurations. Ensuite, il est dans notre intention de tenter de généraliser la composante spin-orbite de l'interaction de Gogny en lui affectant une portée finie, comme nous l'avons fait pour le terme densité. Une autre orientation plus fondamentale de ce travail consisterait à tenter la construction d'une interaction effective en se basant sur les approches $V_{low k}$ et ainsi de faire le lien entre les interactions réalistes et effectives.

Annexe A

Matière Nucléaire Infinie Asymétrique

A.1 Fonctions d'onde

Avec $q = \pm\frac{1}{2}$ pour neutrons et protons :

$$\phi_{\vec{k},s,q}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{k}, s, q \rangle = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{\mathcal{V}}} \chi_{\frac{1}{2}}^s \chi_{\frac{1}{2}}^q \quad (\text{A.1})$$

Les $|\vec{k}, s, q\rangle$ étant orthonormées dans un volume arbitrairement grand \mathcal{V} :

$$\langle \phi_{\vec{k},s,q} | \phi_{\vec{k}',s',q'} \rangle = \delta(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{ss'} \delta_{qq'}$$

Les valeurs de \vec{k} sont quantifiées. A la limite d'un volume infini, on peut les considérer comme continues et remplacer les sommes discrètes par des intégrales :

$$\sum_{\vec{k}} \equiv \sum_{k_x k_y k_z} \rightarrow \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3k$$

A.2 Densité

Le moment de Fermi pour chaque type q de nucléon est noté k_F^q . La densité de nucléon de type q est :

$$\rho_q = \sum_s \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F^q} k^2 dk d\Omega \left| \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{\mathcal{V}}} \chi_{\frac{1}{2}}^s \chi_{\frac{1}{2}}^q \right|^2 = \frac{(k_F^q)^3}{3\pi^2} \quad (\text{A.2})$$

La densité totale est :

$$\rho = \rho_n + \rho_p = \frac{2k_F^3}{3\pi^2} \quad (\text{A.3})$$

avec :

$$k_F^3 = \frac{(k_F^n)^3 + (k_F^p)^3}{2} \quad (\text{A.4})$$

A.3 Paramètre d'asymétrie

On définit un paramètre \mathcal{X} d'asymétrie neutron-proton :

$$\mathcal{X} = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho_n + \rho_p} = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho} \quad \Rightarrow \quad \rho_n = \frac{1 + \mathcal{X}}{2}\rho \quad \text{et} \quad \rho_p = \frac{1 - \mathcal{X}}{2}\rho \quad (\text{A.5})$$

La matière nucléaire symétrique correspond à $\mathcal{X} = 0$ et la matière neutronique à $\mathcal{X} = 1$.

A.4 Energie

L'énergie totale est :

$$E = \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad \text{avec} \quad H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad (\text{A.6})$$

A.4.1 Energie cinétique

L'énergie cinétique totale est :

$$E_K = \sum_{sq} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F^q} k^2 dk d\Omega \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \sum_q \frac{3}{5} \cdot \frac{\hbar^2 (k_F^q)^2}{2m} \cdot \rho_q \mathcal{V} \quad (\text{A.7})$$

où $\rho_q \mathcal{V}$ représente le nombre de nucléons d'espèce q . Soit $A = \rho \mathcal{V}$ le nombre total de nucléons. L'énergie cinétique par nucléon s'écrit alors :

$$\frac{E_K}{A} = \sum_q \frac{3}{5} \cdot \frac{\hbar^2 (k_F^q)^2}{2m} \cdot \frac{\rho_q}{\rho} \quad \text{avec} \quad \frac{\rho_q}{\rho} = \frac{1 \pm \mathcal{X}}{2} \quad (\text{A.8})$$

A.4.2 Energie potentielle

Elle s'écrit :

$$E_P = \frac{1}{2} \sum_{s_1 s_2} \sum_{q_1 q_2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 s_1 q_1 \vec{k}_2 s_2 q_2 | V_{12} | \vec{k}_1 s_1 q_1 \vec{k}_2 s_2 q_2 \rangle \quad (\text{A.9})$$

où $|\widetilde{\dots}\rangle$ représente la fonction d'onde à deux nucléons antisymétrisée, et où les sommations sur \vec{k}_1 et \vec{k}_2 sont limitées aux sphères de rayons $k_F^{q_1}$ et $k_F^{q_2}$ respectivement. Pour calculer les éléments de matrice de l'interaction de Gogny, considérons la forme générale :

$$V_{12} = \sum_i e^{-\frac{(r_1 - r_2)^2}{\mu_i^2}} \cdot \underbrace{\frac{1}{2} [\rho^{\alpha_i}(r_1) + \rho^{\alpha_i}(r_2)]}_{V_i} \cdot (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau) \quad (\text{A.10})$$

où P_r , P_σ et P_τ sont les opérateurs d'échange des variables d'espace, de spin et d'isospin. Cette forme est capable de reproduire aussi bien le terme de portée finie (avec $\alpha_i = 0$) que le terme densité (avec $\mu_i \rightarrow 0$).

Dans la matière nucléaire saturée en spin, le terme Spin-Orbite ne contribue pas.

En écrivant $V_{12} |\widetilde{\dots}\rangle = V_{12}(1 - P_r P_\sigma P_\tau) |\dots\rangle$, les éléments de matrice de spin-isospin peuvent être alors séparés de ceux d'espace :

$$E_P = \frac{1}{2} \sum_{\dots} \sum_i \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle \langle s_1 s_2 q_1 q_2 | W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau | s_1 s_2 q_1 q_2 \rangle \\ + \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \langle s_1 s_2 q_1 q_2 | M_i + H_i P_\sigma - B_i P_\tau - W_i P_\sigma P_\tau | s_1 s_2 q_1 q_2 \rangle$$

où la première ligne représente la contribution à l'énergie du champ direct d'espace et la seconde celle du champ d'échange d'espace.

Les termes spin-isospin peuvent être évalués de 2 manières :

Directement

Puisque $\langle s_1 s_2 | P_\sigma | s_1 s_2 \rangle = \delta_{s_1 s_2}$ et $\langle q_1 q_2 | P_\tau | q_1 q_2 \rangle = \delta_{q_1 q_2}$, on obtient en sommant sur les spins :

$$E_P = \sum_{q_1 q_2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \sum_i \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle [2W_i + B_i - \delta_{q_1 q_2}(2H_i + M_i)] \\ + \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle [2M_i + H_i - \delta_{q_1 q_2}(2B_i + W_i)] \quad (\text{A.11})$$

En décomposant sur les sous-espaces ST

On peut recoupler deux nucléons au spin S et à l'isospin T à partir de la relation :

$$|s_1 s_2\rangle = \sum_{S m_S} \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_1 s_2 | S m_S \rangle |S m_S\rangle \quad (\text{A.12})$$

et *idem* pour l'isospin. Les états $S = 0$ sont impairs de spin et les états $S = 1$ sont pairs :

$$P_\sigma |S m_S\rangle = (-1)^{S+1} |S m_S\rangle$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} & \langle s_1 s_2 q_1 q_2 | W + BP_\sigma - HP_\tau - MP_\sigma P_\tau | s_1 s_2 q_1 q_2 \rangle = \\ & \sum_{S, m_S} \sum_{T, m_T} \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_1 s_2 | Sm_S \rangle \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} q_1 q_2 | Tm_T \rangle (W + B(-1)^{S+1} - H(-1)^{T+1} - M(-1)^{T+S}) \end{aligned}$$

En sommant sur s_1 et s_2 , les coefficients de Clebsch-Gordan en spin disparaissent ($\sum_{s_1 s_2} [\dots]^2 = 1$) et on obtient :

$$\begin{aligned} E_P &= \frac{1}{2} \sum_{q_1 q_2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \sum_i \sum_{S, m_S} \sum_{T, m_T} \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} q_1 q_2 | Tm_T \rangle^2 \times \\ & [\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle (W_i + B_i(-1)^{S+1} - H_i(-1)^{T+1} - M_i(-1)^{T+S}) \\ & + \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle (M_i + H_i(-1)^{S+1} - B_i(-1)^{T+1} - W_i(-1)^{T+S})] \end{aligned}$$

On pose :

$$\mathcal{L}_{q_1 q_2}^T = \frac{1}{2T+1} \sum_{m_T} \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} q_1 q_2 | Tm_T \rangle^2 \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{A}_i^{ST} = \frac{(2S+1)(2T+1)}{16\sqrt{\pi}} (W_i + B_i(-1)^{S+1} - H_i(-1)^{T+1} - M_i(-1)^{T+S})$$

$$\mathcal{B}_i^{ST} = - \frac{(2S+1)(2T+1)}{16\sqrt{\pi}} (M_i + H_i(-1)^{S+1} - B_i(-1)^{T+1} - W_i(-1)^{T+S}) = (-1)^{S+T} \mathcal{A}_i^{ST}$$

D'où :

$$E_P = 8\sqrt{\pi} \sum_{q_1 q_2} \sum_{S, T} \mathcal{L}_{q_1 q_2}^T \sum_i \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} [\mathcal{A}_i^{ST} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle - \mathcal{B}_i^{ST} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle] \quad (\text{A.14})$$

A.4.2.1 Éléments de matrice spatiaux

Ils sont de 2 types : éléments de matrice directs d'espace $\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle$ et d'échange d'espace $\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle$.

Terme direct

Avec $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ et $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$ et les fonctions d'onde (A.1) :

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle &= \frac{1}{\mathcal{V}^2} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}{\mu_i^2}} \cdot [\rho(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2})]^{\alpha_i} \\ &= \frac{\rho^{\alpha_i}}{\mathcal{V}^2} \int d^3 R \int d^3 r e^{-\frac{|\vec{r}|^2}{\mu_i^2}} \\ &= \frac{\rho^{\alpha_i}}{\mathcal{V}} (\mu_i \sqrt{\pi})^3 \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

qui est indépendant des moments \vec{k}_1 et \vec{k}_2 . Donc en sommant on obtient simplement :

$$\sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle = \frac{\mathcal{V} \rho^{\alpha_i} (\mu_i \sqrt{\pi})^3}{(2\pi)^6} \cdot \frac{4\pi (k_F^{q_1})^3}{3} \cdot \frac{4\pi (k_F^{q_2})^3}{3} \quad (\text{A.16})$$

Terme d'échange

De même :

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \frac{e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}}{\mathcal{V}^2} \cdot e^{-\frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}{\mu_i^2}} \cdot [\rho(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2})]^{\alpha_i} \\ &= \frac{\rho^{\alpha_i}}{\mathcal{V}^2} \int d^3 R \int d^3 r e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} \cdot e^{-\frac{|\vec{r}|^2}{\mu_i^2}} \\ &= \frac{\rho^{\alpha_i}}{\mathcal{V}} (\mu_i \sqrt{\pi})^3 e^{-\frac{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|^2 \mu_i^2}{4}} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

La somme sur \vec{k}_1 et \vec{k}_2 donne :

$$\sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V_i | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle = \frac{\mathcal{V} \rho^{\alpha_i} (\mu_i \sqrt{\pi})^3}{(2\pi)^6} \underbrace{\int_0^{k_F^{q_1}} d^3 k_1 \int_0^{k_F^{q_2}} d^3 k_2}_{I(X_i^{q_1}, X_i^{q_2})} e^{-\frac{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|^2 \mu_i^2}{4}} \quad (\text{A.18})$$

avec $X_i^q = \mu_i k_F^q$. Le calcul de la double intégrale se fait facilement. On obtient :

$$I(X_i^{q_1}, X_i^{q_2}) = \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{2}{\mu}\right)^6 F(X_i^{q_1}, X_i^{q_2}) \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned} \text{avec } F(X, Y) &= e^{-\left(\frac{X+Y}{2}\right)^2} (X^2 + Y^2 - XY - 2) \\ &- e^{-\left(\frac{X-Y}{2}\right)^2} (X^2 + Y^2 + XY - 2) \\ &+ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{Erf}\left(\frac{X+Y}{2}\right) (X^3 + Y^3) - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{Erf}\left(\frac{X-Y}{2}\right) (X^3 - Y^3) \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

et $\text{Erf}(X) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^X e^{-u^2} du$.

A.4.2.2 Energie potentielle

Il est commode d'introduire la quantité sans dimension $X_i = \mu_i k_F$ où k_F est le moment de Fermi total tel qu'on l'a défini avec l'équation (A.3). Le volume arbitrairement grand peut ainsi s'exprimer $\mathcal{V} = \frac{A}{\rho} = A \cdot \frac{3\pi^2 \mu_i^3}{2X_i^3}$. En reportant dans (A.14) les termes direct et échange d'espace et en utilisant ces notations, on obtient finalement l'énergie potentielle par nucléon sous la forme :

$$\frac{E_P^\mu}{A} = 2 \sum_{S,T} \sum_i \frac{\rho^{\alpha_i}}{X_i^3} \sum_{q_1 q_2} \mathcal{L}_{q_1 q_2}^T \left[\mathcal{A}_i^{ST} \frac{(X_i^{q_1} X_i^{q_2})^3}{6} - \mathcal{B}_i^{ST} F(X_i^{q_1}, X_i^{q_2}) \right] \quad (\text{A.21})$$

Le calcul des $\mathcal{L}_{q_1 q_2}^T$ de l'éq. (A.13) est immédiat. On a : $\mathcal{L}_{-qq}^T = \frac{1}{2(2T+1)}$ et $\mathcal{L}_{qq}^T = \frac{T}{3} = \frac{T}{2T+1}$ car $T^2 = T$. On peut ainsi effectuer les sommations sur q_1 et q_2 , ce qui donne :

$$\frac{E_P^\mu}{A} = 2 \sum_{S,T} \frac{1}{2T+1} \sum_i \frac{\rho^{\alpha_i}}{X_i^3} \left[\frac{\mathcal{A}_i^{ST}}{6} \left(T \cdot (X_i^P)^6 + T \cdot (X_i^N)^6 + (X_i^P X_i^N)^3 \right) \right. \quad (\text{A.22}) \\ \left. - \mathcal{B}_i^{ST} \left(T \cdot F(X_i^P, X_i^P) + T \cdot F(X_i^N, X_i^N) + F(X_i^P, X_i^N) \right) \right]$$

On peut aussi effectuer les sommes sur S et T et factoriser les quantités :

$$\mathcal{A}_i = \sum_{S,T} \mathcal{A}_i^{ST} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(2W_i + B_i - H_i - \frac{M_i}{2} \right) \quad \mathcal{A}'_i = \sum_{S,T} \frac{\mathcal{A}_i^{ST}}{2T+1} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(W_i + \frac{B_i}{2} \right) \\ \mathcal{B}_i = \sum_{S,T} \mathcal{B}_i^{ST} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{W_i}{2} + B_i - H_i - 2M_i \right) \quad \mathcal{B}'_i = \sum_{S,T} \frac{\mathcal{B}_i^{ST}}{2T+1} = \frac{-1}{2\sqrt{\pi}} \left(M_i + \frac{H_i}{2} \right)$$

et l'on obtient :

$$\frac{E_P^\mu}{A} = \sum_i \frac{\rho^{\alpha_i}}{X_i^3} \left[\frac{\mathcal{A}_i}{6} \left((X_i^P)^6 + (X_i^N)^6 \right) - \frac{\mathcal{A}'_i}{6} \left((X_i^P)^3 - (X_i^N)^3 \right)^2 \right. \quad (\text{A.23}) \\ \left. + (\mathcal{B}'_i - \mathcal{B}_i) \left(F(X_i^P, X_i^P) + F(X_i^N, X_i^N) \right) - 2\mathcal{B}'_i F(X_i^P, X_i^N) \right]$$

A.4.2.3 Terme de portée nulle

Pour un terme potentiel de portée nulle tel que le terme densité de l'interaction de Gogny il faut prendre la limite $\mu_i \rightarrow 0$. On peut aussi faire le calcul directement. Les termes spatiaux direct et échange sont égaux :

$$\langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle = \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle = \frac{\rho^\alpha}{\mathcal{V}} \\ \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle = \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle = \frac{\mathcal{V} \rho^\alpha}{(2\pi)^6} \cdot \frac{4\pi(k_F^{q_1})^3}{3} \cdot \frac{4\pi(k_F^{q_2})^3}{3}$$

La contribution à l'énergie potentielle d'un terme de portée nulle (noté E_P^0) vaut alors :

$$\frac{E_P^0}{A} = \frac{1}{3\pi\sqrt{\pi}} \sum_{S,T} \frac{1}{2T+1} \frac{\rho^\alpha}{k_F^3} (\mathcal{A}^{ST} - \mathcal{B}^{ST}) \left(T \cdot (k_F^P)^6 + T \cdot (k_F^N)^6 + (k_F^P k_F^N)^3 \right) \quad (\text{A.24})$$

En utilisant le fait que $\mathcal{B}^{ST} = (-1)^{S+T} \mathcal{A}^{ST}$, et en explicitant les \mathcal{A}^{ST} non nuls, on obtient :

$$\frac{E_P^0}{A} = \frac{2}{9\pi\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\rho^\alpha}{k_F^3} \left[\mathcal{A}^{01} \left((k_F^P)^6 + (k_F^N)^6 \right) + (3\mathcal{A}^{10} + \mathcal{A}^{01}) (k_F^P k_F^N)^3 \right] \\ = \frac{1}{24\pi^2} \cdot \frac{\rho^\alpha}{k_F^3} \left[(W - B - H + M) \left((k_F^P)^6 + (k_F^N)^6 \right) + (4W + 2B + 2H + 4M) (k_F^P k_F^N)^3 \right] \quad (\text{A.25})$$

A.4.2.4 Cas particuliers

En utilisant les valeurs particulières suivantes de la fonction F définie à l'équation (A.20) :

$$\begin{aligned} F(X_i, X_i) &= e^{-X_i^2}(X_i^2 - 2) - 3X_i^2 + 2 + \sqrt{\pi} \operatorname{Erf}(X_i)X_i^3 \\ F(0, 0) &= F(0, X_i) = F(X_i, 0) = 0 \end{aligned}$$

l'énergie potentielle (A.22) s'écrit facilement dans les cas de la matière nucléaire symétrique et de la matière neutronique. On obtient :

Matière symétrique

La matière nucléaire symétrique est définie par $\chi = 0$, $k_F^P = k_F^N = k_F$. Les contributions cinétique, potentielle et de portée nulle précédemment calculées (eqs. (A.8), (A.22) et (A.25)) deviennent :

$$\frac{E_K^S}{A} = \frac{3}{5} \cdot \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (\text{A.26})$$

$$\begin{aligned} \frac{(E_P^\mu)^S}{A} &= 2 \sum_i \rho^{\alpha_i} \sum_{S,T} \left[\mathcal{A}_i^{ST} \frac{X_i^3}{6} - \mathcal{B}_i^{ST} \frac{F(X_i, X_i)}{X_i^3} \right] \\ &= 2 \sum_i \rho^{\alpha_i} \sum_{S,T} \left[\mathcal{A}_i^{ST} \frac{X_i^3}{6} - \mathcal{B}_i^{ST} \left(e^{-X_i^2} \left(\frac{1}{X_i} - \frac{2}{X_i^3} \right) - \frac{3}{X_i} + \frac{2}{X_i^3} + \sqrt{\pi} \operatorname{Erf}(X_i) \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

$$\frac{(E_P^0)^S}{A} = \frac{3}{8} (W + M) \rho^{\alpha+1} \quad (\text{A.28})$$

Remarque : Dans l'interaction D1S de Gogny, le terme densité (E_P^0) est tel que $H = M = 0$, $W = t_0$ et $B = x_0 t_0$, et les deux termes de portée finie (E_P^μ) ne dépendent pas de la densité ($\alpha_i = 0$). On retrouve alors à des coefficients près la formule de l'article de Dechargé-Gogny [8] (les coefficients sont inexacts dans l'article).

Matière neutronique

La matière neutronique est définie par $\chi = 1$, $k_F^P = 0$ et $(k_F^N)^3 = 2.k_F^3$. Les contributions cinétique, potentielle et de portée nulle précédemment calculées (eqs. (A.8), (A.22) et (A.25)) deviennent :

$$\frac{E_K^N}{A} = \frac{3}{5} \cdot \frac{\hbar^2 (k_F^N)^2}{2m} \quad (\text{A.29})$$

$$\frac{(E_P^\mu)^N}{A} = 4 \sum_i \rho^{\alpha_i} \sum_{S,T} \frac{T}{2T+1} \left[\mathcal{A}_i^{ST} \frac{(X_i^N)^3}{6} - \mathcal{B}_i^{ST} \frac{F(X_i^N, X_i^N)}{(X_i^N)^3} \right] \quad (\text{A.30})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_i \rho^{\alpha_i} \left[(2W_i + B_i - 2H_i - M_i) \frac{(X_i^N)^3}{6} + (2M_i + H_i - 2B_i - W_i) \frac{F(X_i^N, X_i^N)}{(X_i^N)^3} \right] \\ \frac{(E_P^0)^N}{A} &= \frac{1}{4} (W - B - H + M) \rho^{\alpha+1} \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Dans le cas d'une interaction de portée finie, l'énergie totale E/A de la matière neutronique s'exprime donc comme une fonction f de la densité de matière ρ et des combinaisons de paramètres $(2W_i + B_i - 2H_i - M_i)$ et $(2M_i + H_i - 2B_i - W_i)$ associées aux différentes portées μ_i ($i = 1, 2, \dots$) de l'interaction :

$$\begin{aligned} \frac{E}{A} &= \frac{E_K^N}{A} + \frac{(E_P^\mu)^N}{A} \\ &\equiv f \left[\rho, \{(2W_i + B_i - 2H_i - M_i), (2M_i + H_i - 2B_i - W_i), \mu_i\}_{i=1,2,\dots} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

En développant $F(x, x)$ jusqu'à l'ordre 8, on trouve :

$$F(x, x) = \frac{x^6}{6} - \frac{x^8}{20} + \dots \quad (\text{A.33})$$

Donc les termes direct et échange de (A.30) donnent des contributions de même ordre $(k_F^N)^3 \simeq \rho_n$ à la limite $\rho_n \rightarrow 0$.

A.5 Incompressibilité

L'incompressibilité K_∞ de la matière nucléaire correspond à la réponse de l'énergie à une variation de densité, autour d'un minimum d'énergie. Pour la matière nucléaire symétrique, elle est définie par :

$$K_\infty = 9\rho^2 \left. \frac{\partial^2 E/A}{\partial \rho^2} \right|_{\rho_0} = k_F^2 \left. \frac{\partial^2 E/A}{\partial k_F^2} \right|_{k_F^0}$$

Cette égalité n'est exacte que dans la mesure où $\rho = \frac{2k_F^3}{3\pi^2}$ et si les dérivées premières de l'énergie par rapport à ces paramètres sont nulles $\left(\frac{\partial E/A}{\partial \rho} = \frac{\partial E/A}{\partial k_F} = 0 \right)$. Cette définition reste donc valable pour la matière nucléaire asymétrique, tant qu'elle possède un minimum de stabilité et uniquement en ce point. L'application des deux formules donnera des résultats analytiques très différents, mais numériquement identiques. J'ai choisi de calculer la compressibilité en dérivant par rapport au moment de Fermi k_F . Effectuons ce calcul terme après terme.

Contribution du terme cinétique

Il suffit de dériver l'énergie cinétique (A.8) en se rappelant que $k_F^q = k_F(1 \pm \mathcal{X})^{\frac{1}{3}}$. On obtient :

$$k_F^2 \left. \frac{\partial^2 E_K/A}{\partial k_F^2} \right|_{k_F^0} = 2 \left. \frac{E_K}{A} \right|_{k_F^0}$$

Contribution d'un terme densité de portée nulle

De même, on dérive l'expression (A.25) pour obtenir :

$$k_F^2 \left. \frac{\partial^2 E_P^0/A}{\partial k_F^2} \right|_{k_F^0} = 3(\alpha + 1)(3\alpha + 2) \left. \frac{E_P^0}{A} \right|_{k_F^0}$$

Contribution de termes de portée finie

Les calculs se font sur le même principe. Je ne les ai menés à terme que pour le cas de la matière symétrique. On obtient :

$$\begin{aligned}
k_F^2 \left. \frac{\partial^2 (E_P^\mu)^S / A}{\partial k_F^2} \right|_{k_F^0} &= 2 \sum_i \left\{ \rho^{\alpha_i} \left[\mathcal{A}_i X_i^3 + 6 \mathcal{B}_i \left(e^{-X_i^2} \left(X_i + \frac{3}{X_i} + \frac{4}{X_i^3} \right) + \frac{1}{X_i} - \frac{4}{X_i^3} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + 6 \alpha_i \rho^{\alpha_i} \left[\mathcal{A}_i \frac{X_i^3}{2} - 3 \mathcal{B}_i \left(e^{-X_i^2} \left(\frac{1}{X_i} + \frac{2}{X_i^3} \right) + \frac{1}{X_i} - \frac{2}{X_i^3} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + \alpha_i \rho^{\alpha_i} 3(3\alpha_i - 1) \left[\mathcal{A}_i \frac{X_i^3}{6} - \mathcal{B}_i \left(e^{-X_i^2} \left(\frac{1}{X_i} - \frac{2}{X_i^3} \right) - \frac{3}{X_i} + \frac{2}{X_i^3} + \sqrt{\pi} \operatorname{Erf}(X_i) \right) \right] \right\}
\end{aligned}$$

A.6 Energie de symétrie

Par analogie avec les formules empiriques de masse, on peut définir une énergie de symétrie de la manière suivante :

$$E_{sym} = \frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 E/A}{\partial \mathcal{X}^2} \right|_{\mathcal{X}=0}. \quad (\text{A.34})$$

Les dérivées se calculent à densité constante, et on les évalue autour de la matière symétrique ($\mathcal{X} = 0$). Nous allons mener ce calcul terme après terme.

Contribution du terme cinétique

Il suffit de dériver l'énergie cinétique (A.8) conformément à (A.34) :

$$\frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 E_K/A}{\partial \mathcal{X}^2} \right|_{\mathcal{X}=0} = \frac{1}{3} \cdot \frac{\hbar^2 (k_F^q)^2}{2m} = \frac{5}{9} \cdot \frac{E_K^S}{A},$$

où E_K^S/A est la contribution cinétique à l'énergie de la matière nucléaire symétrique.

Contribution d'un terme densité de portée nulle

Pour dériver l'expression (A.25), il est intéressant de remarquer les relations :

$$(k_F^N k_F^P)^3 = (1 - \mathcal{X}^2) k_F^6 \quad \text{et} \quad (k_F^P)^6 + (k_F^N)^6 = 2k_F^6 (1 + \mathcal{X}^2).$$

On obtient :

$$\frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 E_P^0/A}{\partial \mathcal{X}^2} \right|_{\mathcal{X}=0} = -\frac{\rho^{\alpha+1}}{8} (W + 2B + 2H + M).$$

Contribution de termes de portée finie

Il s'agit maintenant de dériver l'expression (A.23) de l'énergie potentielle. Nous allons le faire en considérant successivement les termes en facteur des quantités \mathcal{A}_i , \mathcal{A}'_i , \mathcal{B}_i et \mathcal{B}'_i définies en (A.23). On note ces termes \mathcal{P}_i , \mathcal{P}'_i , \mathcal{Q}_i et \mathcal{Q}'_i , de sorte que :

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 E_P^\mu / A}{\partial \mathcal{X}^2} \Big|_{\mathcal{X}=0} = \sum_i (\mathcal{P}_i \cdot \mathcal{A}_i + \mathcal{P}'_i \cdot \mathcal{A}'_i + \mathcal{Q}_i \cdot \mathcal{B}_i + \mathcal{Q}'_i \cdot \mathcal{B}'_i).$$

Les coefficients $\mathcal{P}_i^{(q)}$ et $\mathcal{Q}_i^{(q)}$ s'obtiennent à partir de l'expression (A.23) en dérivant les quantités adimensionnées $X_i^q = \mu_i k_F^q$ par rapport à l'asymétrie \mathcal{X} :

$$\frac{\partial X_i^P}{\partial \mathcal{X}} = -\frac{1}{3} \frac{X_i^3}{(X_i^P)^2} \qquad \frac{\partial X_i^N}{\partial \mathcal{X}} = \frac{1}{3} \frac{X_i^3}{(X_i^N)^2}.$$

Pour \mathcal{P}_i et \mathcal{P}'_i , les calculs sont simples et on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_i &= \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{X}^2} \left[\frac{\rho^{\alpha_i}}{6X_i^3} ((X_i^P)^6 + (X_i^N)^6) \right]_{\mathcal{X}=0} = \rho^{\alpha_i} \frac{X_i^3}{3}, \\ \mathcal{P}'_i &= \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{X}^2} \left[\frac{-\rho^{\alpha_i}}{6X_i^3} ((X_i^P)^3 - (X_i^N)^3)^2 \right]_{\mathcal{X}=0} = -\rho^{\alpha_i} \frac{2X_i^3}{3}. \end{aligned}$$

Les calculs de \mathcal{Q}_i et \mathcal{Q}'_i sont plus fastidieux. Les dérivées des fonctions $F(X_i^P, X_i^P)$, $F(X_i^N, X_i^N)$ et $F(X_i^P, X_i^N)$ sont longues à calculer. Leur évaluation en $\mathcal{X} = 0$ ($X_i = X_i^P = X_i^N$) donne toutefois des résultats assez simples et on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_i &= \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{X}^2} \left[\frac{-\rho^{\alpha_i}}{X_i^3} (F(X_i^P, X_i^P) + F(X_i^N, X_i^N)) \right]_{\mathcal{X}=0} \\ &= \frac{2}{3} \left(\left(\frac{1}{X_i} + X_i \right) e^{-X_i^2} - \frac{1}{X_i} \right) \rho^{\alpha_i}, \\ \mathcal{Q}'_i &= \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{X}^2} \left[\frac{\rho^{\alpha_i}}{X_i^3} (F(X_i^P, X_i^P) - 2F(X_i^P, X_i^N) + F(X_i^N, X_i^N)) \right]_{\mathcal{X}=0} \\ &= \frac{2X_i}{3} (1 - e^{-X_i^2}) \rho^{\alpha_i}. \end{aligned}$$

La contribution des termes de portée finie à l'énergie de symétrie s'écrit finalement :

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 E_P^\mu / A}{\partial \mathcal{X}^2} \Big|_{\mathcal{X}=0} = \sum_i \frac{\rho^{\alpha_i}}{3} \left[X_i^3 (\mathcal{A}_i - 2\mathcal{A}'_i) + 2\mathcal{B}_i \left(\left(\frac{1}{X_i} + X_i \right) e^{-X_i^2} - \frac{1}{X_i} \right) + 2\mathcal{B}'_i X_i (1 - e^{-X_i^2}) \right].$$

A.7 Masse effective

Dans la matière nucléaire infinie, les énergies à une particule pour les protons ($q = P$) et pour les neutrons ($q = N$) s'écrivent

$$\varepsilon_q(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Gamma_q(k) + \partial\Gamma$$

avec $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ l'énergie cinétique, $\Gamma_q(k)$ et $\partial\Gamma$ les champs Hartree-Fock et de réarrangement.

Par définition, les masses effectives protons et neutrons sont telles que

$$\frac{1}{m_q^*} = \frac{1}{\hbar^2 k} \left. \frac{d\varepsilon_q(k)}{dk} \right|_{k=k_{Fq}} = \frac{1}{m} + \frac{1}{\hbar^2 k} \left. \frac{d\Gamma_q(k)}{dk} \right|_{k=k_{Fq}}.$$

Donc :

$$\frac{m}{m_q^*} = 1 + \frac{m}{\hbar^2 k_{Fq}} \frac{d\Gamma_q}{dk}(k_{Fq}). \quad (\text{A.35})$$

Le champ de réarrangement $\partial\Gamma$ ne dépend pas de l'impulsion k , aussi il n'intervient pas dans l'expression de la masse effective.

Avec l'interaction (A.10), le champ Hartree-Fock prend la forme développée suivante

$$\begin{aligned} \Gamma_q(k) = 4 \sum_i \rho^{\alpha_i} \sum_{ST} \sum_{q'} \frac{1}{2T+1} (\delta_{qq'}(2T-1) + 1) \left[\frac{\mathcal{A}_i^{ST}}{6} (\mu_i k_{Fq'})^3 \right. \\ \left. + \mathcal{B}_i^{ST} \left(g_{\mu_i k} \left(\mu_i \frac{k - k_{Fq'}}{2} \right) - g_{\mu_i k} \left(\mu_i \frac{k + k_{Fq'}}{2} \right) \right) \right] \end{aligned}$$

avec $g_y(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{Erf}(x) + \frac{1}{y} e^{-x^2}$.

L'expression (A.35) de la masse effective peut alors être explicitée pour obtenir

$$\left(\frac{m_q^*}{m} \right)^{-1} = 1 - \frac{4m}{\hbar^2} \sum_i \mu_i^2 \rho^{\alpha_i} \sum_{ST} \frac{1}{2T+1} \mathcal{B}_i^{ST} \frac{1}{(X_i^q)^3} (2T f_i(q, q) + f_i(q, -q)) \quad (\text{A.36})$$

avec $f_i(q, q') = \left(1 - \frac{X_i^q X_i^{q'}}{2} \right) e^{-\left(\frac{X_i^q - X_i^{q'}}{2} \right)^2} - \left(1 + \frac{X_i^q X_i^{q'}}{2} \right) e^{-\left(\frac{X_i^q + X_i^{q'}}{2} \right)^2}$.

Annexe B

Eléments de matrice, Energies des états à une particule, Energie de liaison totale, Approximation Hartree-Fock restreint

Dans cette annexe, trois types d'interaction seront considérés,

$$\begin{aligned}v_{12}^{(1)} &= (W + BP_\sigma - HP_\tau - MP_\sigma P_\tau) e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2/p^2} \\v_{12}^{(2)} &= t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \\v_{12}^{(3)} &= (W + BP_\sigma - HP_\tau - MP_\sigma P_\tau) e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2/p^2} \frac{1}{2} (\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)) .\end{aligned}$$

Nous allons développer les expressions des éléments de matrice de ces différentes interactions dans la représentation de l'oscillateur harmonique (OH) sphérique. Nous en déduisons ensuite les expressions du champ moyen et de l'énergie à l'approximation Hartree-Fock-Restreint (HFR).

B.1 Rappels sur la représentation de l'OH sphérique

On note $|a\rangle$ les états de l'OH sphérique avec :

$$a = (\alpha_a, r_a), \quad \alpha_a = (q_a, s_a), \quad r_a = (n_a, l_a, m_a) \quad (\text{B.1})$$

où q_a et s_a sont les projections de l'isospin et du spin. Ils sont états propres de l^2 et l_z avec les valeurs propres $l_a(l_a + 1)$ et m_a , respectivement. Le nombre quantique supplémentaire n_a permet de distinguer les états caractérisés par les mêmes valeurs de q_a , s_a , l_a , et m_a .

Les fonctions d'onde de l'OH sphérique seront notées :

$$\Phi_a(\vec{r}, \sigma, \tau) = \phi_{r_a}(\vec{r}) \chi_{s_a}(\sigma) \chi_{q_a}(\tau) \quad (\text{B.2})$$

où les χ sont les spineurs à deux dimensions habituels. Les fonctions d'onde spatiales ϕ_{r_a} sont définies comme

$$\phi_{r_a}(\vec{r}) = \left(\frac{2}{b^3}\right)^{1/2} \left(\frac{\Gamma(n_a + 1)}{\Gamma(n_a + l_a + 3/2)}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\frac{r^2}{b^2}} \left(\frac{r}{b}\right)^{l_a} L_{n_a}^{l_a + \frac{1}{2}}\left(\frac{r^2}{b^2}\right) Y_{l_a}^{m_a}(\hat{r}),$$

où $L_{n_a}^{l_a + \frac{1}{2}}$ sont les polynômes de Laguerre et b est la longueur d'oscillateur : $b = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Enfin, les $Y_{l_a}^{m_a}$ représentent les harmoniques sphériques qui déterminent la dépendance angulaire des fonctions d'onde. Pour s'affranchir de cette dépendance, on définira d'ailleurs les fonctions d'onde radiales $\phi_{(r_a)}(r) \equiv \phi_{r_a}(\vec{r})/Y_{l_a}^{m_a}(\hat{r})$ avec $(r_a) = (n_a, l_a)$.

D. Gogny a montré [127] que le produit de deux fonctions d'onde de l'Oscillateur Harmonique peut être développé selon la relation,

$$\phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_c}(\vec{r}) = \sum_{r_\mu} T_{(r_a)(r_c)}^{(r_\mu)} \langle l_a m_a | Y_{l_\mu}^{m_\mu *} | l_c m_c \rangle \phi_0(\vec{r}) \phi_{r_\mu}(\vec{r}). \quad (\text{B.3})$$

B.2 Eléments de matrice de l'interaction

Les trois types d'interaction explicités au début de cette annexe, $v_{12}^{(i)}$ ($i = 1, 2, 3$), peuvent chacun être décomposés en une composante d'espace $G^{(i)}$ et une composante de spin-isospin $W_{SI}^{(i)}$,

$$v_{12}^{(1)} = W_{SI}^{(1)} G^{(1)}, \quad v_{12}^{(2)} = W_{SI}^{(2)} G^{(2)}, \quad v_{12}^{(3)} = W_{SI}^{(3)} G^{(3)},$$

$$\begin{aligned} \text{avec : } W_{SI}^{(1)} &= W + BP_\sigma - HP_\tau - MP_\sigma P_\tau & G^{(1)} &= e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2/p^2} \\ W_{SI}^{(2)} &= t_0(1 + x_0 P_\sigma) & G^{(2)} &= \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right) \\ W_{SI}^{(3)} &= W_{SI}^{(1)} & G^{(3)} &= e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2/p^2} \frac{1}{2} (\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)). \end{aligned}$$

Les éléments de matrice de l'interaction peuvent ainsi être séparés en deux composantes, une d'espace et une de spin-isospin,

$$\langle a \ b | v_{12}^{(i)} | c \ d \rangle = \langle \alpha_a \ \alpha_b | W_{SI}^{(i)} | \alpha_c \ \alpha_d \rangle \langle r_a \ r_b | G^{(i)} | r_c \ r_d \rangle.$$

B.2.1 Composante d'espace $\langle r_a \ r_b | G^{(i)} | r_c \ r_d \rangle$

Cet élément de matrice se calcule comme l'intégrale sur les positions des deux nucléons, \vec{r}_1 et \vec{r}_2 ,

$$\langle r_a \ r_b | G^{(i)} | r_c \ r_d \rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 \phi_{r_a}^*(\vec{r}_1) \phi_{r_b}^*(\vec{r}_2) G^{(i)} \phi_{r_c}(\vec{r}_1) \phi_{r_d}(\vec{r}_2). \quad (\text{B.4})$$

B.2.1.1 Cas $G^{(i)} = G^{(1)}$

Dans ce cas, l'intégrale (B.4) se calcule en utilisant le développement (B.3) du produit de deux fonctions d'onde,

$$\langle r_a r_b | G^{(1)} | r_c r_d \rangle = \sum_{r_\mu, r_\nu} T_{(r_a)(r_c)}^{(r_\mu)} T_{(r_b)(r_d)}^{(r_\nu)} \langle l_a m_a | Y_{l_\mu}^{m_\mu *} | l_c m_c \rangle \langle l_b m_b | Y_{l_\nu}^{m_\nu *} | l_d m_d \rangle \langle 00 | G^{(1)} | r_\mu r_\nu \rangle,$$

avec :

$$\langle 00 | G^{(1)} | r_\mu r_\nu \rangle = \int d^3 r_1 d^3 r_2 \phi_0(\vec{r}_1) \phi_{r_\mu}(\vec{r}_1) e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2/p^2} \phi_0(\vec{r}_2) \phi_{r_\nu}(\vec{r}_2). \quad (\text{B.5})$$

On applique maintenant la relation de Moshinsky :

$$\phi_{r_\mu}(\vec{r}_1) \phi_{r_\nu}(\vec{r}_2) = \sum_{r_\lambda r_\sigma} M_{r_\mu r_\nu, r_\lambda r_\sigma} \phi_{r_\lambda}(\vec{r}) \phi_{r_\sigma}(\vec{R}) \quad \text{avec } \vec{r} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{\sqrt{2}}, \quad \vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{\sqrt{2}} \quad (\text{B.6})$$

aux produits de fonctions d'onde d'arguments \vec{r}_1 et \vec{r}_2 dans (B.5) :

$$\langle 00 | G^{(1)} | r_\mu r_\nu \rangle = \sum_{r_\lambda r_\sigma} M_{r_\mu r_\nu, r_\lambda r_\sigma} \int d^3 r \int d^3 R \phi_0(\vec{r}) \phi_0(\vec{R}) e^{-2r^2/p^2} \phi_{r_\lambda}(\vec{r}) \phi_{r_\sigma}(\vec{R}) \quad (\text{B.7})$$

car $M_{00, r_\lambda r_\sigma} = \delta_{r_\lambda, 0} \delta_{r_\sigma, 0}$ et le Jacobien du changement de variables vaut 1. Ainsi :

$$\langle 00 | G^{(1)} | r_\mu r_\nu \rangle = \sum_{r_\lambda} M_{r_\mu r_\nu, r_\lambda 0} \int d^3 r \phi_0(\vec{r}) e^{-2r^2/p^2} \phi_{r_\lambda}(\vec{r}) \equiv \sum_{r_\lambda} M_{r_\mu r_\nu, r_\lambda 0} K_{r_\lambda} \quad (\text{B.8})$$

L'intégrale K_{r_λ} s'effectue facilement, on trouve

$$K_{r_\lambda} = \delta_{l_\lambda, 0} \delta_{m_\lambda, 0} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(n_\lambda + 3/2)}{n_\lambda!} \right)^{1/2} n_\lambda! \sum_{i=0}^{n_\lambda} \frac{(-)^i G^{-i-3/2}}{i! (n_\lambda - i)!}, \quad \text{avec } G = 1 + 2b^2/p^2.$$

Dans les cas particuliers des états 1S, $r_a = r_b = r_c = r_d = (0, 0, 0)$, et des états 2S, $r_a = r_b = r_c = r_d = (1, 0, 0)$, on trouve,

$$\begin{aligned} f^{1s} &\equiv \langle 000 \ 000 | G^{(1)} | 000 \ 000 \rangle \\ &= G^{-3/2} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{aligned} f^{2s} &\equiv \langle 100 \ 100 | G^{(1)} | 100 \ 100 \rangle \\ &= G^{-3/2} \left(\frac{41}{64} - \frac{79}{48} G^{-1} + \frac{385}{96} G^{-2} - \frac{175}{48} G^{-3} + \frac{105}{64} G^{-4} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

B.2.1.2 Cas $G^{(i)} = G^{(2)}$

L'intégrale (B.4) se réduit alors à l'expression simple suivante,

$$\langle r_a r_b | G^{(2)} | r_c r_d \rangle = \int d^3 r \phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_b}^*(\vec{r}) \rho^\alpha(\vec{r}) \phi_{r_c}(\vec{r}) \phi_{r_d}(\vec{r}).$$

L'intégrale ne porte alors que sur un seul vecteur position, ici \vec{r} , car l'interaction $G^{(2)}$ est de contact. Comme elle dépend de la densité ρ du noyau, cette intégrale doit être calculée numériquement.

B.2.1.3 Cas $G^{(i)} = G^{(3)}$

Dans ce dernier cas, l'intégrale (B.4) peut être simplifiée en utilisant le développement (B.3) du produit de deux fonctions d'onde,

$$\langle r_a r_b | G^{(3)} | r_c r_d \rangle = \sum_{r_\mu, r_\nu} T_{(r_a)(r_c)}^{(r_\mu)} T_{(r_b)(r_d)}^{(r_\nu)} \langle l_a m_a | Y_{l_\mu}^{m_\mu *} | l_c m_c \rangle \langle l_b m_b | Y_{l_\nu}^{m_\nu *} | l_d m_d \rangle \langle 00 | G^{(3)} | r_\mu r_\nu \rangle,$$

avec :

$$\begin{aligned} \langle 00 | G^{(3)} | r_\mu r_\nu \rangle &= \frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \phi_0(\vec{r}_1) \phi_{r_\mu}(\vec{r}_1) e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / p^2} \rho^\alpha(\vec{r}_1) \phi_0(\vec{r}_2) \phi_{r_\nu}(\vec{r}_2) \\ &+ \frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \phi_0(\vec{r}_1) \phi_{r_\mu}(\vec{r}_1) e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / p^2} \rho^\alpha(\vec{r}_2) \phi_0(\vec{r}_2) \phi_{r_\nu}(\vec{r}_2) \\ &= J_{r_\mu r_\nu} + J_{r_\nu r_\mu}. \end{aligned}$$

Pour calculer l'intégrale

$$J_{r_\mu r_\nu} \equiv \frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \phi_0(\vec{r}_1) \phi_{r_\mu}(\vec{r}_1) e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / p^2} \rho^\alpha(\vec{r}_1) \phi_0(\vec{r}_2) \phi_{r_\nu}(\vec{r}_2),$$

on utilise l'égalité suivante

$$\int d^3 r_2 e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / p^2} \phi_0(\vec{r}_2) \phi_{r_\nu}(\vec{r}_2) = K^{3/2} \lambda_{(r_\nu)} e^{-\frac{1}{2} \frac{r_1^2}{b^2 g}} \phi_{r_\nu}(\vec{r}_1, b\sqrt{g}),$$

avec $g = 1 + \frac{p^2}{b^2}$, $K = \sqrt{\pi} b \frac{g-1}{\sqrt{g}}$, $\lambda_{(r_\nu)} = g^{-n_\nu - l_\nu / 2}$. On obtient alors,

$$J_{r_\mu r_\nu} = \frac{1}{2} K^{3/2} \lambda_{(r_\nu)} \int d^3 r_1 \phi_0(\vec{r}_1) \phi_{r_\mu}(\vec{r}_1) \rho^\alpha(\vec{r}_1) e^{-\frac{1}{2} \frac{r_1^2}{b^2 g}} \phi_{r_\nu}(\vec{r}_1, b\sqrt{g}).$$

Ces formules appliquées aux états 1S et 2S permettent de calculer les fonctions g^{1s} et g^{2s} définies comme

$$g^{1s} \equiv \langle 000 \ 000 | G^{(3)} | 000 \ 000 \rangle, \quad (\text{B.11})$$

$$g^{2s} \equiv \langle 100 \ 100 | G^{(3)} | 100 \ 100 \rangle. \quad (\text{B.12})$$

B.2.2 Composante de spin-isospin $\langle \alpha_a \ \alpha_b | W_{SI}^{(i)} | \alpha_c \ \alpha_d \rangle$

En explicitant les variables d'isospin q et de spin s , cette composante s'écrit

$$\langle \alpha_a \ \alpha_b | W_{SI}^{(i)} | \alpha_c \ \alpha_d \rangle = \langle q_a s_a \ q_b s_b | W_{SI}^{(i)} | q_c s_c \ q_d s_d \rangle,$$

et nous allons l'évaluer dans les différents cas, $W_{SI}^{(i)} = W_{SI}^{(1)} = W_{SI}^{(3)}$ et $W_{SI}^{(i)} = W_{SI}^{(2)}$.

B.2.2.1 Cas $W_{SI}^{(i)} = W_{SI}^{(1)} = W_{SI}^{(3)}$

$$\langle \alpha_a \alpha_b | W_{SI}^{(1,3)} | \alpha_c \alpha_d \rangle = (W \delta_{s_a s_c} \delta_{s_b s_d} + B \delta_{s_a s_d} \delta_{s_b s_c}) \delta_{q_a q_c} \delta_{q_b q_d} - (H \delta_{s_a s_c} \delta_{s_b s_d} + M \delta_{s_a s_d} \delta_{s_b s_c}) \delta_{q_a q_d} \delta_{q_b q_c}$$

B.2.2.2 Cas $W_{SI}^{(i)} = W_{SI}^{(2)}$

$$\langle \alpha_a \alpha_b | W_{SI}^{(2)} | \alpha_c \alpha_d \rangle = t_0 (\delta_{s_a s_c} \delta_{s_b s_d} + x_0 \delta_{s_a s_d} \delta_{s_b s_c}) \delta_{q_a q_c} \delta_{q_b q_d}$$

Les éléments de matrice sont maintenant complètement définis pour les trois interactions $v_{12}^{(i)}$ ($i = 1, 2, 3$). Ils interviennent dans la construction du champ Hartree-Fock que nous développons dans la partie suivante.

B.3 Energies des états à une particule

A l'approximation Hartree-Fock, l'énergie totale du noyau prend la forme

$$E = \sum_{ac} \langle a | t | c \rangle \rho_{ca} + \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle ab | v_{12}^{(i)} | \tilde{cd} \rangle \rho_{ca} \rho_{db} \quad (\text{B.13})$$

où $t = p^2/2m$ représente l'opérateur énergie cinétique, $|\tilde{cd}\rangle = |cd\rangle - |dc\rangle$ est l'état anti-symétrisé et ρ_{ca} est la matrice densité.

L'hamiltonien auquel est soumis chaque nucléon, défini par $h_{ac} = \partial E / \partial \rho_{ca}$, peut donc être dérivé de l'expression (B.13) de l'énergie,

$$h_{ac} = \langle a | t | c \rangle + \Gamma_{ac}^{(i)} + \partial \Gamma_{ac}^{(i)},$$

$$\begin{aligned} \text{avec : } \Gamma_{ac}^{(i)} &= \sum_{bd} \langle ab | v_{12}^{(i)} | \tilde{cd} \rangle \rho_{db}, & \text{le champ Hartree-Fock,} \\ \partial \Gamma_{ac}^{(i)} &= \frac{1}{2} \sum_{bdb'd'} \langle bb' | \frac{\partial v_{12}^{(i)}}{\partial \rho_{ca}} | \tilde{dd'} \rangle \rho_{db} \rho_{d'b'}, & \text{le champ de réarrangement.} \end{aligned}$$

Nous considérons, dans la suite, l'approximation Hartree-Fock restreint. Cette approximation postule que les états Hartree-Fock sont ceux de l'Oscillateur Harmonique avec les longueurs d'oscillateur b_i comme seuls paramètres variationnels. La matrice h est alors diagonale dans la représentation de l'Oscillateur Harmonique, $h_{ac} = \delta_{ac} \varepsilon_a$. Les valeurs propres ε_a représentent les énergies des états à une particule,

$$\varepsilon_a^{(i)} = \langle a | t | a \rangle + \Gamma_{aa}^{(i)} + \partial \Gamma_{aa}^{(i)}.$$

B.3.1 Contribution du terme cinétique $\langle a|t|a\rangle$

La contribution du terme cinétique $\langle a|t|a\rangle$ se calcule facilement avec le théorème du Viriel [18]. Ce dernier, appliqué au cas d'un potentiel harmonique de fréquence ω , permet de montrer que

$$\langle a|t|a\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left(2n_a + l_a + \frac{3}{2} \right). \quad (\text{B.14})$$

B.3.2 Contribution du champ Hartree-Fock $\Gamma_{aa}^{(i)}$

A l'approximation Hartree-Fock restreint, la matrice densité est diagonale dans la représentation de l'Oscillateur Harmonique, $\rho_{db} = \delta_{db}\rho_{bb}$. Le champ Hartree-Fock se réduit alors à l'expression suivante

$$\Gamma_{aa}^{(i)} = \sum_b \langle ab|v_{12}^{(i)}|\tilde{a}\tilde{b}\rangle \rho_{bb}.$$

Pour chacune des interactions $v_{12}^{(i)}$ ($i = 1, 2, 3$), nous étudierons séparément les contributions directe $\Gamma_{aa}^{(i),D}$ et d'échange $\Gamma_{aa}^{(i),E}$ définies comme

$$\Gamma_{aa}^{(i),D} \equiv \sum_b \langle ab|v_{12}^{(i)}|ab\rangle \rho_{bb} \quad \text{et} \quad \Gamma_{aa}^{(i),E} \equiv \sum_b \langle ab|v_{12}^{(i)}|ba\rangle \rho_{bb}.$$

B.3.2.1 Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(1)}$

A partir des expressions des éléments de matrice de l'interaction, développées dans la partie B.2, nous pouvons expliciter la contribution directe du champ Hartree-Fock sous la forme

$$\Gamma_{aa}^{(1),D} = \frac{1}{4} \sum_{q_b n_b l_b} S^D(n_a l_a, n_b l_b) (2W + B - (2H + M)\delta_{q_a q_b})$$

avec

$$S^{(1),D}(n_a l_a, n_b l_b) = \sum_{n_\mu=0}^{2n_a+l_a} \sum_{n_\nu=0}^{2n_b+l_b} \frac{1}{4\pi} (2l_a + 1) (2l_b + 1) T_{(n_a l_a)(n_a l_a)}^{(n_\mu 0)} T_{(n_b l_b)(n_b l_b)}^{(n_\nu 0)} J_{n_\mu n_\nu 0}^{(1)},$$

et

$$J_{nn'l}^{(1)} = \frac{1}{2^{n+n'+l}} \frac{(n+n'+l)! \Gamma(n+n'+l+3/2)}{[n!n'!\Gamma(n+l+3/2)\Gamma(n'+l+3/2)]^{1/2}} \sum_{i=0}^{n+n'+l} \frac{(-)^i G^{-i-3/2}}{i! (n+n'+l-i)!}.$$

De la même manière, on construit la contribution d'échange du champ Hartree-Fock,

$$\Gamma_{aa}^{(1),E} = \frac{1}{4} \sum_{q_b n_b l_b} S^{(1),E}(n_a l_a, n_b l_b) (2M + H - (2B + W)\delta_{q_a q_b}).$$

La fonction $S^{(1),E}$ est définie comme

$$S^{(1),E}(n_a l_a, n_b l_b) = \sum_{l_\mu n_\mu n_\nu} \frac{1}{\pi} (2l_\mu + 1)(2l_a + 1)(2l_b + 1) \begin{pmatrix} l_a & l_b & l_\mu \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 T_{(n_a l_a)(n_b l_b)}^{(n_\mu l_\mu)} T_{(n_b l_b)(n_a l_a)}^{(n_\nu l_\mu)} J_{n_\mu n_\nu l_\mu}^{(1)}$$

et les indices des sommes parcourent les intervalles $l_\mu \in [|l_a - l_b|; l_a + l_b]$, $n_\mu \in [m; M]$ et $n_\nu \in [m; M]$ où $m = \text{Max}[0; (|2n_a + l_a - 2n_b - l_b| - l_\mu)/2]$ et $M = n_a + n_b + (l_a + l_b - l_\mu)/2$.

B.3.2.2 Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(2)}$

L'interaction $v_{12}^{(2)}$ est de contact, par conséquent l'opérateur d'échange d'espace se réduit à l'opérateur identité : $\widehat{P}_r = \widehat{1}$. Les contributions directe et d'échange font alors intervenir la même composante d'espace, et l'on obtient pour le champ Hartree-Fock total

$$\Gamma_{aa}^{(2)} = t_0 \int d^3 r \phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_a}(\vec{r}) \rho^\alpha(\vec{r}) \left[\left(1 + \frac{x_0}{2}\right) \rho(\vec{r}) - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right) \rho_{q_a}(\vec{r}) \right].$$

B.3.2.3 Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(3)}$

Dans ce cas, la contribution directe du champ Hartree-Fock prend la forme suivante

$$\Gamma_{aa}^{(3),D} = \sum_{q_b n_b l_b} S^{(3),D}(n_a l_a, n_b l_b) (2W + B - (2H + M)\delta_{q_a q_b})$$

avec

$$S^{(3),D}(n_a l_a, n_b l_b) = \sum_{n_\mu=0}^{2n_a+l_a} \sum_{n_\nu=0}^{2n_b+l_b} \frac{1}{4\pi} (2l_a+1)(2l_b+1) T_{(n_a l_a)(n_a l_a)}^{(n_\mu 0)} T_{(n_b l_b)(n_b l_b)}^{(n_\nu 0)} \frac{1}{2} \left[J_{n_\mu n_\nu 0}^{(3)} + J_{n_\nu n_\mu 0}^{(3)} \right],$$

et

$$J_{nn'l}^{(3)} = K^{3/2} \lambda_{n'l} \int r^2 dr \rho^\alpha(r) e^{-\frac{1}{2} \frac{r^2}{b^2} (1 + \frac{1}{g})} \phi_{(nl)}(r) \phi_{(n'l)}(r, b\sqrt{g}).$$

Pour la contribution d'échange du champ Hartree-Fock, on obtient de la même façon,

$$\Gamma_{aa}^{(3),E} = \sum_{q_b n_b l_b} S^{(3),E}(n_a l_a, n_b l_b) (2M + H - (2B + W)\delta_{q_a q_b}),$$

où

$$S^{(3),E}(n_a l_a, n_b l_b) = \sum_{l_\mu n_\mu n_\nu} \frac{1}{4\pi} (2l_\mu + 1)(2l_a + 1)(2l_b + 1) \begin{pmatrix} l_a & l_b & l_\mu \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 T_{(n_a l_a)(n_b l_b)}^{(n_\mu l_\mu)} T_{(n_b l_b)(n_a l_a)}^{(n_\nu l_\mu)} \frac{1}{2} \left[J_{n_\mu n_\nu l_\mu}^{(3)} + J_{n_\nu n_\mu l_\mu}^{(3)} \right],$$

et les indices des sommes parcourent les mêmes intervalles que pour la fonction $S^{(1),E}(n_a l_a, n_b l_b)$ précédemment définie.

B.3.3 Contribution du champ de réarrangement $\partial\Gamma_{aa}^{(i)}$

L'approximation Hartree-Fock restreint postule que la matrice densité est diagonale dans la représentation de l'Oscillateur Harmonique, $\rho_{db} = \delta_{db}\rho_{bb}$. Cette propriété permet de simplifier la contribution du champ de réarrangement pour obtenir

$$\partial\Gamma_{aa}^{(i)} = \frac{1}{2} \sum_{bb''} \langle bb' | \frac{\partial v_{12}^{(i)}}{\partial \rho_{aa}} | \widetilde{bb'} \rangle \rho_{bb} \rho_{b'b'}$$

Dans le cas de l'interaction $v_{12}^{(1)}$, indépendante de la densité, cette contribution du champ de réarrangement n'intervient pas, $\partial\Gamma_{aa}^{(1)} = 0$. Les interactions $v_{12}^{(2)}$ et $v_{12}^{(3)}$, en revanche, dépendent de la densité et donnent une contribution non nulle pour le champ de réarrangement. Pour ces deux interactions, la dépendance en densité est de la forme $\rho^\alpha(\vec{r})$, où $\rho(\vec{r})$ représente la densité isoscalaire spatiale définie comme

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\sigma\tau} \sum_{kl} \Phi_k^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \Phi_l(\vec{r}, \sigma, \tau) \rho_{lk}$$

L'expression du champ de réarrangement $\partial\Gamma_{aa}^{(i)}$ ($i=2$ ou 3) fait donc intervenir la dérivée :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho_{aa}} &= \sum_{\sigma\tau} \Phi_a^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \Phi_a(\vec{r}, \sigma, \tau) \\ &= \phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_a}(\vec{r}). \end{aligned}$$

Cette dérivée montre que le champ de réarrangement est indépendant de l'isospin q_a . Ce dernier ne contribue donc pas à la différence $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{2s_{1/2}}^\nu - \varepsilon_{2s_{1/2}}^\pi$ entre les énergies des états $2s_{1/2}$, neutron et proton, dans le ^{48}Ca . Cette différence constitue une des équations permettant de contraindre les paramètres de l'interaction de Gogny. De même, la contribution du terme cinétique $\langle a|t|a \rangle$ (B.14) ne dépend pas de l'isospin q_a , et n'intervient donc pas dans la différence $\Delta\varepsilon$. Finalement seul le champ Hartree-Fock $\Gamma_{aa}^{(i)}$ contribue à cette différence, ce que nous étudions dans la partie suivante.

B.3.4 Application : étude de la différence $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{2s_{1/2}}^\nu - \varepsilon_{2s_{1/2}}^\pi$ entre les énergies des états $2s_{1/2}$, neutron et proton, dans le ^{48}Ca

Les expressions du champ Hartree-Fock $\Gamma_{aa}^{(i)}$ développées dans la partie B.3.2 permettent d'explicitier la différence $\Delta\varepsilon$ dans les cas des trois interactions considérées. Cette différence est non nulle dans les noyaux asymétriques comme le ^{48}Ca . Pour ce noyau, le niveau de Fermi proton correspond à l'orbitale $2s_{1/2}$ et le niveau de Fermi neutron à l'orbitale $1f_{7/2}$.

B.3.4.1 Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(1)}$

Pour l'interaction $v_{12}^{(1)}$ de portée finie et indépendante de la densité, la différence $\Delta\varepsilon$ prend la forme :

$$\Delta\varepsilon = g_D (2H + M) + g_E (2B + W),$$

avec :

$$g_D \equiv -\frac{8}{14} S^{(1),D}(10, 03) \quad \text{et} \quad g_E \equiv -\frac{8}{14} S^{(1),E}(10, 03). \quad (\text{B.15})$$

On retrouve, dans les arguments des fonctions $S^{(1),D}$ et $S^{(1),E}$, les nombres quantiques des états $2s_{1/2}$ ($n=1, l=0$) et $1f_{7/2}$ ($n=0, l=3$).

B.3.4.2 Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(2)}$

Pour l'interaction $v_{12}^{(2)}$ de portée nulle et dépendante de la densité, la quantité $\Delta\varepsilon$ est égale à l'intégrale numérique suivante :

$$\Delta\varepsilon = t_0 \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) \int d^3r |\phi_{100}(\vec{r})|^2 \rho^\alpha(\vec{r}) [\rho_\pi(\vec{r}) - \rho_\nu(\vec{r})] \equiv h(t_0, x_0, \alpha). \quad (\text{B.16})$$

La fonction d'onde sous l'intégrale représente l'état $2s_{1/2}$ ($n=1, l=0$ et $m=0$).

B.3.4.3 Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(3)}$

$$\Delta\varepsilon = h_D (2H + M) + h_E (2B + W),$$

avec :

$$h_D \equiv -\frac{8}{14} S^{(3),D}(10, 03) \quad \text{et} \quad h_E \equiv -\frac{8}{14} S^{(3),E}(10, 03). \quad (\text{B.17})$$

B.4 Energie de liaison totale

A l'approximation Hartree-Fock restreint, la matrice densité est diagonale dans la représentation de l'Oscillateur Harmonique, et l'expression (B.13) de l'énergie de liaison totale devient

$$E = T + V^{(i)},$$

$$\text{avec} \quad T \equiv \sum_a \langle a|t|a \rangle \rho_{aa} \quad : \text{ l'énergie cinétique,}$$

$$V^{(i)} \equiv \frac{1}{2} \sum_a \Gamma_{aa}^{(i)} \rho_{aa} \quad : \text{ l'énergie potentielle.}$$

B.4.1 Energie cinétique

En développant l'élément de matrice $\langle a|t|a\rangle$ comme en (B.14) et en explicitant les indices des sommes, l'énergie cinétique s'écrit

$$\begin{aligned} T &= \sum_{q_a s_a n_a l_a m_a} \frac{\hbar\omega}{2} \left(2n_a + l_a + \frac{3}{2} \right) \rho_{aa} \\ &= 2 \sum_{(n_a l_a m_a)_\pi} \frac{\hbar\omega}{2} \left(2n_a + l_a + \frac{3}{2} \right) + 2 \sum_{(n_a l_a m_a)_\nu} \frac{\hbar\omega}{2} \left(2n_a + l_a + \frac{3}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Le facteur 2 tient compte de la dégénérescence de spin, et les sommes portent sur les états $(n_a l_a m_a)$ occupés pour les protons (π) et les neutrons (ν).

Dans les cas particuliers de ^{16}O , du ^{90}Zr et de ^{100}Sn , la formule (B.18), ramenée au nombre de particules, donne

$$T[^{16}\text{O}] = \frac{9}{8} \hbar\omega = \frac{9}{8} \frac{\hbar^2}{M b^2}, \quad T[^{90}\text{Zr}] = \frac{71}{36} \hbar\omega = \frac{71}{36} \frac{\hbar^2}{M b^2} \quad \text{et} \quad T[^{100}\text{Sn}] = \frac{41}{20} \hbar\omega = \frac{41}{20} \frac{\hbar^2}{M b^2}.$$

B.4.2 Energie potentielle $V^{(i)}$

B.4.2.1 Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(1)}$

Dans le cas de noyaux symétriques, $X = ^{16}\text{O}$ ou $X = ^{100}\text{Sn}$, l'énergie potentielle calculée avec l'interaction $v_{12}^{(1)}$ fait intervenir seulement deux combinaisons de paramètres, $(4W + 2B - 2H - M)$ pour le terme direct et $(4M + 2H - 2B - W)$ pour le terme échange. On obtient alors l'expression suivante :

$$V^{(1)} = F^D[X](b) (4W + 2B - 2H - M) + F^E[X](b) (4M + 2H - 2B - W), \quad (\text{B.19})$$

$$\text{avec : } F^D[X](b) = 2 \sum_{(n_a l_a)_\pi} \sum_{(n_b l_b)_\nu} S^{(1),D}(n_a l_a, n_b l_b) \quad (\text{B.20})$$

$$F^E[X](b) = 2 \sum_{(n_a l_a)_\pi} \sum_{(n_b l_b)_\nu} S^{(1),E}(n_a l_a, n_b l_b). \quad (\text{B.21})$$

Les sommes sur $(n_a l_a)_\pi$ et $(n_b l_b)_\nu$ décrivent l'ensemble des états quantiques occupés par les protons (π) et les neutrons (ν).

Dans le cas de noyaux asymétriques, deux nouvelles combinaisons de paramètres entrent en jeu, $(2W + B - 2H - M)$ et $(2M + H - 2B - W)$. Cependant dans les noyaux faiblement asymétriques, comme $X = ^{90}\text{Zr}$ par exemple, les contributions associées à ces deux dernières combinaisons sont négligeables devant celle de (B.19). Par conséquent, pour le ^{90}Zr , la forme (B.19) de l'énergie potentielle donne une estimation très précise du résultat exact.

B.4.2.2 Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(2)}$

Dans le cas de l'interaction de contact $v_{12}^{(2)}$, la dépendance en densité nécessite l'intégration numérique suivante :

$$V^{(2)} = \frac{1}{2} t_0 \int d^3r \rho^\alpha(\vec{r}) \left(\left(1 + \frac{x_0}{2}\right) \rho^2(\vec{r}) - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right) \sum_q [\rho_q(\vec{r})]^2 \right) \equiv G[X](t_0, x_0, \alpha, b). \quad (\text{B.22})$$

B.4.2.3 Cas $v_{12}^{(i)} = v_{12}^{(3)}$

Pour cette interaction de portée finie et dépendante de la densité, la structure de l'énergie potentielle est très similaire à celle obtenue avec l'interaction $v_{12}^{(1)}$. On retrouve les deux combinaisons linéaires de paramètres $(4W + 2B - 2H - M)$ et $(4M + 2H - 2B - W)$ associées aux termes direct et échange respectivement.

$$V^{(3)} = G^D[X](b) (4W + 2B - 2H - M) + G^E[X](b) (4M + 2H - 2B - W),$$

$$\begin{aligned} \text{avec : } G^D[X](b) &= 2 \sum_{(n_a l_a)_\pi} \sum_{(n_b l_b)_\nu} S^{(1),D}(n_a l_a, n_b l_b) \\ G^E[X](b) &= 2 \sum_{(n_a l_a)_\pi} \sum_{(n_b l_b)_\nu} S^{(1),E}(n_a l_a, n_b l_b) \end{aligned}$$

Une différence fondamentale apparaît cependant, les fonctions $G^D[X](b)$ et $G^E[X](b)$ font intervenir une dépendance en densité et ne sont donc plus analytiques contrairement aux fonctions $F^D[X](b)$ et $F^E[X](b)$. Une intégration numérique, plus coûteuse en temps de calcul, est alors nécessaire pour calculer $G^D[X](b)$ et $G^E[X](b)$.

Annexe C

Champs Hartree-Fock-Bogoliubov, Symétrie axiale avec invariance par renversement du temps, Interaction de portée finie dépendant de la densité

On considère une interaction centrale du type :

$$\hat{v}_{12} = (W + B\hat{P}_\sigma - H\hat{P}_\tau - M\hat{P}_\sigma\hat{P}_\tau)G(r)F[\rho] \quad (\text{C.1})$$

avec :

$$G(r) = e^{-r^2/p^2}, \quad F[\rho] = \frac{1}{2}(\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)) \quad (\text{C.2})$$

et $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. On cherche les expressions du champ moyen, du champ d'appariement, de l'énergie, etc . . . dans une représentation de l'oscillateur harmonique (OH) axial dans le cas où le fondamental Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) est axial et invariant par renversement du temps.

C.1 Rappels sur la représentation de l'OH axial

On note $|a\rangle$ les états de l'OH axial avec :

$$a = (\alpha_a, r_a), \quad \alpha_a = (q_a, s_a), \quad r_a = (m_a, \nu_a) \equiv (m_a, n_{\perp a}, n_{za}) \quad (\text{C.3})$$

où q_a et s_a sont les projections de l'isospin et du spin. Ils sont états propres de j_z avec la valeur propre $\Omega_a = m_a + s_a$. De façon équivalente, on notera aussi :

$$a = (q_a, \Omega_a, r_a) \quad (\text{C.4})$$

En posant

$$\bar{a} = (\bar{\alpha}_a, \bar{r}_a) = (q_a, -s_a, -m_a, \nu_a) = (q_a, -\Omega_a, -m_a, \nu_a) \quad (\text{C.5})$$

les états $|a\rangle$ et $|\bar{a}\rangle$ se correspondent par l'opérateur renversement du temps \hat{T} :

$$\hat{T}|a\rangle = \sigma_a|\bar{a}\rangle, \quad \hat{T}|\bar{a}\rangle = -\sigma_a|a\rangle, \quad \hat{T}^+|a\rangle = -\sigma_a|\bar{a}\rangle, \quad \hat{T}^+|\bar{a}\rangle = \sigma_a|a\rangle, \quad \sigma_a = 2s_a. \quad (\text{C.6})$$

On désigne par $a > 0$ les états ayant $\Omega_a > 0$ et $a < 0$ ceux ayant $\Omega_a < 0$. On note c_a^+ les opérateurs associés aux $|a\rangle$ en seconde quantification, et \bar{c}_a^+ leurs renversés du temps. Les relations (C.6) sont alors équivalentes à :

$$\bar{c}_a^+ \equiv \hat{T}c_a^+\hat{T}^+ = \sigma_a c_a^+, \quad \hat{T}\bar{c}_a^+\hat{T}^+ = -\sigma_a c_a^+, \quad \hat{T}^+c_a^+\hat{T} = -\sigma_a c_a^+, \quad \hat{T}^+\bar{c}_a^+\hat{T} = \sigma_a c_a^+ \quad (\text{C.7})$$

Les états de l'OH axial (et les autres) sont états propres de la parité \hat{P} :

$$\hat{P}|a\rangle = (-)^{m_a+n_{za}}|a\rangle \quad (\text{C.8})$$

Ils transportent donc la parité $\pi_a = (-)^{m_a+n_{za}}$.

Les fonctions d'onde de l'OH axial seront notées :

$$\Phi_a(\vec{r}, \sigma, \tau) = \phi_{r_a}(\vec{r}) \chi_{s_a}(\sigma) \chi_{q_a}(\tau) = \phi_{\nu_a}(\vec{r}_\perp) \phi_{n_{za}}(z) \chi_{s_a}(\sigma) \chi_{q_a}(\tau) \quad (\text{C.9})$$

où les χ sont les spineurs à deux dimensions habituels. Les fonctions d'onde spatiales ϕ_{r_a} sont données dans l'Appendice C.7.1 de cette annexe.

C.2 HFB statique en symétrie axiale

On suppose l'état fondamental HFB $|\tilde{0}\rangle$:

- a/ invariant par rotation autour de Oz (symétrie axiale)
- b/ invariant par renversement du sens du temps \hat{T} . Ceci suppose un noyau pair-pair, sauf si l'on envisage l'approximation du "blocking symétrisé" où l'on bloque avec des probabilités égales les états de quasi-particule renversés du temps l'un de l'autre.
- c/ éventuellement invariant par parité \hat{P}
- d/ invariant par réflexion par rapport au plan xOz , c'est-à-dire par $\hat{\Pi}_2 = \hat{P}\hat{R}_y(\pi)$.
- e/ produit direct d'une fonction d'onde de protons et d'une fonction d'onde de neutrons.

Avec ces symétries :

- les états de quasi-particule (qp) ξ_μ^+ peuvent être pris états propres de \hat{t}_z, \hat{j}_z et éventuellement de \hat{P} (on omettra ici la mention explicite de cette symétrie qu'il sera facile de rétablir par la suite). On écrira donc $\mu = (q, \Omega, n)$ et :

$$\xi_\mu^+ = \xi_{q\Omega n}^+ \quad (\text{C.10})$$

où q et Ω sont les valeurs propres de \hat{t}_z et de \hat{j}_z , et n est un numéro qui distingue les qp de mêmes q et Ω .

- L'action de \hat{T} sur les ξ_μ^+ peut être supposée de la forme

$$\overline{\xi_{q\Omega n}^+} \equiv \hat{T} \xi_{q\Omega n}^+ \hat{T}^+ = (-)^{1/2-\Omega} \xi_{q-\Omega n}^+ \quad (\text{C.11})$$

- les éléments de matrice des opérateurs hermitiens sont réels.

Compte tenu de ces propriétés, on développe les états de qp sur les états de l'OH axial :

$$\xi_{q\Omega n} = \sum_{r_a} \left(U_{n,r_a}^{q\Omega} c_{q\Omega r_a} + V_{n,r_a}^{q\Omega} \overline{c_{q\Omega r_a}^+} \right) \quad (\text{C.12})$$

La somme sur $r_a = (m_a, \nu_a)$ est limitée aux valeurs $m_a = \Omega \pm 1/2$ (et éventuellement aux valeurs qui conservent la parité). Les U et V sont des matrices réelles.

La matrice densité et la matrice du tenseur d'appariement sont définies par :

$$\rho_{ca} = \langle \tilde{0} | c_a^+ c_c | \tilde{0} \rangle, \quad \kappa_{ac} = \langle \tilde{0} | \overline{c_a} c_c | \tilde{0} \rangle = \sigma_a \langle \tilde{0} | c_{\overline{a}} c_c | \tilde{0} \rangle \quad (\text{C.13})$$

Ces deux matrices sont réelles et symétriques (on a remplacé dans κ le c_a usuel par $\overline{c_a}$ précisément pour avoir cette dernière propriété. Sinon κ serait antisymétrique).

L'invariance de $|\tilde{0}\rangle$ par \hat{T} a pour conséquence les relations suivantes :

$$\rho_{\overline{ca}} = \sigma_c \sigma_a \rho_{ca}, \quad \kappa_{\overline{ac}} = \sigma_a \sigma_c \kappa_{ac} \quad (\text{C.14})$$

En représentation double, et en notations abrégées, la transformation de Bogoliubov-Valatin (C.12) s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \xi_\mu \\ \overline{\xi_\mu^+} \end{pmatrix} = \sum_a \begin{pmatrix} U & V \\ -V & U \end{pmatrix}_{\mu a} \begin{pmatrix} c_a \\ \overline{c_a^+} \end{pmatrix} \quad (\text{C.15})$$

En effet, en transformant $\xi_\mu = \sum_a (U_{\mu a} c_a + V_{\mu a} \overline{c_a^+})$ par \hat{T} et en prenant le hermitique conjugué on obtient : $\overline{\xi_\mu^+} = \sum_a (U_{\mu a} \overline{c_a^+} - V_{\mu a} c_a)$.

La matrice $B = \begin{pmatrix} U & V \\ -V & U \end{pmatrix}$ doit être orthogonale afin que les ξ soient des fermions, ce qui implique en particulier :

$$U^T U + V^T V = \mathbb{I}, \quad U^T V - V^T U = \mathbb{O} \quad (\text{C.16})$$

On en déduit que la transformation inverse de (C.15) est :

$$\begin{pmatrix} c_a \\ \frac{c_a^\dagger}{c_a^\dagger} \end{pmatrix} = \sum_{\mu} \begin{pmatrix} U^T & -V^T \\ V^T & U^T \end{pmatrix}_{a\mu} \begin{pmatrix} \xi_{\mu} \\ \bar{\xi}_{\mu}^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{C.17})$$

En introduisant cette expression des c dans (C.13), et en utilisant (C.16) on obtient facilement :

$$\rho = V^T V = \mathbb{I} - U^T U, \quad \kappa = U^T V = V^T U \quad (\text{C.18})$$

ce qui montre bien que ce sont des matrices symétriques.

L'énergie HFB est :

$$E_{HFB} = T + V + E_{App} \quad (\text{C.19})$$

où

$$T = \sum_{ac} \langle a | \hat{t} | c \rangle \rho_{ca} \quad (\text{C.20})$$

est l'énergie cinétique,

$$V = \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle ab | \hat{v}_{12}^{(a)} | cd \rangle \rho_{ca} \rho_{db} \quad (\text{C.21})$$

l'énergie potentielle du champ moyen, et

$$E_{App} = \frac{1}{4} \sum_{abcd} \langle a\bar{c} | \hat{v}_{12}^{(a)} | b\bar{d} \rangle \sigma_c \sigma_d \kappa_{ca} \kappa_{db} \quad (\text{C.22})$$

l'énergie d'appariement. On a noté $\hat{v}_{12}^{(a)} = \hat{v}_{12}(1 - \hat{P}_r \hat{P}_\sigma \hat{P}_\tau)$ l'interaction antisymétrisée.

Le champ moyen est composé de trois termes :

$$\Gamma_{ac}^{(tot)} = \Gamma_{ac} + \partial\Gamma_{ac} + \partial\Delta_{ac} \quad (\text{C.23})$$

qui s'écrivent :

$$\Gamma_{ac} = \sum_{bd} \langle ab | \hat{v}_{12}^{(a)} | cd \rangle \rho_{db} \quad (\text{C.24})$$

$$\partial\Gamma_{ac} = \frac{1}{2} \sum_{bdb'd'} \langle bb' | \frac{\partial \hat{v}_{12}^{(a)}}{\partial \rho_{ca}} | dd' \rangle \rho_{db} \rho_{d'b'} \quad (\text{C.25})$$

et :

$$\partial\Delta_{ac} = \frac{1}{4} \sum_{bdb'd'} \langle b'\bar{d}' | \frac{\partial \hat{v}_{12}^{(a)}}{\partial \rho_{ca}} | b\bar{d} \rangle \sigma_{d'} \sigma_d \kappa_{d'b'} \kappa_{db} \quad (\text{C.26})$$

Le champ d'appariement est :

$$\Delta_{ac} = \frac{1}{2} \sum_{bd} \langle a\bar{c} | \hat{v}_{12}^{(a)} | b\bar{d} \rangle \sigma_c \sigma_d \kappa_{db} \quad (\text{C.27})$$

Comme $|\widetilde{0}\rangle$ est axial, les matrices ρ et κ sont diagonales en Ω . La propriété $\mathbf{e}/$ au début de cette section fait qu'elles sont également diagonales en q :

$$\rho_{ca} = \delta_{q_a q_c} \delta_{\Omega_a, \Omega_c} \rho_{m_c \nu_c, m_a \nu_a}^{q_a \Omega_a} \quad (\text{C.28})$$

et même chose pour κ . Quand on impose la parité, ρ et κ sont aussi diagonales dans ce nombre quantique :

$$\rho_{ca} = \delta_{q_a q_c} \delta_{\Omega_a, \Omega_c} \delta_{\pi_a, \pi_c} \rho_{m_c \nu_c, m_a \nu_a}^{q_a \Omega_a \pi_a} \quad (\text{C.29})$$

avec $\pi_a = (-)^{m_a + n_{za}}$.

L'interaction étant invariante par rotation, parité et renversement du temps, les champs Γ , Δ , $\partial\Gamma$ et $\partial\Delta$ ont la même structure diagonale (C.28)-(C.29) que ρ et κ , et ils obéissent à des relations analogues à (C.14) lorsque l'on change les indices a, c en \bar{a}, \bar{c} .

Notons que, d'après les relations ci-dessus :

$$V = \frac{1}{2} \sum_{ac} \Gamma_{ac} \rho_{ca}, \quad E_{App} = \frac{1}{2} \sum_{ac} \Delta_{ac} \kappa_{ca} \quad (\text{C.30})$$

C.3 Champ Γ

En explicitant les indices dans (C.24) et en tenant compte que Γ et ρ sont diagonaux en q et Ω , on obtient :

$$\Gamma_{r_a r_c}^{q \Omega} = \sum_{q \Omega' r_b r_d} \langle q s_a m_a \nu_a \ q' s_b m_b \nu_b | \hat{v}_{12}^{(a)} | q s_c m_c \nu_c \ q' s_d m_d \nu_d \rangle \rho_{r_d r_b}^{q' \Omega'} \quad (\text{C.31})$$

avec $\Omega = m_a + s_a = m_c + s_c$, $\Omega' = m_b + s_b = m_d + s_d$ et $r_a = (m_a, \nu_a)$. Or, d'après (C.1) :

$$\hat{v}_{12}^{(a)} = \widehat{W}_D G(r) F[\rho] + \widehat{W}_E G(r) F[\rho] \widehat{P}_r \quad (\text{C.32})$$

où

$$\widehat{W}_D = W + B \widehat{P}_\sigma - H \widehat{P}_\tau - M \widehat{P}_\sigma \widehat{P}_\tau, \quad \widehat{W}_E = M + H \widehat{P}_\sigma - B \widehat{P}_\tau - W \widehat{P}_\sigma \widehat{P}_\tau \quad (\text{C.33})$$

sont les composantes de spin-isospin pour les champs direct et d'échange (d'espace). On commencera par calculer le champ d'échange. Le champ direct s'en déduira en remplaçant W, B, H, M par M, H, B, W et en omettant \widehat{P}_r dans les éléments de matrice spatiaux.

Le champ d'échange est, en séparant les parties spatiales et spin-isospin des éléments de matrice de l'interaction :

$$\Gamma_{r_a r_c}^{q \Omega}(E) = \sum_{q \Omega' r_b r_d} \langle m_a \nu_a \ m_b \nu_b | G(r) F[\rho] \widehat{P}_r | m_c \nu_c \ m_d \nu_d \rangle \langle q s_a \ q' s_b | \widehat{W}_E | q s_c \ q' s_d \rangle \rho_{r_d r_b}^{q' \Omega'} \quad (\text{C.34})$$

L'élément de matrice de spin-isospin est :

$$\begin{aligned} \langle q s_a \ q' s_b | \widehat{W}_E | q s_c \ q' s_d \rangle &= \langle s_a s_b | (M - B \delta_{qq'}) + (H - W \delta_{qq'}) \widehat{P}_\sigma | s_c s_d \rangle \\ &= (M - B \delta_{qq'}) \delta_{s_a s_c} \delta_{s_b s_d} + (H - W \delta_{qq'}) \delta_{s_a s_d} \delta_{s_b s_c} \end{aligned}$$

D'où :

$$\Gamma_{r_a r_c}^{q \Omega}(E) = \sum_{\Omega' m_b \nu_b m_d \nu_d} \langle m_a \nu_a \ m_b \nu_b | G(r) F[\rho] \widehat{P}_r | m_c \nu_c \ m_d \nu_d \rangle R_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q s_a s_c \Omega'}(E) \quad (\text{C.35})$$

avec :

$$\begin{aligned} R_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q s_a s_c \Omega'}(E) &= \sum_{q'} [(M - B \delta_{qq'}) \delta_{s_a s_c} \delta_{m_b, m_d} + (H - W \delta_{qq'}) \delta_{m_b, \Omega' - s_c} \delta_{m_d, \Omega' - s_a}] \\ &\quad \times \rho_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q' \Omega'} \end{aligned} \quad (\text{C.36})$$

On suppose $\Omega > 0$. Comme m_a et m_c sont positifs ou nuls, différent au plus de 1 et que Γ est symétrique, on distingue deux cas :

C.3.1 Cas $m_a = m_c = m$

On a alors $s_a = s_c = s$. On pose $\Omega = m + s$. L'interaction \widehat{v}_{12} commute avec \widehat{J}_z et avec \widehat{S}_z . Par conséquent, on doit avoir $m_b = m_d = m'$ dans (C.35), ce qui donne :

$$\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m + s}(E) = \sum_{\Omega' m' \nu_b \nu_d} \langle m \nu_a \ m' \nu_b | G(r) F[\rho] \widehat{P}_r | m \nu_c \ m' \nu_d \rangle R_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q s s \Omega'}(E)$$

et :

$$R_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q s s \Omega'}(E) = \sum_{q'} [M - B \delta_{qq'} + (H - W \delta_{qq'}) \delta_{\Omega', m' + s}] \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q' \Omega'} \quad (\text{C.37})$$

En restreignant la somme aux $\Omega' > 0$ ceci donne :

$$\begin{aligned} \Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m + s}(E) &= \sum_{\substack{\Omega' > 0 \\ m' \nu_b \nu_d}} \left[\langle m \nu_a \ m' \nu_b | G(r) F[\rho] \widehat{P}_r | m \nu_c \ m' \nu_d \rangle R_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q s s \Omega'}(E) \right. \\ &\quad \left. + \langle m \nu_a \ -m' \nu_b | G(r) F[\rho] \widehat{P}_r | m \nu_c \ -m' \nu_d \rangle R_{-m' \nu_d -m' \nu_b}^{q s s -\Omega'}(E) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.38})$$

Or, d'après (C.37) et (C.14) :

$$\begin{aligned} R_{-m' \nu_d -m' \nu_b}^{q s s -\Omega'}(E) &= \sum_{q'} [M - B \delta_{qq'} + (H - W \delta_{qq'}) \delta_{-\Omega', -m' + s}] \rho_{-m' \nu_d -m' \nu_b}^{q' -\Omega'} \\ &= \sum_{q'} [M - B \delta_{qq'} + (H - W \delta_{qq'}) \delta_{\Omega', m' - s}] \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q' \Omega'} = R_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q -s -s \Omega'}(E) \end{aligned} \quad (\text{C.39})$$

On peut remplacer dans (C.38) la somme $\sum_{\Omega' > 0} \text{par} \sum_{m' \geq 0} \sum_{\Omega' = m' \pm s} \Theta(\Omega')$ où Θ est la fonction échelon :

$$\Theta(\Omega) = \begin{cases} 0 & \text{si } \Omega < 0 \\ 1 & \text{si } \Omega > 0 \end{cases} \quad (\text{C.40})$$

On a :

$$\begin{aligned} \sum_{\Omega' = m' \pm s} \Theta(\Omega') R_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q s \Omega'}(E) &= \sum_{q'} \left[(M - B \delta_{qq'}) \left(\Theta(m' + s) \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q' m' + s} + \Theta(m' - s) \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q' m' - s} \right) \right. \\ &\quad \left. + (H - W \delta_{qq'}) \Theta(m' + s) \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q' m' + s} \right] \\ &= \sum_{q'} \left[(M + H - (B + W) \delta_{qq'}) \Theta(m' + s) \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q' m' + s} + \right. \\ &\quad \left. (M - B \delta_{qq'}) \Theta(m' - s) \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q' m' - s} \right] \end{aligned}$$

On renomme cette quantité $R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs}$. Autrement dit :

$$\boxed{R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs} = \sum_{q'} \left[(M + H - (B + W) \delta_{qq'}) \Theta(m' + s) \rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' + s} + (M - B \delta_{qq'}) \Theta(m' - s) \rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' - s} \right]} \quad (\text{C.41})$$

et, en tenant compte de (C.39), on obtient (en tenant compte du \widehat{P}_r) :

$$\boxed{\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m + s}(E) = \sum_{m' \geq 0} \left[\langle m \nu_a \ m' \nu_b | G(r) F[\rho] | m' \nu_d \ m \nu_c \rangle R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs} + \langle m \nu_a \ -m' \nu_b | G(r) F[\rho] | -m' \nu_d \ m \nu_c \rangle R_{m' \nu_d \nu_b}^{q-s} \right]} \quad (\text{C.42})$$

Pour obtenir le champ direct, comme on l'a dit, on remplace W, B, H, M par M, H, B, W et l'on omet \widehat{P}_r . Les deux éléments de matrice de (C.42) deviennent $\langle m \nu_a m' \nu_b | G(r) F[\rho] | m \nu_c m' \nu_d \rangle$ et $\langle m \nu_a -m' \nu_b | G(r) F[\rho] | m \nu_c -m' \nu_d \rangle$. En échangeant ν_b et ν_d dans le second terme, le second élément de matrice devient $\langle m \nu_a -m' \nu_d | G(r) F[\rho] | m \nu_c -m' \nu_b \rangle$ qui est égal au premier élément de matrice :

$$\langle m \nu_a -m' \nu_d | G(r) F[\rho] | m \nu_c -m' \nu_b \rangle = \langle m \nu_a \ m' \nu_b | G(r) F[\rho] | m \nu_c \ m' \nu_d \rangle$$

(on le voit en l'écrivant comme une double intégrale spatiale). La somme dans (C.42) contient alors cet élément de matrice multiplié par la somme $R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs} + R_{m' \nu_b \nu_d}^{q-s}$. En utilisant (C.41) (et en n'oubliant pas de renverser l'ordre des W, B, H, M), on obtient :

$$\begin{aligned} R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs} + R_{m' \nu_b \nu_d}^{q-s} &= \sum_{q'} (2W + B - (2H + M) \delta_{qq'}) \left(\Theta(m' + s) \rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' + s} \right. \\ &\quad \left. + \Theta(m' - s) \rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' - s} \right) \end{aligned}$$

Cette quantité est invariants dans l'échange $s \leftrightarrow -s$, donc indépendante de s , et on peut l'écrire :

$$R_{m'\nu_d\nu_b}^q = \sum_{q'} [2W + B - (2H + M)\delta_{qq'}] \left[\rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q' m'+1/2} + \Theta(m' - 1/2) \rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q' m'-1/2} \right] \quad (\text{C.43})$$

puisque $m' + 1/2$ est forcément positif. Le champ direct déduit de (C.42) est alors indépendant de s et on obtient :

$$\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m\pm 1/2}(D) = \sum_{m' \geq 0\nu_b\nu_d} \langle m\nu_a \ m'\nu_b | G(r)F[\rho] | m\nu_c \ m'\nu_d \rangle R_{m'\nu_d\nu_b}^q \quad (\text{C.44})$$

C.3.2 Cas $m_a=m, m_c=m+1$

On a alors $s_a=1/2$ et $s_c=-1/2$ et $\Omega = m + 1/2$. Pour les mêmes raisons que précédemment (conservation de \widehat{J}_z et de \widehat{S}_z), on doit avoir dans (C.35) $m_b - m_d = m_c - m_a = +1$. On pose alors $m_b = m' + 1$ et $m_d = m'$. L'éq. (C.35) fournit alors :

$$\Gamma_{m\nu_a, m+1\nu_c}^{q\Omega=m+1/2}(E) = \sum_{\Omega' m'\nu_b\nu_d} \langle m\nu_a \ m'+1\nu_b | G(r)F[\rho] \widehat{P}_r | m+1\nu_c \ m'\nu_d \rangle R_{m'\nu_d m'+1\nu_b}^{q\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\Omega'}(E) \quad (\text{C.45})$$

et (C.36) donne :

$$R_{m'\nu_d m'+1\nu_b}^{q\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\Omega'}(E) = \sum_{q'} (H - W\delta_{qq'}) \delta_{\Omega', m'+1/2} \rho_{m'\nu_d m'+1\nu_b}^{q' \Omega'} \quad (\text{C.46})$$

En restreignant la somme aux $\Omega' > 0$ ceci donne :

$$\begin{aligned} \Gamma_{m\nu_a, m+1\nu_c}^{q\Omega=m+1/2}(E) &= \sum_{\substack{\Omega' > 0 \\ m'\nu_b\nu_d}} \left[\langle m\nu_a \ m'+1\nu_b | G(r)F[\rho] \widehat{P}_r | m+1\nu_c \ m'\nu_d \rangle R_{m'\nu_d m'+1\nu_b}^{q\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\Omega'}(E) \right. \\ &\quad \left. + \langle m\nu_a \ -m'+1\nu_b | G(r)F[\rho] \widehat{P}_r | m+1\nu_c \ -m'\nu_d \rangle R_{-m'\nu_d -m'+1\nu_b}^{q\frac{1}{2}-\frac{1}{2}-\Omega'}(E) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.47})$$

Or, d'après (C.46), (C.14) et la symétrie de la matrice ρ :

$$\begin{aligned} R_{-m'\nu_d -m'+1\nu_b}^{q\frac{1}{2}-\frac{1}{2}-\Omega'}(E) &= \sum_{q'} (H - W\delta_{qq'}) \delta_{-\Omega', -m'+1/2} \rho_{-m'\nu_d -m'+1\nu_b}^{q' -\Omega'} \\ &= - \sum_{q'} (H - W\delta_{qq'}) \delta_{\Omega', m'-1/2} \rho_{m'\nu_d m'-1\nu_b}^{q' \Omega'} = -R_{m'\nu_d m'-1\nu_b}^{q\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\Omega'}(E) \end{aligned} \quad (\text{C.48})$$

En changeant m' en $m' + 1$ et en échangeant ν_b et ν_d dans le second terme de (C.47), on obtient alors :

$$\begin{aligned} \Gamma_{m\nu_a, m+1\nu_c}^{q\Omega=m+1/2}(E) &= \sum_{\substack{\Omega' > 0 \\ m'\nu_b\nu_d}} \left[\langle m\nu_a \ m'+1\nu_b | G(r)F[\rho] \widehat{P}_r | m+1\nu_c \ m'\nu_d \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle m\nu_a \ -m'\nu_d | G(r)F[\rho] \widehat{P}_r | m+1\nu_c \ -m' - 1\nu_b \rangle \right] R_{m'\nu_d m'+1\nu_b}^{q\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\Omega'}(E) \end{aligned} \quad (\text{C.49})$$

De façon analogue au cas précédent, on remplace la somme $\sum_{\Omega' > 0}$ par $\sum_{m' \geq 0}$ $\sum_{\Omega' = m' \pm 1/2}$ $\Theta(\Omega')$.

On a :

$$\sum_{\Omega' = m' \pm 1/2} \Theta(\Omega') R_{m' \nu_d m' + 1 \nu_b}^{q \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \Omega'}(E) = \sum_{q'} (H - W \delta_{qq'}) \rho_{m' \nu_d m' + 1 \nu_b}^{q' m' + 1/2}$$

On renomme cette quantité $R_{m' \nu_d \nu_b}^{q(1)}$. Autrement dit :

$$\boxed{R_{m' \nu_d \nu_b}^{q(1)} = \sum_{q'} (H - W \delta_{qq'}) \rho_{m' \nu_d m' + 1 \nu_b}^{q' m' + 1/2}} \quad (\text{C.50})$$

et (C.49) s'écrit :

$$\boxed{\Gamma_{m \nu_a, m + 1 \nu_c}^{q \Omega = m + 1/2}(E) = \sum_{m' \geq 0 \nu_b \nu_d} [\langle m \nu_a \ m' + 1 \nu_b | G(r) F[\rho] | m' \nu_d \ m + 1 \nu_c \rangle - \langle m \nu_a \ -m' \nu_d | G(r) F[\rho] | -m' - 1 \nu_b \ m + 1 \nu_c \rangle] R_{m' \nu_d \nu_b}^{q(1)}} \quad (\text{C.51})$$

Le champ direct s'obtient, comme on l'a vu, en remplaçant W, B, H, M par M, H, B, W et en omettant \hat{P}_r . Le second élément de matrice de (C.51) devient, en échangeant les deux ensembles de nombres quantiques de droite $\langle m \nu_a \ -m' \nu_d | G(r) F[\rho] | m + 1 \nu_c \ -m' - 1 \nu_b \rangle$, et on voit qu'il est égal au premier élément de matrice $\langle m \nu_a \ m' + 1 \nu_b | G(r) F[\rho] | m + 1 \nu_c \ m' \nu_d \rangle$ où l'on a effectué la même manipulation (on le voit en l'écrivant comme une double intégrale spatiale). On obtient ainsi :

$$\boxed{\Gamma_{m \nu_a, m + 1 \nu_c}^{q \Omega = m + 1/2}(D) = 0} \quad (\text{C.52})$$

C.3.3 Eléments de matrice spatiaux

Les éléments de matrice spatiaux

$$v_{r_a r_b, r_c r_d} = \langle m_a \nu_a \ m_b \nu_b | G(r) F[\rho] | m_c \nu_c \ m_d \nu_d \rangle \quad (\text{C.53})$$

s'écrivent à l'aide des fonctions d'onde (C.9) et de la forme (C.2) de F :

$$v_{r_a r_b, r_c r_d} = \iint d^3 r_1 d^3 r_2 \phi_{m_a \nu_a}^*(\vec{r}_1) \phi_{m_b \nu_b}^*(\vec{r}_2) \phi_{m_c \nu_c}(\vec{r}_1) \phi_{m_d \nu_d}(\vec{r}_2) G(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \times \frac{1}{2} (\rho^\alpha(\vec{r}_1) + \rho^\alpha(\vec{r}_2)) \quad (\text{C.54})$$

D'après l'Appendice C.7.2 de cette annexe :

$$\phi_{m_a \nu_a}^*(\vec{r}) \phi_{m_c \nu_c}(\vec{r}) = \sum_{\nu_\mu} T_{m_a \nu_a, m_c \nu_c}^{\nu_\mu} \phi_{00}(\vec{r}) \phi_{m_c - m_a, \nu_\mu}(\vec{r}) \quad (\text{C.55})$$

où la somme sur $\nu_\mu=(n_{\perp\mu}, n_{z\mu})$ est limitée par :

$$\begin{cases} (|X_a - X_c| - |m_a - m_c|) / 2 \leq n_{\perp\mu} \leq (X_a + X_c - |m_a - m_c|) / 2 \\ |n_{za} - n_{zc}| \leq n_{z\mu} \leq n_{za} + n_{zc} \end{cases} \quad (\text{C.56})$$

avec :

$$X_a = 2n_{\perp a} + |m_a|, \quad X_c = 2n_{\perp c} + |m_c| \quad (\text{C.57})$$

On applique cette relation, d'une part à $\phi_{m_b\nu_b}^*(\vec{r}_2)\phi_{m_d\nu_d}(\vec{r}_2)$ pour le terme en facteur de $\rho^\alpha(\vec{r}_1)$, d'autre part à $\phi_{m_a\nu_a}^*(\vec{r}_1)\phi_{m_c\nu_c}(\vec{r}_1)$ pour le terme en facteur de $\rho^\alpha(\vec{r}_2)$. Ceci donne :

$$\begin{aligned} v_{r_a r_b, r_c r_d} = & \frac{1}{2} \iint d^3 r_1 d^3 r_2 \sum_{\nu_\mu} \left[\phi_{m_a\nu_a}^*(\vec{r}_1) \phi_{m_c\nu_c}(\vec{r}_1) \rho^\alpha(\vec{r}_1) T_{m_b\nu_b, m_d\nu_d}^{\nu_\mu} \phi_{00}(\vec{r}_2) \phi_{m_d-m_b, \nu_\mu}(\vec{r}_2) \right. \\ & \left. + T_{m_a\nu_a, m_c\nu_c}^{\nu_\mu} \phi_{00}(\vec{r}_1) \phi_{m_c-m_a, \nu_\mu}(\vec{r}_1) \rho^\alpha(\vec{r}_2) \phi_{m_b\nu_b}^*(\vec{r}_2) \phi_{m_d\nu_d}(\vec{r}_2) \right] G(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \end{aligned} \quad (\text{C.58})$$

ou encore :

$$\begin{aligned} v_{r_a r_b, r_c r_d} = & \frac{1}{2} \int d^3 r \rho^\alpha(\vec{r}) \sum_{\nu_\mu} \left[\phi_{m_a\nu_a}^*(\vec{r}) \phi_{m_c\nu_c}(\vec{r}) T_{m_b\nu_b, m_d\nu_d}^{\nu_\mu} G_{m_d-m_b, \nu_\mu}(\vec{r}) \right. \\ & \left. + \phi_{m_b\nu_b}^*(\vec{r}) \phi_{m_d\nu_d}(\vec{r}) T_{m_a\nu_a, m_c\nu_c}^{\nu_\mu} G_{m_c-m_a, \nu_\mu}(\vec{r}) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.59})$$

avec :

$$G_{m_\mu\nu_\mu}(\vec{r}) = \int d^3 r' G(|\vec{r} - \vec{r}'|) \phi_{00}(\vec{r}') \phi_{m_\mu\nu_\mu}(\vec{r}') \quad (\text{C.60})$$

La quantité $G_{m_\mu\nu_\mu}(\vec{r})$ se calcule analytiquement. On trouve (cf. Appendice C.7.3 de cette annexe) :

$$G_{m_\mu\nu_\mu}(\vec{r}) = \frac{(\pi p^2)^{3/2}}{G_\perp^{\frac{2n_{\perp\mu} + |m_\mu| + 2}{2}} G_z^{\frac{n_{z\mu} + 1}{2}}} \phi_{000} \left(\frac{\vec{r}_\perp}{\sqrt{G_\perp}}, \frac{z}{\sqrt{G_z}} \right) \phi_{m_\mu n_{\perp\mu} n_{z\mu}} \left(\frac{\vec{r}_\perp}{\sqrt{G_\perp}}, \frac{z}{\sqrt{G_z}} \right) \quad (\text{C.61})$$

avec

$$G_\perp = 1 + \beta_\perp p^2, \quad G_z = 1 + \beta_z p^2 \quad (\text{C.62})$$

où β_z et β_\perp sont les paramètres de l'OH le long de z et de \vec{r}_\perp (cf. Appendice C.7.1 de cette annexe). On voit que $G_{m_\mu\nu_\mu}$ ne dépend de l'angle φ contenu dans \vec{r}_\perp que par la phase $e^{im_\mu\varphi}$ du $\phi_{m_\mu n_{\perp\mu} n_{z\mu}}$. On peut donc écrire :

$$G_{m_\mu\nu_\mu}(\vec{r}) = e^{im_\mu\varphi} G_{|m_\mu|\nu_\mu}(\tilde{r}) \quad (\text{C.63})$$

avec

$$\boxed{G_{|m_\mu|\nu_\mu}(\tilde{r}) = \frac{(\pi p^2)^{3/2}}{G_\perp^{\frac{2n_{\perp\mu} + |m_\mu| + 2}{2}} G_z^{\frac{n_{z\mu} + 1}{2}}} \phi_{000} \left(\frac{r_\perp}{\sqrt{G_\perp}}, \frac{z}{\sqrt{G_z}} \right) \phi_{|m_\mu| n_{\perp\mu} n_{z\mu}} \left(\frac{r_\perp}{\sqrt{G_\perp}}, \frac{z}{\sqrt{G_z}} \right)} \quad (\text{C.64})$$

On a noté $\phi_{|m_\mu|\nu}(\tilde{r})$ la fonction de l'OH privée de sa phase $e^{im_\mu\varphi}$ et $\tilde{r} = (r_\perp, z)$. En reportant (C.63) dans (C.59) et en extrayant les phases des fonctions ϕ , on voit que l'intégration

sur l'angle φ implique : $m_a + m_b = m_c + m_d$ car la densité $\rho(\vec{r})$ est axiale et ne dépend que de \tilde{r} . Cette égalité n'est pas une surprise puisque l'interaction $G(r)F[\rho]$ dans (C.53) conserve \hat{J}_z . Ainsi :

$$v_{r_a r_b, r_c r_d} = \pi \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \sum_{\nu_\mu} \left[T_{m_a \nu_a, m_c \nu_c}^{\nu_\mu} \phi_{|m_b| \nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m_d| \nu_d}(\tilde{r}) + T_{m_b \nu_b, m_d \nu_d}^{\nu_\mu} \phi_{|m_a| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m_c| \nu_c}(\tilde{r}) \right] G_{|m_c - m_a| \nu_\mu}(\tilde{r}) \quad (\text{C.65})$$

Il est commode de définir :

$$\boxed{\tilde{G}_{m_a \nu_a, m_c \nu_c}(\tilde{r}) = \sum_{\nu_\mu} T_{m_a \nu_a, m_c \nu_c}^{\nu_\mu} G_{|m_c - m_a| \nu_\mu}(\tilde{r})} \quad (\text{C.66})$$

Cette quantité est symétrique en $m_a \nu_a$ et $m_c \nu_c$, et elle est invariante quand on change simultanément m_a et $-m_a$ et m_c en $-m_c$:

$$\tilde{G}_{m_a \nu_a, m_c \nu_c}(\tilde{r}) = \tilde{G}_{m_c \nu_c, m_a \nu_a}(\tilde{r}) = \tilde{G}_{-m_a \nu_a, -m_c \nu_c}(\tilde{r}) \quad (\text{C.67})$$

car le coefficient T possède les mêmes propriétés. On obtient finalement :

$$\boxed{\langle m_a \nu_a \ m_b \nu_b | G(r)F[\rho] | m_c \nu_c \ m_d \nu_d \rangle = \pi \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \left[\phi_{|m_a| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m_c| \nu_c}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m_b \nu_b, m_d \nu_d}(\tilde{r}) + \phi_{|m_b| \nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m_d| \nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m_a \nu_a, m_c \nu_c}(\tilde{r}) \right]} \quad (\text{C.68})$$

Les trois types de champs (non nuls) donnés plus haut s'écrivent alors :

$$\boxed{\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m \pm 1/2}(D) = \pi \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \sum_{m' \geq 0 \nu_b \nu_d} \left[\phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m' \nu_b, m' \nu_d}(\tilde{r}) + \phi_{|m'| \nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m'| \nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m \nu_a, m \nu_c}(\tilde{r}) \right] R_{m' \nu_d \nu_b}^q} \quad (\text{C.69})$$

avec

$$R_{m' \nu_d \nu_b}^q = \sum_{q'} [2W + B - (2H + M) \delta_{qq'}] \left[\rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' + 1/2} + \Theta(m' - 1/2) \rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' - 1/2} \right] \quad (\text{C.70})$$

$$\boxed{\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m + s}(E) = \pi \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \sum_{m' \geq 0 \nu_b \nu_d} \phi_{|m'| \nu_d}(\tilde{r}) \left\{ \left[\phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m \nu_c, m' \nu_b}(\tilde{r}) + \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m \nu_a, m' \nu_b}(\tilde{r}) \right] R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs(+)} + \left[\phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m \nu_c, -m' \nu_b}(\tilde{r}) + \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m \nu_a, -m' \nu_b}(\tilde{r}) \right] R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs(-)} \right\}} \quad (\text{C.71})$$

avec :

$$R_{m'\nu_d\nu_b}^{qs(\pm)} = \sum_{q'} \left[(M + H - (B + W)\delta_{qq'}) \Theta(m' \pm s) \rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q' m' \pm s} \right. \\ \left. + (M - B\delta_{qq'}) \Theta(m' \mp s) \rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q' m' \mp s} \right] \quad (\text{C.72})$$

$$\Gamma_{m\nu_a, m+1\nu_c}^{q\Omega=m+1/2}(E) = \pi \int d^2\tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \sum_{m' \geq 0\nu_b\nu_d} \\ \left\{ \phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m'|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m+1\nu_c, m'+1\nu_b}(\tilde{r}) + \phi_{|m+1|\nu_c}(\tilde{r}) \phi_{|m'+1|\nu_b}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m\nu_a, m'\nu_d}(\tilde{r}) \right. \\ \left. - \phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m'+1|\nu_b}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m+1\nu_c, -m'\nu_d}(\tilde{r}) - \phi_{|m+1|\nu_c}(\tilde{r}) \phi_{|m'|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m\nu_a, -m'-1\nu_b}(\tilde{r}) \right\} R_{m'\nu_d\nu_b}^{q(1)} \quad (\text{C.73})$$

avec :

$$R_{m'\nu_d\nu_b}^{q(1)} = \sum_{q'} (H - W\delta_{qq'}) \rho_{m'\nu_d, m'+1\nu_b}^{q' m'+1/2} \quad (\text{C.74})$$

On a tenu compte dans ces expressions des relations de symétrie (C.67) des \tilde{G} ainsi que, dans (C.71), de la symétrie en ν_b et ν_d de $R_{m'\nu_d\nu_b}^{qs(\pm)}$.

On vérifie que l'on retrouve bien les expressions habituelles du potentiel gaussien dans le cas où on prend $F[\rho] = 1$, c'est-à-dire $\alpha=0$ (cf. Appendice C.7.4 de cette annexe). De même, si l'on remplace $G(r)$ par $\delta(\vec{r})$ de façon à retrouver le terme densité de portée nulle habituel de l'interaction de Gogny (cf. Appendice C.7.5 de cette annexe).

C.4 Champ $\partial\Gamma$

La densité nucléaire s'écrit, compte tenu de la forme des fonctions d'onde de l'OH données en (C.9) :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\sigma\tau} \sum_{ac} \Phi_c(\vec{r}, \sigma, \tau) \rho_{ca} \Phi_a^*(\vec{r}, \sigma, \tau) = \sum_{ac} \delta_{\alpha_a\alpha_c} \phi_{r_c}(\vec{r}) \rho_{ca} \phi_{r_a}^*(\vec{r}) \quad (\text{C.75})$$

Donc :

$$\frac{\partial \hat{v}_{12}^{(a)}}{\partial \rho_{ca}} = \delta_{\alpha_a\alpha_c} \int d^3r \frac{\partial \hat{v}_{12}^{(a)}}{\partial \rho(\vec{r})} \phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_c}(\vec{r}) \quad (\text{C.76})$$

Avec la forme (C.1)-(C.2), la dérivée de l'interaction par rapport à ρ_{ca} s'obtient donc en remplaçant $F[\rho]$ par $\delta_{\alpha_a\alpha_c} F'_{r_a r_c}[\rho]$ où :

$$F'_{r_a r_c}[\rho] = \frac{\alpha}{2} \left[\phi_{r_a}^*(\vec{r}_1) [\rho(\vec{r}_1)]^{\alpha-1} \phi_{r_c}(\vec{r}_1) + \phi_{r_a}^*(\vec{r}_2) [\rho(\vec{r}_2)]^{\alpha-1} \phi_{r_c}(\vec{r}_2) \right] \quad (\text{C.77})$$

On peut alors écrire cette dérivée sous une forme analogue à (C.32) :

$$\frac{\partial \widehat{v}_{12}^{(a)}}{\partial \rho_{ca}} = \delta_{\alpha_a \alpha_c} \left(\widehat{W}_D G(r) F'_{r_a r_c}[\rho] + \widehat{W}_E G(r) F'_{r_a r_c}[\rho] \widehat{P}_r \right) \quad (\text{C.78})$$

où les parties de spin-isospin \widehat{W}_D et \widehat{W}_E sont toujours données par (C.33). On voit que le champ $\partial\Gamma_{ac}$ est diagonal en α , c'est-à-dire en s et q , donc en m . L'équation (C.25) conduit donc à :

$$\boxed{\partial\Gamma_{m\nu_a, m+1\nu_c}^{q\Omega} = 0} \quad (\text{C.79})$$

Dans le cas $m_a = m_c = m$, comme $F'_{r_a r_c}[\rho]$ ne dépend pas de $s = \Omega - m$ ni de q , le champ $\partial\Gamma$ n'en dépend pas non plus. On peut donc écrire :

$$\partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}^{q=\pm 1/2 \ \Omega=m\pm 1/2} = \frac{1}{2} \sum_{bb'dd'} \langle b'b | \left(\widehat{W}_D G(r) F'_{r_a r_c}[\rho] + \widehat{W}_E G(r) F'_{r_a r_c}[\rho] \widehat{P}_r \right) | d'd \rangle \rho_{d'b'} \rho_{db} \quad (\text{C.80})$$

avec $r_a = (m, \nu_a)$, $r_c = (m, \nu_c)$.

A ce stade, il peut être tentant d'exprimer les sommations sur b, b', d, d' de façon à faire apparaître des densités spatiales qu'il suffirait d'intégrer, comme dans le cas d'un terme densité de portée nulle. Pour le champ direct, c'est une méthode envisageable car seules des densités locales apparaissent et elles sont déjà calculées dans nos codes sur un réseau de points de Gauss. Mais, la méthode peut devenir pénible pour la composante d'échange. Il faudrait en effet exprimer les densités non locales sur un double réseau de points de Gauss, ce qui n'est pas prévu actuellement dans nos codes. Pour cette raison, on va calculer les sommes directement dans la base de l'OH, comme on le fait pour le champ Γ . Remarquons à ce propos que la composante directe du champ Γ habituel pourrait être calculée assez facilement par intégrations de densités locales.

On voit que l'on peut écrire :

$$\partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}^{q=\pm 1/2 \ \Omega=m\pm 1/2} = \frac{1}{2} \sum_{b'd'} \widetilde{\Gamma}_{b'd'}(r_a, r_c) \rho_{d'b'} \quad (\text{C.81})$$

avec :

$$\widetilde{\Gamma}_{b'd'}(r_a, r_c) = \sum_{bd} \langle b'b | \left(\widehat{W}_D G(r) F'_{r_a r_c}[\rho] + \widehat{W}_E G(r) F'_{r_a r_c}[\rho] \widehat{P}_r \right) | d'd \rangle \rho_{db} \quad (\text{C.82})$$

Cette dernière quantité se calcule comme le champ Γ avec l'interaction \widehat{v}_{12} remplacée par la parenthèse. On peut donc utiliser les expressions de la section 2. Il suffit de remplacer

$F[\rho]$ par $F'_{r_a r_c}[\rho] = F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho]$. On obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\Gamma}_{m'\nu_{b'}, m'\nu_{d'}}^{q'\Omega' = m' \pm 1/2}(r_a, r_c)(D) = \sum_{m'' \geq 0\nu_b\nu_d} \langle m'\nu_{b'} \ m''\nu_b | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | m'\nu_{d'} \ m''\nu_d \rangle R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'} \\ \tilde{\Gamma}_{m'\nu_{b'}, m'+1\nu_{d'}}^{q'\Omega' = m'+1/2}(r_a, r_c)(D) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{C.83})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\Gamma}_{m'\nu_{b'}, m'\nu_{d'}}^{q'\Omega' = m'+s'}(r_a, r_c)(E) = \sum_{m'' \geq 0\nu_b\nu_d} \left[\langle m'\nu_{b'} \ m''\nu_b | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | m''\nu_d \ m'\nu_{d'} \rangle R_{m''\nu_d\nu_b}^{q's'} \right. \\ \quad \left. + \langle m'\nu_{b'} \ -m''\nu_b | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | -m''\nu_d \ m'\nu_{d'} \rangle R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'-s'} \right] \\ \tilde{\Gamma}_{m'\nu_{b'}, m'+1\nu_{d'}}^{q'\Omega' = m'+1/2}(r_a, r_c)(E) = \sum_{m'' \geq 0\nu_b\nu_d} \left[\langle m'\nu_{b'} \ m''+1\nu_b | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | m''\nu_d \ m'+1\nu_{d'} \rangle \right. \\ \quad \left. - \langle m'\nu_{b'} \ -m''\nu_b | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | -m''-1\nu_b \ m'+1\nu_{d'} \rangle \right] R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(1)} \end{array} \right. \quad (\text{C.84})$$

où les R sont donnés par les mêmes expressions (C.41), (C.43) et (C.50) que pour le champ normal.

Reste à exprimer la trace (C.81). Soit $f(b, d)$ une fonction symétrique diagonale en Ω et q . On a :

$$T \equiv \sum_{b'd' > 0} f(b', d') = \sum_{q'\Omega' > 0} \sum_{m_{b'} = \Omega' - 1/2}^{\Omega' + 1/2} \sum_{m_{d'} = \Omega' - 1/2}^{\Omega' + 1/2} \sum_{\nu_{b'}\nu_{d'}} f_{m_{b'}, m_{d'}}^{q'\Omega'}(\nu_{b'}, \nu_{d'})$$

On pose : $g_{m_{b'}, m_{d'}}^{\Omega'} = \sum_{q'\nu_{b'}\nu_{d'}} f_{m_{b'}, m_{d'}}^{q'\Omega'}(\nu_{b'}, \nu_{d'})$. On obtient :

$$\begin{aligned} T &= \sum_{\Omega' > 0} \left(g_{\Omega' - 1/2, \Omega' - 1/2}^{\Omega'} + g_{\Omega' - 1/2, \Omega' + 1/2}^{\Omega'} + g_{\Omega' + 1/2, \Omega' - 1/2}^{\Omega'} + g_{\Omega' + 1/2, \Omega' + 1/2}^{\Omega'} \right) \\ &= \sum_{m' \geq 0} \left(g_{m', m'}^{m'+1/2} + g_{m', m'+1}^{m'+1/2} + g_{m'+1, m'}^{m'+1/2} + g_{m'+1, m'+1}^{m'+1/2} \right) \\ &= \sum_{m' \geq 0} \left(g_{m', m'}^{m'+1/2} + 2 g_{m', m'+1}^{m'+1/2} + \Theta(m' - 1/2) g_{m', m'}^{m'-1/2} \right) \\ &= \sum_{q'm' \geq 0\nu_{b'}\nu_{d'}} \left(f_{m', m'}^{q'm'+1/2}(\nu_{b'}, \nu_{d'}) + \Theta(m' - 1/2) f_{m', m'}^{q'm'-1/2}(\nu_{b'}, \nu_{d'}) + 2 f_{m', m'+1}^{q'm'+1/2}(\nu_{b'}, \nu_{d'}) \right) \end{aligned}$$

On obtient ainsi, en séparant la contribution des termes directs (C.83) et des termes d'échange (C.84) :

$$\partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}^{q=\pm 1/2 \ \Omega=m\pm 1/2} = \partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}(D) + \partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}(E) \quad (\text{C.85})$$

avec :

$$\partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}(D) = \sum_{q'm' \geq 0 \ \nu_b \nu_d} \tilde{\Gamma}_{m'\nu_b, m'\nu_d}^{q'\Omega'=m'\pm 1/2}(r_a, r_c)(D) \left(\rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q'm'+1/2} + \Theta(m'-1/2) \rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q'm'-1/2} \right) \quad (\text{C.86})$$

et

$$\begin{aligned} \partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}(E) = \sum_{q'm' \geq 0 \ \nu_b \nu_d} & \left[\tilde{\Gamma}_{m'\nu_b, m'\nu_d}^{q'\Omega'=m'+1/2}(r_a, r_c)(E) \rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q'm'+1/2} \right. \\ & + \Theta(m'-1/2) \tilde{\Gamma}_{m'\nu_b, m'\nu_d}^{q'\Omega'=m'-1/2}(r_a, r_c)(E) \rho_{m'\nu_d, m'\nu_b}^{q'm'-1/2} \\ & \left. + 2 \tilde{\Gamma}_{m'\nu_b, m'+1\nu_d}^{q'\Omega'=m'+1/2}(r_a, r_c)(E) \rho_{m'+1\nu_d, m'\nu_b}^{q'm'+1/2} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.87})$$

Dans les champs $\tilde{\Gamma}$, $F[\rho]$ est remplacé par $F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho]$, éq.(C.77). Ceci revient à remplacer $[\rho(\tilde{r})]^\alpha$ par $\alpha [\rho(\tilde{r})]^{\alpha-1} \phi_{r_a}^*(\tilde{r}) \phi_{r_c}(\tilde{r})$ dans les expressions des Γ . L'expression (C.68) des éléments de matrice spatiaux fournit alors :

$$\begin{aligned} \langle m_b \nu_b \ m_b \nu_b | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | m_d \nu_d \ m_d \nu_d \rangle &= \pi \alpha \int d^2 \tilde{r} [\rho(\tilde{r})]^{\alpha-1} \phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m|\nu_c}(\tilde{r}) \\ &\times \left[\phi_{|m_b|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m_d|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m_b \nu_b, m_d \nu_d}(\tilde{r}) + \phi_{|m_b|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m_d|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m_b \nu_b, m_d \nu_d}(\tilde{r}) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.88})$$

où les $\tilde{G}_{r_a r_c}$, symétriques en r_a et r_c sont donnés en (C.66). L'expression (C.83) du champ $\tilde{\Gamma}$ direct (diagonal en m) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{m'\nu_b, m'\nu_d}^{q'\Omega'=m'\pm 1/2}(r_a, r_c)(D) &= \pi \alpha \int d^2 \tilde{r} [\rho(\tilde{r})]^{\alpha-1} \phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m|\nu_c}(\tilde{r}) \\ &\times \sum_{m'' \geq 0 \ \nu_b \nu_d} \left[\phi_{|m'|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m'|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m''\nu_b, m''\nu_d}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m'\nu_b, m'\nu_d}(\tilde{r}) \right] R_{m''\nu_d \nu_b}^{q' s'} \end{aligned} \quad (\text{C.89})$$

et les expressions (C.84) des deux composantes du champ d'échange s'expriment par :

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{m'\nu_b, m'\nu_d}^{q'\Omega'=m'+s'}(r_a, r_c)(E) &= \pi \alpha \int d^2 \tilde{r} [\rho(\tilde{r})]^{\alpha-1} \phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m|\nu_c}(\tilde{r}) \\ &\times \sum_{m'' \geq 0 \ \nu_b \nu_d} \left[\left(\phi_{|m'|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m''\nu_b, m'\nu_d}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m'|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m'\nu_b, m''\nu_d}(\tilde{r}) \right) R_{m''\nu_d \nu_b}^{q' s' (+)} \right. \\ &\left. + \left(\phi_{|m'|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{-m''\nu_b, m'\nu_d}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m'|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m'\nu_b, -m''\nu_d}(\tilde{r}) \right) R_{m''\nu_d \nu_b}^{q' s' (-)} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.90})$$

et

$$\begin{aligned}
 \tilde{\Gamma}_{m'\nu_b, m'+1\nu_{d'}}^{q'\Omega'=m'+1/2}(r_a, r_c)(E) &= \pi\alpha \int d^2\tilde{r} [\rho(\tilde{r})]^{\alpha-1} \phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m|\nu_c}(\tilde{r}) \\
 &\times \sum_{m'' \geq 0\nu_b\nu_d} \left[\left(\phi_{|m'|\nu_b'}(\tilde{r})\phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r})\tilde{G}_{m''+1\nu_b, m'+1\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''+1|\nu_b}(\tilde{r})\phi_{|m'+1|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m'\nu_b', m''\nu_d}(\tilde{r}) \right) \right. \\
 &\left. - \left(\phi_{|m'|\nu_b'}(\tilde{r})\phi_{|m''+1|\nu_b}(\tilde{r})\tilde{G}_{-m''\nu_d, m'+1\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r})\phi_{|m'+1|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m'\nu_b', -m''-1\nu_b}(\tilde{r}) \right) \right] R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(1)}
 \end{aligned} \tag{C.91}$$

On en d duit l'expression du champ $\partial\Gamma$ direct :

$$\begin{aligned}
 \partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}(D) &= \pi\alpha \int d^2\tilde{r} [\rho(\tilde{r})]^{\alpha-1} \phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m|\nu_c}(\tilde{r}) \sum_{m' \geq 0\nu_b'\nu_{d'}} \sum_{m'' \geq 0\nu_b\nu_d} \\
 &\times \left[\phi_{|m'|\nu_b'}(\tilde{r})\phi_{|m''|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m''\nu_b, m'\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_b}(\tilde{r})\phi_{|m'|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m'\nu_b', m''\nu_d}(\tilde{r}) \right] \\
 &\times \sum_{q'} R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'} \left(\rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_b'}^{q'm'+1/2} + \Theta(m'-1/2) \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_b'}^{q'm'-1/2} \right)
 \end{aligned} \tag{C.92}$$

L'expression (C.87) du champ $\partial\Gamma$ d' change fournit d'abord :

$$\begin{aligned}
 \partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}(E) &= \pi\alpha \int d^2\tilde{r} [\rho(\tilde{r})]^{\alpha-1} \phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m|\nu_c}(\tilde{r}) \sum_{q'm' \geq 0\nu_b'\nu_{d'}} \sum_{m'' \geq 0\nu_b\nu_d} \\
 &\times \left\{ \left[\left(\phi_{|m'|\nu_b'}(\tilde{r})\phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r})\tilde{G}_{m''\nu_b, m'\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_b}(\tilde{r})\phi_{|m'|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m'\nu_b', m''\nu_d}(\tilde{r}) \right) R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(+\frac{1}{2})(+)} \right. \right. \\
 &+ \left(\phi_{|m'|\nu_b'}(\tilde{r})\phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r})\tilde{G}_{-m''\nu_b, m'\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_b}(\tilde{r})\phi_{|m'|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m'\nu_b', -m''\nu_d}(\tilde{r}) \right) R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(+\frac{1}{2})(-)} \left. \right] \\
 &\quad \times \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_b'}^{q'm'+1/2} \\
 &+ \left[\left(\phi_{|m'|\nu_b'}(\tilde{r})\phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r})\tilde{G}_{m''\nu_b, m'\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_b}(\tilde{r})\phi_{|m'|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m'\nu_b', m''\nu_d}(\tilde{r}) \right) R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(-\frac{1}{2})(+)} \right. \\
 &+ \left(\phi_{|m'|\nu_b'}(\tilde{r})\phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r})\tilde{G}_{-m''\nu_b, m'\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_b}(\tilde{r})\phi_{|m'|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m'\nu_b', -m''\nu_d}(\tilde{r}) \right) R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(-\frac{1}{2})(-)} \left. \right] \\
 &\quad \times \Theta(m'-1/2) \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_b'}^{q'm'-1/2} \\
 &+ \left[\left(\phi_{|m'|\nu_b'}(\tilde{r})\phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r})\tilde{G}_{m''+1\nu_b, m'+1\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''+1|\nu_b}(\tilde{r})\phi_{|m'+1|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m'\nu_b', m''\nu_d}(\tilde{r}) \right) \right. \\
 &\left. - \left(\phi_{|m'|\nu_b'}(\tilde{r})\phi_{|m''+1|\nu_b}(\tilde{r})\tilde{G}_{-m''\nu_d, m'+1\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r})\phi_{|m'+1|\nu_{d'}}(\tilde{r})\tilde{G}_{m'\nu_b', -m''-1\nu_b}(\tilde{r}) \right) \right] \\
 &\quad \times 2 R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(1)} \rho_{m'+1\nu_{d'}, m'\nu_b'}^{q'm'+1/2} \left. \right\}
 \end{aligned} \tag{C.93}$$

On peut arranger les parties diagonales en m' constituant les deux premiers termes de la grande accolade afin de regrouper les dépendances en q' et les produits $\phi\phi\tilde{G}$:

$$\begin{aligned}
 \partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}(E) &= \pi\alpha \int d^2\tilde{r} [\rho(\tilde{r})]^{\alpha-1} \phi_{|m|\nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m|\nu_c}(\tilde{r}) \sum_{m' \geq 0} \sum_{\nu_b, \nu_{d'}} \sum_{m'' \geq 0} \sum_{\nu_b, \nu_d} \\
 &\left\{ \phi_{|m'|\nu_{b'}}(\tilde{r}) \phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r}) \left[\tilde{G}_{m''\nu_b, m'\nu_{d'}}(\tilde{r}) \sum_{q'} \left(R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(+\frac{1}{2})(+)} \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_{b'}}^{q'm'+1/2} + R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(-\frac{1}{2})(+)} \Theta(m'-1/2) \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_{b'}}^{q'm'-1/2} \right) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \tilde{G}_{-m''\nu_b, m'\nu_{d'}}(\tilde{r}) \sum_{q'} \left(R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(+\frac{1}{2})(-)} \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_{b'}}^{q'm'+1/2} + R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(-\frac{1}{2})(-)} \Theta(m'-1/2) \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_{b'}}^{q'm'-1/2} \right) \right] \right. \\
 &+ \phi_{|m''|\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m'|\nu_{d'}}(\tilde{r}) \left[\tilde{G}_{m'\nu_{b'}, m''\nu_d}(\tilde{r}) \sum_{q'} \left(R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(+\frac{1}{2})(+)} \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_{b'}}^{q'm'+1/2} + R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(-\frac{1}{2})(+)} \Theta(m'-1/2) \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_{b'}}^{q'm'-1/2} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \tilde{G}_{m'\nu_{b'}, -m''\nu_d}(\tilde{r}) \sum_{q'} \left(R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(+\frac{1}{2})(-)} \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_{b'}}^{q'm'+1/2} + R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(-\frac{1}{2})(-)} \Theta(m'-1/2) \rho_{m'\nu_{d'}, m'\nu_{b'}}^{q'm'-1/2} \right) \right] \\
 &+ \left[\left(\phi_{|m'|\nu_{b'}}(\tilde{r}) \phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m''+1\nu_b, m'+1\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''+1\nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m'+1\nu_{d'}}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m'\nu_{b'}, m''\nu_d}(\tilde{r}) \right) \right. \\
 &\quad \left. - \left(\phi_{|m'|\nu_{b'}}(\tilde{r}) \phi_{|m''+1\nu_b}(\tilde{r}) \tilde{G}_{-m''\nu_d, m'+1\nu_{d'}}(\tilde{r}) + \phi_{|m''|\nu_d}(\tilde{r}) \phi_{|m'+1\nu_{d'}}(\tilde{r}) \tilde{G}_{m'\nu_{b'}, -m''-1\nu_b}(\tilde{r}) \right) \right] \\
 &\quad \left. \times 2 \sum_{q'} R_{m''\nu_d\nu_b}^{q'(1)} \rho_{m'+1\nu_{d'}, m'\nu_{b'}}^{q'm'+1/2} \right\}
 \end{aligned} \tag{C.94}$$

C.5 Champ Δ

On commence par éliminer dans l'expression (C.27) :

$$\Delta_{ac} = \frac{1}{2} \sum_{bd} \langle a\bar{c} | \hat{v}_{12}^{(a)} | b\bar{d} \rangle \sigma_c \sigma_d \kappa_{db}$$

l'antisymétrisation de \hat{v}_{12} . Celle-ci fournit la contribution :

$$- \sum_{bd} \langle a\bar{c} | \hat{v}_{12} | \bar{d}b \rangle \sigma_c \sigma_d \kappa_{db}$$

En changeant b en \bar{d} et d en \bar{b} , en utilisant (C.14) et la relation $\sigma_{\bar{b}} = -\sigma_b$, on obtient :

$$- \sum_{bd} \langle a\bar{c} | \hat{v}_{12} | b\bar{d} \rangle \sigma_c \sigma_{\bar{b}} \kappa_{\bar{b}d} = + \sum_{bd} \langle a\bar{c} | \hat{v}_{12} | b\bar{d} \rangle \sigma_c \sigma_b \kappa_{db} \sigma_b \sigma_d = \sum_{bd} \langle a\bar{c} | \hat{v}_{12} | b\bar{d} \rangle \sigma_c \sigma_d \kappa_{db}$$

c'est-à-dire la même contribution qu'avant antisymétrisation de \hat{v}_{12} . Le champ d'appariement peut donc encore s'écrire :

$$\Delta_{ac} = \sum_{bd} \langle a\bar{c} | \hat{v}_{12} | b\bar{d} \rangle \sigma_c \sigma_d \kappa_{db} \tag{C.95}$$

On explicite les indices en tenant compte que Δ et κ sont diagonaux en q et Ω , ce qui donne :

$$\Delta_{r_a r_c}^{q\Omega} = \sum_{q\Omega' r_b r_d} \sigma_c \sigma_d \langle q s_a m_a \nu_a \quad q - s_c - m_c \nu_c | \widehat{v}_{12} | q' s_b m_b \nu_b \quad q' - s_d - m_d \nu_d \rangle \kappa_{r_d r_b}^{q'\Omega'} \quad (\text{C.96})$$

avec $\Omega = m_a + s_a = m_c + s_c$, $\Omega' = m_b + s_b = m_d + s_d$ et $r_a = (m_a, \nu_a)$. En reprenant la notation (C.33), on a :

$$\widehat{v}_{12} = \widehat{W}_D G(r) F[\rho] \quad (\text{C.97})$$

ce qui permet de séparer les parties spin-isospin et espace dans (C.96). La partie de spin-isospin est, en y incluant la phase $\sigma_c \sigma_d = (-)^{s_c - s_d}$:

$$\begin{aligned} \sigma_c \sigma_d \langle q s_a \quad q - s_c | \widehat{W}_D | q' s_b \quad q' - s_d \rangle &= \delta_{qq'} (-)^{s_c - s_d} \langle s_a - s_c | W - H + (B - M) \widehat{P}_\sigma | s_b - s_d \rangle \\ &= \delta_{qq'} [(W - H) \delta_{s_a s_b} \delta_{s_c s_d} + (-)^{s_a + s_c} (B - M) \delta_{s_a, -s_d} \delta_{s_b, -s_c}] \end{aligned}$$

On obtient ainsi :

$$\Delta_{r_a r_c}^{q\Omega} = \sum_{\Omega' r_b r_d} \langle m_a \nu_a \quad -m_c \nu_c | G(r) F[\rho] | m_b \nu_b \quad -m_d \nu_d \rangle S_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q s_a s_c \Omega'}$$

avec :

$$S_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q s_a s_c \Omega'} = [(W - H) \delta_{\Omega', m_b + s_a} \delta_{\Omega', m_d + s_c} + (-)^{s_a + s_c} (B - M) \delta_{\Omega', m_b - s_c} \delta_{\Omega', m_d - s_a}] \kappa_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q\Omega'}$$

En échangeant les indices b et d dans les deux équations ci-dessus (mais pas dans la notation de S), on arrive à :

$$\Delta_{r_a r_c}^{q\Omega} = \sum_{\Omega' r_b r_d} \langle m_a \nu_a \quad -m_c \nu_c | G(r) F[\rho] | m_d \nu_d \quad -m_b \nu_b \rangle S_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q s_a s_c \Omega'} \quad (\text{C.98})$$

avec :

$$S_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q s_a s_c \Omega'} = [(W - H) \delta_{\Omega', m_d + s_a} \delta_{\Omega', m_b + s_c} + (-)^{s_a + s_c} (B - M) \delta_{\Omega', m_d - s_c} \delta_{\Omega', m_b - s_a}] \kappa_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q\Omega'} \quad (\text{C.99})$$

puisque κ est symétrique. L'élément de matrice de \widehat{v}_{12} dans (C.98) peut encore s'écrire :

$$\begin{aligned} \langle m_a \nu_a \quad -m_c \nu_c | G(r) F[\rho] | m_d \nu_d \quad -m_b \nu_b \rangle &= \langle m_a \nu_a \quad m_b \nu_b | G(r) F[\rho] | m_d \nu_d \quad m_c \nu_c \rangle \\ &= \langle m_a \nu_a \quad m_b \nu_b | G(r) F[\rho] \widehat{P}_r | m_c \nu_c \quad m_d \nu_d \rangle \end{aligned}$$

(car il est non antisymétrisé!), et (C.98) est équivalente à :

$$\Delta_{r_a r_c}^{q\Omega} = \sum_{\Omega' r_b r_d} \langle m_a \nu_a \quad m_b \nu_b | G(r) F[\rho] \widehat{P}_r | m_c \nu_c \quad m_d \nu_d \rangle S_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q s_a s_c \Omega'} \quad (\text{C.100})$$

Cette expression est formellement identique à celle du champ d'échange (C.35). Il suffit de remplacer $R_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q s_a s_c \Omega'}(E)$ par $S_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q s_a s_c \Omega'}$. On en déduit directement les expressions du

champ d'appariement dans les deux cas où $m_c = m_a$ et $m_c = m_a + 1$. Dans le premier cas, (C.42) fournit :

$$\Delta_{m\nu_a, m\nu_c}^{q\Omega=m+s} = \sum_{m' \geq 0} \nu_b \nu_d [\langle m\nu_a \ m'\nu_b | G(r)F[\rho] | m'\nu_d \ m\nu_c \rangle S_{m'\nu_d\nu_b}^{qs} + \langle m\nu_a \ -m'\nu_b | G(r)F[\rho] | -m'\nu_d \ m\nu_c \rangle S_{m'\nu_d\nu_b}^{q-s}] \quad (\text{C.101})$$

La quantité $S_{m'\nu_d\nu_b}^{qs}$ s'obtient à partir de (C.99) de façon analogue à $R_{m'\nu_d\nu_b}^{qs}$, éq. (C.41) p. 185 par :

$$\begin{aligned} S_{m'\nu_d\nu_b}^{qs} &= \sum_{\Omega'=m' \pm s} \Theta(\Omega') S_{m'\nu_d m'\nu_b}^{qss\Omega'} \\ &= \sum_{\Omega'=m' \pm s} \Theta(\Omega') [(W-H)\delta_{\Omega', m'+s} - (B-M)\delta_{\Omega', m'-s}] \kappa_{m'\nu_d m'\nu_b}^{q\Omega'} \end{aligned}$$

Donc :

$$S_{m'\nu_d\nu_b}^{qs} = (W-H)\Theta(m'+s)\kappa_{m'\nu_d m'\nu_b}^{qm'+s} - (B-M)\Theta(m'-s)\kappa_{m'\nu_d m'\nu_b}^{qm'-s} \quad (\text{C.102})$$

Dans le second cas, (C.51) donne :

$$\Delta_{m\nu_a, m+1\nu_c}^{q\Omega=m+1/2} = \sum_{m' \geq 0} \nu_b \nu_d [\langle m\nu_a \ m'+1\nu_b | G(r)F[\rho] | m'\nu_d \ m+1\nu_c \rangle - \langle m\nu_a \ -m'\nu_d | G(r)F[\rho] | -m'-1\nu_b \ m+1\nu_c \rangle] S_{m'\nu_d\nu_b}^{q(1)} \quad (\text{C.103})$$

où $S_{m'\nu_d\nu_b}^{q(1)}$ se calcule à partir de (C.99) comme $R_{m'\nu_d\nu_b}^{q(1)}$, éq. (C.50) p. 187 :

$$\begin{aligned} S_{m'\nu_d\nu_b}^{q(1)} &= \sum_{\Omega'=m' \pm 1/2} \Theta(\Omega') S_{m'\nu_d m'+1\nu_b}^{q\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\Omega'} \\ &= \sum_{\Omega'=m' \pm 1/2} \Theta(\Omega') [(W-H)\delta_{\Omega', m'+1/2} + (B-M)\delta_{\Omega', m'+1/2}] \kappa_{m'\nu_d m'+1\nu_b}^{q\Omega'} \end{aligned}$$

D'où :

$$S_{m'\nu_d\nu_b}^{q(1)} = (W+B-H-M)\kappa_{m'\nu_d m'+1\nu_b}^{qm'+1/2} \quad (\text{C.104})$$

C.6 Champ $\partial\Delta$

La dérivation du champ $\partial\Delta$ est très similaire à celle du champ $\partial\Gamma$ que nous avons présentée dans la partie C.4. Le champ $\partial\Delta_{ac}$ est diagonal en α , c'est-à-dire en s et q , et donc en m :

$$\partial\Delta_{m\nu_a, m+1\nu_c}^{q\Omega} = 0 \quad (\text{C.105})$$

Dans le cas $m_a=m_c=m$, $F'_{r_a r_c}[\rho]$ ne dépend ni de $s = \Omega - m$ ni de q , aussi le champ $\partial\Delta$ n'en dépend pas non plus. On peut donc écrire l'équation (C.26) sous la forme :

$$\partial\Delta_{m\nu_a, m\nu_c}^{q=\pm 1/2 \ \Omega=m\pm 1/2} = \frac{1}{4} \sum_{bb'dd'} \langle b'\bar{d}' | \left(\widehat{W}_D G(r) F'_{r_a r_c}[\rho] + \widehat{W}_E G(r) F'_{r_a r_c}[\rho] \widehat{P}_r \right) | b\bar{d} \rangle \sigma_{a'} \sigma_d \kappa_{d'b'} \kappa_{db} \quad (\text{C.106})$$

avec $r_a = (m, \nu_a)$, $r_c = (m, \nu_c)$.

Pour développer l'expression (C.106), on peut reprendre la procédure précédemment appliquée au champ $\partial\Gamma_{m\nu_a, m\nu_c}(E)$. L'expression alors obtenue est très semblable à celle explicitée en (C.87), et prend la forme suivante :

$$\partial\Delta_{m\nu_a, m\nu_c}^{q=\pm 1/2 \ \Omega=m\pm 1/2} = \sum_{q'm' \geq 0 \ \nu_b \nu_{d'}} \left[\widetilde{\Delta}_{m'\nu_b, m'\nu_{d'}}^{q'\Omega'=m'+1/2}(r_a, r_c) \kappa_{m'\nu_{d'}, m'\nu_b}^{q'm'+1/2} + \Theta(m'-1/2) \widetilde{\Delta}_{m'\nu_b, m'\nu_{d'}}^{q'\Omega'=m'-1/2}(r_a, r_c) \kappa_{m'\nu_{d'}, m'\nu_b}^{q'm'-1/2} + 2 \widetilde{\Delta}_{m'\nu_b, m'+1\nu_{d'}}^{q'\Omega'=m'+1/2}(r_a, r_c) \kappa_{m'+1\nu_{d'}, m'\nu_b}^{q'm'+1/2} \right], \quad (\text{C.107})$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} \widetilde{\Delta}_{m'\nu_b, m'\nu_{d'}}^{q'\Omega'=m'+s'}(r_a, r_c) = \sum_{m'' \geq 0 \ \nu_b \nu_d} \left[\langle m'\nu_b \ -m'\nu_{d'} | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | m''\nu_b \ -m''\nu_d \rangle S_{m''\nu_d \nu_b}^{q's'} + \langle m'\nu_b \ -m'\nu_{d'} | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | -m''\nu_b \ m''\nu_d \rangle S_{m''\nu_d \nu_b}^{q'-s'} \right] \\ \widetilde{\Delta}_{m'\nu_b, m'+1\nu_{d'}}^{q'\Omega'=m'+1/2}(r_a, r_c) = \sum_{m'' \geq 0 \ \nu_b \nu_d} \left[\langle m'\nu_b \ -m'-1\nu_{d'} | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | m''\nu_d \ -m''-1\nu_b \rangle - \langle m'\nu_b \ -m'-1\nu_{d'} | G(r) F'_{m\nu_a, m\nu_c}[\rho] | -m''-1\nu_b \ m''\nu_d \rangle \right] S_{m''\nu_d \nu_b}^{q'(1)} \end{array} \right. \quad (\text{C.108})$$

où les S sont donnés par les mêmes expressions (C.102) et (C.104) que pour le champ d'appariement normal.

C.7 Appendices de l'annexe C

C.7.1 Fonctions de l'oscillateur harmonique et fonctions génératrices en symétrie axiale

Les fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique axial sont notées :

$$\phi_{r_a}(\vec{r}) = \phi_{m_a n_{\perp a}}(\vec{r}_{\perp}) \phi_{n_{za}}(z) \quad (\text{C.109})$$

On suppose qu'elles ont pour paramètres

$$\beta_{\perp} = \frac{M\omega_{\perp}}{\hbar} \simeq \frac{\hbar\omega_{\perp}}{41.47}, \quad \beta_z = \frac{M\omega_z}{\hbar} \simeq \frac{\hbar\omega_z}{41.47} \quad (\text{C.110})$$

le long de z et \vec{r}_{\perp} respectivement avec M la masse du nucléon. On posera souvent $\nu_a = (m_a, n_{\perp a})$.

Les deux fonctions d'onde dans le membre de droite de (C.109) sont :

$$\begin{cases} \phi_{mn}(\vec{r}_{\perp}) = \left(\frac{\beta_{\perp}}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{n!}{(n+|m|)!}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\beta_{\perp}r_{\perp}^2} (r_{\perp}\sqrt{\beta_{\perp}})^{|m|} L_n^{|m|}(\beta_{\perp}r_{\perp}^2) e^{im\varphi} \\ \phi_n(z) = \left(\frac{\beta_z}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{(2^n n!)^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}\beta_z z^2} H_n(z\sqrt{\beta_z}) \end{cases} \quad (\text{C.111})$$

où les L sont les polynômes de Laguerre et les H sont les polynômes de Hermite. Ce sont des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique respectivement à $N = 2$ et à $N = 1$ dimensions.

On a les cas particuliers :

$$\begin{cases} \phi_{00}(\vec{r}_{\perp}) = \left(\frac{\beta_{\perp}}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\beta_{\perp}r_{\perp}^2} \\ \phi_0(z) = \left(\frac{\beta_z}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\beta_z z^2} \end{cases} \quad (\text{C.112})$$

Les fonctions génératrices de ces fonctions sont :

$$\begin{cases} \chi_{mn_{\perp}}(\vec{t}_{\perp}) = \mathcal{N}_{mn_{\perp}} t_{\perp}^{2n_{\perp}+|m|} e^{im\varphi t}, & \mathcal{N}_{mn_{\perp}} = \frac{(-)^{n_{\perp}}}{(n_{\perp}!(n_{\perp}+|m|)!)^{1/2}} \\ \chi_{n_z}(t_z) = \mathcal{N}_{n_z} t_z^{n_z}, & \mathcal{N}_{n_z} = \left(\frac{2^{n_z}}{n_z!}\right)^{1/2} \end{cases} \quad (\text{C.113})$$

Leur propriété fondamentale, valable pour $N = 1, 2$ s'écrit :

$$\sum_{(n)} \chi_{(n)}^*(\vec{t}) \phi_{(n)}(\vec{r}, \beta) = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{N/4} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta r^2 + 2\vec{t}\vec{r}\sqrt{\beta} - t^2\right) \quad (\text{C.114})$$

Leurs autres propriétés sont :

$$\begin{aligned}
 \sum_{(n)} \chi_{(n)}^*(\vec{t}_1) \chi_{(n)}(\vec{t}_2) &= e^{2\vec{t}_1 \vec{t}_2} \\
 \chi_{(1)}(\vec{t}) \chi_{(2)}(\vec{t}) &= \sum_{(3)} [1 + 2 = 3] \chi_{(3)}(\vec{t}) \\
 \chi_{(3)}(\vec{t}_1 + \vec{t}_2) &= \sum_{(1)(2)} [1 + 2 = 3] \chi_{(1)}(\vec{t}_1) \chi_{(2)}(\vec{t}_2)
 \end{aligned} \tag{C.115}$$

avec :

$$\begin{aligned}
 [1 + 2 = 3] &= \frac{\mathcal{N}_{(1)} \mathcal{N}_{(2)}}{\mathcal{N}_{(3)}} \delta_{(3),(1)+(2)} \\
 \text{où } \delta_{(3),(1)+(2)} &\equiv \begin{cases} \delta_{m_3, m_1+m_2} \delta_{X_3, X_1+X_2}, & X = 2n_{\perp} + |m| \\ \delta_{n_{z3}, n_{z1}+n_{z2}} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{C.116}$$

et :

$$\begin{aligned}
 t^{2p} \chi_{(n)}(\vec{t}) &= \frac{\mathcal{N}_{(n)}}{\mathcal{N}_{(n)+p}} \chi_{(n)+p}(\vec{t}), & (n) + p &= \begin{cases} (m, n_{\perp} + p) \\ n_z + 2p \end{cases} \\
 \chi_{(n)}(a\vec{t}) &= a^{X_{(n)}} \chi_{(n)}(\vec{t}), & X_{(n)} &= \begin{cases} 2n_{\perp} + |m| \\ n_z \end{cases}
 \end{aligned} \tag{C.117}$$

C.7.2 Expression des T en axial

Ce sont les coefficients T tels que :

$$\phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_c}(\vec{r}) = \sum_{r_{\mu}} T_{r_a, r_c}^{r_{\mu}} \phi_0(\vec{r}) \phi_{r_{\mu}}(\vec{r}) \tag{C.118}$$

Etant donnée la forme (C.109) des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique, les T sont le produit de deux coefficients indépendants, l'un relatif à la direction $\vec{r}_{\perp} = (r_{\perp} \cos \varphi, r_{\perp} \sin \varphi)$ avec $r_{\perp} = \sqrt{x^2 + y^2}$, l'autre à la direction z .

Pour trouver ces T , on utilise les fonctions génératrices de l'Appendice C.7.1. On peut supposer les fonctions de l'oscillateur harmonique toutes de paramètre unité, puisque le nombre et les arguments des fonctions dans les deux membres de (C.118) sont les mêmes. On effectue un traitement unifié pour les fonctions d'onde de dimensions $N = 1$ et $N = 2$.

D'après (C.114) :

$$\sum_{(a)(c)} \chi_{(a)}(\vec{t}_1) \phi_{(a)}^*(\vec{r}) \chi_{(c)}^*(\vec{t}_2) \phi_{(c)}(\vec{r}) = \pi^{-N/2} e^{-r^2} + 2(\vec{t}_1 + \vec{t}_2)\vec{r} - \vec{t}_1^2 - \vec{t}_2^2 \quad (\text{C.119})$$

Le second membre vaut encore, en utilisant (C.115) de façon répétée :

$$\begin{aligned} & \pi^{-N/4} \phi_{(0)}(\vec{r}) e^{2\vec{t}_1\vec{t}_2} e^{-\frac{1}{2}r^2 + 2(\vec{t}_1 + \vec{t}_2)\vec{r} - (\vec{t}_1^2 + \vec{t}_2^2)^2} \\ &= \phi_{(0)}(\vec{r}) e^{2\vec{t}_1\vec{t}_2} \sum_{(3)} \chi_{(3)}^*(\vec{t}_1 + \vec{t}_2) \phi_{(3)}(\vec{r}) \\ &= \phi_{(0)}(\vec{r}) \sum_{(4)} \chi_{(4)}(\vec{t}_1) \chi_{(4)}^*(\vec{t}_2) \sum_{(3)(5)(6)} [5 + 6 = 3] \chi_{(5)}^*(\vec{t}_1) \chi_{(6)}^*(\vec{t}_2) \phi_{(3)}(\vec{r}) \\ &= \phi_{(0)}(\vec{r}) \sum_{(3)(4)(5)(6)} [5 + 6 = 3] \sum_{(7)(8)} [4 + \bar{5} = 7] \chi_{(7)}(\vec{t}_1) [4 + 6 = 8] \chi_{(8)}^*(\vec{t}_2) \phi_{(3)}(\vec{r}) \end{aligned}$$

où l'on a posé :

$$\bar{5} = \begin{cases} (-m_5, n_{\perp 5}) \\ n_{z5} \end{cases} \quad (\text{C.120})$$

En identifiant avec le premier membre de (C.119), on trouve (C.118) avec :

$$T_{(a)(c)}^{(\mu)} = \sum_{(4)(5)(6)} [5 + 6 = \mu][4 + \bar{5} = a][4 + 6 = c] \quad (\text{C.121})$$

En explicitant les crochets avec (C.116), on obtient les conditions :

$$(4) + \bar{(5)} = (a), \quad (4) + (6) = (c), \quad (5) + (6) = (\mu)$$

qui impliquent :

$$(5) = \bar{(a)} - \bar{(4)}, \quad (6) = (c) - (4) \quad (\mu) = \bar{(a)} + (c) - \bar{(4)} - (4) \quad (\text{C.122})$$

et seule reste dans (C.121) la sommation sur (4).

C.7.2.1 Expression des T radiaux

Les conditions (C.122) donnent dans ce cas, avec $X = 2n_{\perp} + |m|$:

$$\begin{cases} X_5 = X_a - X_4, & X_6 = X_c - X_4, & X_{\mu} = X_a + X_c - 2X_4 \\ m_5 = -m_a + m_4, & m_6 = m_c - m_4, & m_{\mu} = -m_a + m_c \end{cases} \quad (\text{C.123})$$

Les trois premières égalités impliquent :

$$X_4 = \frac{X_a + X_c - X_\mu}{2}, \quad X_5 = \frac{X_a - X_c + X_\mu}{2}, \quad X_6 = \frac{X_c - X_a + X_\mu}{2}, \quad (\text{C.124})$$

quantités qui doivent toutes être positives, ce qui nécessite, en adjoignant la sixième égalité :

$$\boxed{|X_a - X_c| \leq X_\mu \leq X_a + X_c, \quad m_\mu = m_c - m_a} \quad (\text{C.125})$$

Le coefficient T est donc nul si ces conditions ne sont pas satisfaites. Elles impliquent notamment :

$$\boxed{\frac{|X_a - X_c| - |m_c - m_a|}{2} \leq n_{\perp\mu} \leq \frac{X_a + X_c - |m_c - m_a|}{2}} \quad (\text{C.126})$$

(les valeurs inférieure et supérieure sont nécessairement des entiers).

Pour expliciter le coefficient T , notons que toutes les sommes dans (C.121) s'en vont à l'exception de m_4 . En insérant les valeurs des crochets (C.116), on obtient alors :

$$T_{(a)(c)}^{(\mu)} = \sum_{m_4} \frac{\mathcal{N}_{(4)}^2 \mathcal{N}_{(5)}^2 \mathcal{N}_{(6)}^2}{\mathcal{N}_{(a)} \mathcal{N}_{(c)} \mathcal{N}_{(\mu)}} \quad (\text{C.127})$$

avec, d'après (C.113) :

$$\mathcal{N} = \frac{(-)^{n_\perp}}{(n_\perp! (n_\perp + |m|)!)^{1/2}} = \frac{(-)^{n_\perp}}{\left[\left(\frac{X+m}{2} \right)! \left(\frac{X-m}{2} \right)! \right]^{1/2}} \quad (\text{C.128})$$

ce qui donne, en remplaçant m_4 par $-m$:

$$\boxed{T_{m_a n_{\perp a}, m_c n_{\perp c}}^{n_{\perp\mu}} = [n_{\perp a}! (n_{\perp a} + |m_a|)! n_{\perp c}! (n_{\perp c} + |m_c|)! n_{\perp\mu}! (n_{\perp\mu} + |m_c - m_a|)!]^{1/2} \sum_m \left[\left(\frac{X+m}{2} \right)! \left(\frac{X-m}{2} \right)! \left(\frac{X'_a + m + m_a}{2} \right)! \left(\frac{X'_a - m - m_a}{2} \right)! \left(\frac{X'_c + m + m_c}{2} \right)! \left(\frac{X'_c - m - m_c}{2} \right)! \right]^{-1}} \quad (\text{C.129})$$

avec

$$X = \frac{X_a + X_c - X_\mu}{2}, \quad X'_a = \frac{X_a - X_c + X_\mu}{2}, \quad X'_c = \frac{X_c - X_a + X_\mu}{2} \quad (\text{C.130})$$

Les X , X'_a , X'_c sont forcément entiers. La somme sur m est limitée par les arguments des factorielles qui doivent être entiers et positifs ou nuls, ce qui donne :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Max}(-X, -X'_a - m_a, -X'_c - m_c) \leq m \leq \text{Min}(X, X'_a - m_a, X'_c - m_c) \\ m \text{ de la parité de } X \end{array} \right. \quad (\text{C.131})$$

Ces coefficients T permettent ainsi d'écrire la relation :

$$\boxed{\phi_{m_a n_{\perp a}}^*(\vec{r}_{\perp}) \phi_{m_c n_{\perp c}}(\vec{r}_{\perp}) = \sum_{n_{\perp \mu}} T_{m_a n_{\perp a}, m_c n_{\perp c}}^{n_{\perp \mu}} \phi_{00}(\vec{r}_{\perp}) \phi_{m_c - m_a n_{\perp \mu}}(\vec{r}_{\perp})} \quad (\text{C.132})$$

où la somme sur $n_{\perp \mu}$ est limitée par (C.126).

Notons que les coefficients T sont invariants quand on change simultanément m_a en $-m_a$ et m_c en $-m_c$. Pour des valeurs absolues de m_a et m_c données il en existe donc deux sortes :

- les $T_{m_a n_{\perp a}, m_c n_{\perp c}}^{n_{\perp \mu}} = T_{-m_a n_{\perp a}, -m_c n_{\perp c}}^{n_{\perp \mu}}$
- les $T_{m_a n_{\perp a}, -m_c n_{\perp c}}^{n_{\perp \mu}} = T_{-m_a n_{\perp a}, m_c n_{\perp c}}^{n_{\perp \mu}}$.

C.7.2.2 Expression des T relatif à z

Les conditions (C.122) donnent dans ce cas :

$$n_{z5} = n_{za} - n_{z4}, \quad n_{z6} = n_{zc} - n_{z4}, \quad n_{z\mu} = n_{za} + n_{zc} - 2n_{z4} \quad (\text{C.133})$$

ce qui implique :

$$n_{z4} = \frac{n_{za} + n_{zc} - n_{z\mu}}{2}, \quad n_{z5} = \frac{n_{za} - n_{zc} + n_{z\mu}}{2}, \quad n_{z6} = \frac{n_{zc} - n_{za} + n_{z\mu}}{2} \quad (\text{C.134})$$

Ces quantités doivent toutes être positives, ce qui nécessite :

$$\boxed{|n_{za} - n_{zc}| \leq n_{z\mu} \leq n_{za} + n_{zc}, \quad n_{z\mu} \text{ de la parité de } n_{za} \pm n_{zc}} \quad (\text{C.135})$$

Le coefficient T correspondant est nul si ces conditions ne sont pas satisfaites.

Pour expliciter ce coefficient, remarquons que toutes les sommes dans (C.121) disparaissent. En insérant les valeurs des crochets (C.116), on obtient :

$$T_{(a)(c)}^{(\mu)} = \frac{\mathcal{N}_{(4)}^2 \mathcal{N}_{(5)}^2 \mathcal{N}_{(6)}^2}{\mathcal{N}_{(a)} \mathcal{N}_{(c)} \mathcal{N}_{(\mu)}} \quad (\text{C.136})$$

avec, d'après (C.113) :

$$\mathcal{N} = \left(\frac{2^{n_z}}{n_z!} \right)^{1/2}$$

ce qui donne (noter que $n_{za} + n_{zc} + n_{z\mu} = 2(n_{z4} + n_{z5} + n_{z6})$) :

$$T_{n_{za}n_{zc}}^{n_{z\mu}} = \frac{(n_{za}! n_{zc}! n_{z\mu}!)^{1/2}}{\left(\frac{n_{za} + n_{zc} - n_{z\mu}}{2} \right)! \left(\frac{n_{za} - n_{zc} + n_{z\mu}}{2} \right)! \left(\frac{n_{zc} - n_{za} + n_{z\mu}}{2} \right)!} \quad (\text{C.137})$$

Ainsi, fonctions d'onde (C.112) vérifient la relation :

$$\phi_{n_{za}}(z) \phi_{n_{zc}}(z) = \sum_{n_{z\mu}=|n_{za}-n_{zc}|}^{n_{za}+n_{zc}} T_{n_{za}n_{zc}}^{n_{z\mu}} \phi_0(z) \phi_{n_{z\mu}}(z) \quad (\text{C.138})$$

avec $n_{z\mu}$ de la parité de $n_{za} \pm n_{zc}$.

Finalement, en revenant à l'expression (C.118), on obtient :

$$\phi_{m_a n_{\perp a} n_{za}}^*(\vec{r}) \phi_{m_c n_{\perp c} n_{zc}}(\vec{r}) = \sum_{n_{\perp \mu}} \sum_{n_{z\mu}=|n_{za}-n_{zc}|}^{n_{za}+n_{zc}} T_{m_a n_{\perp a}, m_c n_{\perp c}}^{n_{\perp \mu}} T_{n_{za} n_{zc}}^{n_{z\mu}} \phi_{000}(\vec{r}) \phi_{m_c - m_a n_{\perp \mu} n_{z\mu}}(\vec{r}) \quad (\text{C.139})$$

où les limites de la sommation sur $n_{\perp \mu}$ sont données par (C.126).

C.7.3 Expression des $G_{m_\mu \nu_\mu}(\vec{r})$

On a

$$G_{m_\mu \nu_\mu}(\vec{r}) = \int d^3 r' G(|\vec{r} - \vec{r}'|) \phi_{00}(\vec{r}') \phi_{m_\mu \nu_\mu}(\vec{r}') \quad (\text{C.140})$$

avec $G(r) = e^{-r^2/p^2}$. Comme les fonctions ϕ et la gaussienne se séparent en produits le long de \vec{r}'_{\perp} et de z , l'intégrale est le produit de deux intégrales, l'une en \vec{r}'_{\perp} , l'autre en z :

$$G_{m_\mu \nu_\mu}(\vec{r}) = G_{m_\mu n_{\perp \mu}}^{(2)}(\vec{r}'_{\perp}) G_{n_{z\mu}}^{(1)}(z) \quad (\text{C.141})$$

On note chacune des deux fonctions à droite :

$$G_{\mu}^{(N)}(\vec{r}) = \int d^N r' G(|\vec{r} - \vec{r}'|) \phi_0(\vec{r}') \phi_{\mu}(\vec{r}') \quad (\text{C.142})$$

où, cette fois, \vec{r} et les ϕ sont relatifs à N dimensions. Dans cette expression, les ϕ sont supposées être des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique de paramètre β , avec $\beta = \beta_z = M\omega_z/\hbar$ pour $N = 1$ et $\beta = \beta_{\perp} = M\omega_{\perp}/\hbar$ pour $N = 2$.

Comme

$$\phi_\mu(\vec{r}) = \beta^{N/4} \psi_\mu(\vec{r}\sqrt{\beta}) \quad (\text{C.143})$$

où ψ est une fonction d'onde de l'oscillateur harmonique de paramètre unité, on a :

$$G_\mu^{(N)}(\vec{r}) = \beta^{N/4} \int d^N r' e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{p^2}} \psi_0(\vec{r}'\sqrt{\beta}) \psi_\mu(\vec{r}'\sqrt{\beta})$$

ou encore, en posant $\vec{u} = \vec{r}\sqrt{\beta}$ et $\vec{u}' = \vec{r}'\sqrt{\beta}$,

$$G_\mu^{(N)}(\vec{u}/\sqrt{\beta}) = \int d^N u' e^{-\frac{(\vec{u}-\vec{u}')^2}{\beta p^2}} \psi_0(\vec{u}') \psi_\mu(\vec{u}') \quad (\text{C.144})$$

On calcule les deux $G^{(N)}$ simultanément en utilisant les fonctions génératrices $\chi_\mu^*(\vec{t})$ des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique de dimensions $N = 1, 2$:

$$\sum_\mu \chi_\mu^*(\vec{t}) \psi_\mu(\vec{u}) = \pi^{-N/4} e^{-\frac{1}{2}u^2 + 2\vec{t}\vec{u} - \vec{t}^2} \quad (\text{C.145})$$

Ceci permet d'écrire, puisque $\psi_0(\vec{u}') = \pi^{-N/4} e^{-\frac{1}{2}u'^2}$,

$$\sum_\mu \chi_\mu^*(\vec{t}) G_\mu^{(N)}(\vec{u}/\sqrt{\beta}) = \pi^{-N/2} \int d^N u' e^{-\frac{(\vec{u}-\vec{u}')^2}{\beta p^2}} e^{-u'^2 + 2\vec{t}\vec{u}' - \vec{t}^2} \quad (\text{C.146})$$

L'intégrale s'effectue facilement. On pose :

$$g = 1 + \beta p^2 \quad (\text{C.147})$$

Les exposants des exponentielles, une fois regroupés, valent :

$$\begin{aligned} & -u'^2 \frac{g}{\beta p^2} + 2\vec{u}' \left(\vec{t} + \frac{\vec{u}}{\beta p^2} \right) - \frac{\vec{u}'^2}{\beta p^2} - \vec{t}^2 \\ & = - \left(\vec{u}' \sqrt{\frac{g}{\beta p^2}} - \sqrt{\frac{\beta p^2}{g}} \left(\vec{t} + \frac{\vec{u}}{\beta p^2} \right) \right)^2 - \frac{1}{g} (\vec{u}^2 - 2\vec{t}\vec{u} + \vec{t}^2) \end{aligned}$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} \sum_\mu \chi_\mu^*(\vec{t}) G_\mu^{(N)}(\vec{u}/\sqrt{\beta}) & = \left(\frac{g}{\beta p^2} \right)^{-N/2} e^{-\frac{\vec{u}^2}{g} + 2\frac{\vec{t}\vec{u}}{g} - \frac{\vec{t}^2}{g}} \\ & = \left(\frac{\beta p^2}{g} \right)^{N/2} e^{-\frac{\vec{u}^2}{2g}} \pi^{N/4} \sum_\mu \chi_\mu^* \left(\frac{\vec{t}}{\sqrt{g}} \right) \psi_\mu \left(\frac{\vec{u}}{\sqrt{g}} \right) \end{aligned}$$

où l'on a réutilisé (C.145). Or $\chi_\mu^* \left(\frac{\vec{t}}{\sqrt{g}} \right) = \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \right)^{X_\mu} \chi_\mu^*(\vec{t})$ avec

$$X_\mu = 2n_{\perp\mu} + |m_\mu| \text{ si } N = 2 \text{ et } \quad X_\mu = n_{z\mu} \text{ si } N = 1 \quad (\text{C.148})$$

On en déduit :

$$G_\mu^{(N)}(\vec{u}/\sqrt{\beta}) = \left(\frac{\sqrt{\pi}\beta p^2}{g}\right)^{N/2} \left(\frac{1}{\sqrt{g}}\right)^{X_\mu} e^{-\frac{\vec{u}^2}{2g}} \psi_\mu\left(\frac{\vec{u}}{\sqrt{g}}\right) \quad (\text{C.149})$$

ce qui donne, en revenant à la variable \vec{r} et aux fonctions de l'OH ϕ de paramètre β :

$$G_\mu^{(N)}(\vec{r}) = \left(\frac{\pi p^2}{g}\right)^{N/2} g^{-X_\mu/2} \phi_0\left(\frac{\vec{r}}{\sqrt{g}}\right) \phi_\mu\left(\frac{\vec{r}}{\sqrt{g}}\right) \quad (\text{C.150})$$

Les G relatifs à \vec{r}_\perp sont donc (en précisant en second argument les paramètres d'oscillateur des ϕ) :

$$G_{m_\mu n_\perp \mu}^{(2)}(\vec{r}_\perp) = \frac{\pi p^2}{G_\perp} G_\perp^{-n_\perp \mu - |m_\mu|/2} \phi_{00}\left(\frac{\vec{r}_\perp}{\sqrt{G_\perp}}, \beta_\perp\right) \phi_{m_\mu n_\perp \mu}\left(\frac{\vec{r}_\perp}{\sqrt{G_\perp}}, \beta_\perp\right) \quad (\text{C.151})$$

$$G_{n_z \mu}^{(1)}(z) = \left(\frac{\pi p^2}{G_z}\right)^{1/2} G_z^{-n_z \mu/2} \phi_0\left(\frac{z}{\sqrt{G_z}}, \beta_z\right) \phi_{n_z \mu}\left(\frac{z}{\sqrt{G_z}}, \beta_z\right) \quad (\text{C.152})$$

avec

$$\boxed{G_\perp = 1 + \beta_\perp p^2, \quad G_z = 1 + \beta_z p^2} \quad (\text{C.153})$$

ce qui donne finalement :

$$\boxed{G_{m_\mu \nu_\mu}(\vec{r}) = \frac{(\pi p^2)^{3/2}}{G_\perp^{\frac{2n_\perp \mu + |m_\mu| + 2}{2}} G_z^{\frac{n_z \mu + 1}{2}}} \phi_{000}\left(\frac{\vec{r}_\perp}{\sqrt{G_\perp}}, \frac{z}{\sqrt{G_z}}\right) \phi_{m_\mu n_\perp \mu n_z \mu}\left(\frac{\vec{r}_\perp}{\sqrt{G_\perp}}, \frac{z}{\sqrt{G_z}}\right)} \quad (\text{C.154})$$

où les ϕ ont implicitement les paramètres β_\perp et β_z de la base de l'OH.

C.7.4 Cas où $F[\rho] = 1$

On doit retrouver dans ce cas les expressions du champ central gaussien traditionnel.

On commence par redériver celles-ci.

On pose :

$$G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \exp\left(-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{p^2}\right) \quad (\text{C.155})$$

et l'on cherche à calculer (avec $r_a = (m_a, \nu_a)$) :

$$v_{r_a r_b, r_c r_d} \equiv \langle r_a r_b | G | r_c r_d \rangle = \iint d^3 r_1 d^3 r_2 \phi_{r_a}^*(\vec{r}_1) \phi_{r_b}^*(\vec{r}_2) G(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \phi_{r_c}(\vec{r}_1) \phi_{r_d}(\vec{r}_2) \quad (\text{C.156})$$

D'après l'Appendice C.7.2 :

$$\phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_c}(\vec{r}) = \sum_{\nu_\mu} T_{r_a, r_c}^{\nu_\mu} \phi_{00}(\vec{r}) \phi_{r_\mu}(\vec{r}) \quad \text{avec } m_\mu = m_c - m_a \quad (\text{C.157})$$

On applique (C.157) aux produits de fonctions d'onde de mêmes arguments dans (C.156), ce qui donne :

$$v_{r_a r_b, r_c r_d} = \sum_{\nu \mu \nu'} T_{r_a, r_c}^{\nu \mu} T_{r_b, r_d}^{\nu' \mu'} \langle 00 | G | r_\mu r_{\mu'} \rangle \quad (\text{C.158})$$

avec

$$m_\mu = m_c - m_a, \quad m_{\mu'} = m_d - m_b \quad (\text{C.159})$$

et :

$$\langle 00 | G | r_\mu r_{\mu'} \rangle = \iint d^3 r_1 d^3 r_2 \phi_0(\vec{r}_1) \phi_0(\vec{r}_2) G(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \phi_{r_\mu}(\vec{r}_1) \phi_{r_{\mu'}}(\vec{r}_2) \quad (\text{C.160})$$

On utilise maintenant la relation de Moshinsky (C.217) :

$$\phi_{r_\mu}(\vec{r}_1) \phi_{r_{\mu'}}(\vec{r}_2) = \sum_{r_\lambda r_\sigma} M_{r_\mu r_{\mu'}, r_\lambda r_\sigma} \phi_{r_\lambda}(\vec{r}) \phi_{r_\sigma}(\vec{R}) \quad \text{avec } \vec{r} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{\sqrt{2}}, \quad \vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.161})$$

aux produits de fonctions d'onde d'arguments \vec{r}_1 et \vec{r}_2 dans (C.160) :

$$\langle 00 | G | r_\mu r_{\mu'} \rangle = \sum_{r_\lambda r_\sigma} M_{r_\mu r_{\mu'}, r_\lambda r_\sigma} \int d^3 r \int d^3 R \phi_0(\vec{r}) \phi_0(\vec{R}) G(\vec{r}\sqrt{2}) \phi_{r_\lambda}(\vec{r}) \phi_{r_\sigma}(\vec{R}) \quad (\text{C.162})$$

car $M_{00, r_\lambda r_\sigma} = \delta_{r_\lambda, 0} \delta_{r_\sigma, 0}$ et le Jacobien du changement de variables (C.161) vaut 1. Ainsi :

$$\langle 00 | G | r_\mu r_{\mu'} \rangle = \sum_{r_\lambda} M_{r_\mu r_{\mu'}, r_\lambda 0} \int d^3 r \phi_0(\vec{r}) G(\vec{r}\sqrt{2}) \phi_{r_\lambda}(\vec{r}) \equiv \sum_{\lambda} M_{r_\mu r_{\mu'}, r_\lambda 0} K_{r_\lambda} \quad (\text{C.163})$$

L'intégrale K_{r_λ} s'effectue facilement. Elle se factorise en une intégrale $K_\lambda^{(2)}$ à $N = 2$ dimensions en \vec{r}_\perp et une intégrale $K_\lambda^{(1)}$ à $N = 1$ dimension en z . On calcule les deux simultanément avec les fonctions génératrices de l'Appendice C.7.1.

En introduisant les fonctions d'onde de l'OH de paramètre unité ψ , on a

$$\phi_\mu(\vec{r}) = \beta^{N/4} \psi_\mu(\vec{r}\sqrt{\beta}) \quad (\text{C.164})$$

où β vaut β_\perp si $N = 2$ et β_z si $N = 1$. Donc :

$$K_\lambda^{(N)} = \beta^{N/2} \int d^N r \psi_0(\vec{r}\sqrt{\beta}) G(\vec{r}\sqrt{2}) \psi_\lambda(\vec{r}\sqrt{\beta}) = \int d^N u \psi_0(\vec{u}) G(\vec{u}\sqrt{\frac{2}{\beta}}) \psi_\lambda(\vec{u}) \quad (\text{C.165})$$

Avec (C.114) :

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda} \chi_\lambda^*(\vec{t}) K_\lambda^{(N)} &= \pi^{-N/4} \int d^N u \psi_0(\vec{u}) G(\vec{u}\sqrt{\frac{2}{\beta}}) e^{-\frac{1}{2}\vec{u}^2 + 2\vec{t}\vec{u} - \vec{t}^2} \\ &= \pi^{-N/2} \int d^N u e^{-\vec{u}^2 + 2\vec{t}\vec{u} - \vec{t}^2} e^{-2\vec{u}^2/(\beta p^2)} \end{aligned} \quad (\text{C.166})$$

L'exposant de l'exponentielle est :

$$-\left(\vec{u}\sqrt{\frac{2+\beta p^2}{\beta p^2}} - \vec{t}\sqrt{\frac{\beta p^2}{2+\beta p^2}}\right)^2 - \frac{2\vec{t}^2}{2+\beta p^2}$$

Le second membre de (C.166) est donc égal à

$$\left(\frac{\beta p^2}{2+\beta p^2}\right)^{N/2} e^{-\frac{2\vec{t}^2}{2+\beta p^2}} = \left(\frac{\beta p^2}{2+\beta p^2}\right)^{N/2} \sum_{n=0} \frac{(-)^n}{n!} \left(\frac{2}{2+\beta p^2}\right)^n \vec{t}^{2n} \quad (\text{C.167})$$

La définition (C.115) des fonctions génératrices montre que

$$\vec{t}^{2n} = \begin{cases} \frac{\chi_{(0n)}(\vec{t})}{\mathcal{N}_{(0n)}} & \text{si } N = 2 \\ \frac{\chi_{2n}(t)}{\mathcal{N}_{2n}} & \text{si } N = 1 \end{cases} \quad (\text{C.168})$$

Dans le cas $N = 1$, (C.166) s'écrit ainsi :

$$\sum_{n_{z\lambda}} \chi_{n_{z\lambda}}(t) K_{n_{z\lambda}}^{(1)} = \left(\frac{\beta_z p^2}{2+\beta_z p^2}\right)^{1/2} \sum_{n=0} \frac{(-)^n}{n!} \left(\frac{2}{2+\beta_z p^2}\right)^n \frac{\chi_{2n}(t)}{\mathcal{N}_{2n}} \quad (\text{C.169})$$

Donc $K_{n_{z\lambda}}^{(1)}$ est nul si $n_{z\lambda}$ est impair et, s'il est pair :

$$K_{n_{z\lambda}}^{(1)} = \left(\frac{\beta_z p^2}{2+\beta_z p^2}\right)^{1/2} \frac{(-)^{n_{z\lambda}/2}}{(n_{z\lambda}/2)!} \left(\frac{2}{2+\beta_z p^2}\right)^{n_{z\lambda}/2} \left(\frac{n_{z\lambda}!}{2^{n_{z\lambda}}}\right)^{1/2}$$

ou encore :

$$K_{n_{z\lambda}}^{(1)} = \frac{(-)^{n_{z\lambda}/2} p\sqrt{\beta_z} \sqrt{n_{z\lambda}!}}{(2+\beta_z p^2)^{(n_{z\lambda}+1)/2} (n_{z\lambda}/2)!} \quad (\text{C.170})$$

Dans le cas $N = 2$, (C.166) s'écrit :

$$\sum_{\lambda} \chi_{\lambda}^*(\vec{t}) K_{\lambda}^{(2)} = \frac{\beta_{\perp} p^2}{2+\beta_{\perp} p^2} \sum_{n=0} \frac{(-)^n}{n!} \left(\frac{2}{2+\beta_{\perp} p^2}\right)^n \frac{\chi_{(0n)}(\vec{t})}{\mathcal{N}_{(0n)}} \quad (\text{C.171})$$

Donc $K_{\lambda}^{(2)}$ n'est non nul que si $m_{\lambda} = 0$. Dans ce cas on obtient :

$$K_{0n_{\perp\lambda}}^{(2)} = \frac{\beta_{\perp} p^2}{2+\beta_{\perp} p^2} \frac{(-)^{n_{\perp\lambda}}}{n_{\perp\lambda}!} \left(\frac{2}{2+\beta_{\perp} p^2}\right)^{n_{\perp\lambda}} (-)^{n_{\perp\lambda}} n_{\perp\lambda}!$$

c'est-à-dire :

$$K_{0n_{\perp\lambda}}^{(2)} = \frac{\beta_{\perp} p^2 2^{n_{\perp\lambda}}}{(2+\beta_{\perp} p^2)^{n_{\perp\lambda}+1}} \quad (\text{C.172})$$

Finalement :

$$K_\lambda = \delta_{m_\lambda,0} \frac{\beta_\perp p^2 2^{n_\perp \lambda}}{(2 + \beta_\perp p^2)^{n_\perp \lambda + 1}} \frac{(-)^{n_{z\lambda}/2} p \sqrt{\beta_z}}{(2 + \beta_z p^2)^{(n_{z\lambda}+1)/2}} \frac{\sqrt{n_{z\lambda}!}}{(n_{z\lambda}/2)!} \quad (\text{C.173})$$

Pour obtenir l'expression de $\langle 00|G|r_\mu r_{\mu'}\rangle$ avec (C.163), il faut connaître les $M_{r_\mu r_{\mu'}, r_\lambda 0}$. Ces derniers sont calculés dans l'Appendice C.7.6. le résultats est :

$$M_{r_\mu r_{\mu'}, r_\lambda 0} = \delta_{m_\lambda, m_\mu + m_{\mu'}} \delta_{X_\lambda, X_\mu + X_{\mu'}} (-)^{\frac{|m_\mu| - |m_{\mu'}| - |m_\mu + m_{\mu'}|}{2}} \left[\frac{2^{-X_\mu - X_{\mu'}} n_{\perp \lambda}! (n_{\perp \lambda} + |m_\mu + m_{\mu'}|)!}{n_{\perp \mu}! (n_{\perp \mu} + |m_\mu|)! n_{\perp \mu'}! (n_{\perp \mu'} + |m_{\mu'}|)!} \right]^{1/2} \\ \times \delta_{n_{z\lambda}, n_{z\mu} + n_{z\mu'}} (-)^{n_{z\mu'}} \left[\frac{(n_{z\mu} + n_{z\mu'})!}{2^{n_{z\mu} + n_{z\mu'}} n_{z\mu}! n_{z\mu'}!} \right]^{1/2} \quad (\text{C.174})$$

On arrive alors à :

$$\langle 00|G|r_\mu r_{\mu'}\rangle = \frac{\delta_{m_\mu + m_{\mu'}, 0} \beta_\perp p^2}{(2 + \beta_\perp p^2)^{n_\perp \mu + n_\perp \mu' + |m_\mu| + 1}} \frac{(n_\perp \mu + n_\perp \mu' + |m_\mu|)!}{\left[n_{\perp \mu}! (n_{\perp \mu} + |m_\mu|)! n_{\perp \mu'}! (n_{\perp \mu'} + |m_{\mu'}|)! \right]^{1/2}} \\ \times \frac{(-)^{(n_{z\mu} - n_{z\mu'})/2} p \sqrt{\beta_z}}{(2 + \beta_z p^2)^{(n_{z\mu} + n_{z\mu'} + 1)/2}} \frac{(n_{z\mu} + n_{z\mu'})!}{\left[(n_{z\mu} + n_{z\mu'})/2 \right]!} \sqrt{\frac{2^{-n_{z\mu} - n_{z\mu'}}}{n_{z\mu}! n_{z\mu'}!}} \quad (\text{C.175})$$

où la première ligne est l'élément de matrice radial et la seconde l'élément de matrice en z .

On vérifie maintenant que l'on obtient bien (C.177) en posant $F[\rho] = 1$ dans (C.59). Cette équation s'écrit en prenant $\alpha = 0$:

$$v_{r_a r_b, r_c r_d} = \frac{1}{2} \sum_{\nu_\mu} \int d^3 r \left[\phi_{m_a \nu_a}^*(\vec{r}) \phi_{m_c \nu_c}(\vec{r}) T_{r_b, r_d}^{\nu_\mu} G_{m_d - m_b, \nu_\mu}(\vec{r}) \right. \\ \left. + \phi_{m_b \nu_b}^*(\vec{r}) \phi_{m_d \nu_d}(\vec{r}) T_{r_a, r_c}^{\nu_\mu} G_{m_c - m_a, \nu_\mu}(\vec{r}) \right] \quad (\text{C.176})$$

où les $G_{m_\mu \nu_\mu}$ sont donnés par (C.60) :

$$G_{m_\mu \nu_\mu}(\vec{r}) = \int d^3 r' G(|\vec{r} - \vec{r}'|) \phi_{00}(\vec{r}') \phi_{m_\mu \nu_\mu}(\vec{r}') \quad (\text{C.177})$$

La relation de composition (C.157), appliquée à (C.176) fournit avec la définition (C.159) pour m_μ et $m_{\mu'}$:

$$v_{r_a r_b, r_c r_d} = \frac{1}{2} \sum_{\nu_\mu \nu_{\mu'}} T_{r_a r_c}^{\nu_\mu} T_{r_b r_d}^{\nu_{\mu'}} \int d^3 r \left[\phi_0(\vec{r}) \phi_{r_\mu}(\vec{r}) G_{r_{\mu'}}(\vec{r}) + \phi_0(\vec{r}) \phi_{\mu'}(\vec{r}) G_{r_\mu}(\vec{r}) \right] \quad (\text{C.178})$$

Compte tenu de (C.158), il faut montrer que :

$$\frac{1}{2} \int d^3r \left[\phi_0(\vec{r}) \phi_{r_\mu}(\vec{r}) G_{r_{\mu'}}(\vec{r}) + \phi_0(\vec{r}) \phi_{r_{\mu'}}(\vec{r}) G_{r_\mu}(\vec{r}) \right] = \langle 00 | G | r_\mu r_{\mu'} \rangle \quad (\text{C.179})$$

ou encore, en posant :

$$I_{r_\mu r_{\mu'}} = \int d^3r \phi_0(\vec{r}) \phi_{r_\mu}(\vec{r}) G_{r_{\mu'}}(\vec{r}) \quad (\text{C.180})$$

$$\frac{1}{2} \left(I_{r_\mu r_{\mu'}} + I_{r_{\mu'} r_\mu} \right) = \langle 00 | G | r_\mu r_{\mu'} \rangle \quad (\text{C.181})$$

Or l'intégrale (C.180) se sépare selon \vec{r}_\perp et z . En reprenant les notations de l'Appendice C.7.3, on peut l'écrire, pour chaque composante :

$$I_{\mu\mu'}^{(N)} = \int d^N r \phi_0(\vec{r}) \phi_\mu^*(\vec{r}) G_{\mu'}^{(N)}(\vec{r}) \quad (\text{C.182})$$

c'est-à-dire avec (C.143) et un changement de variable d'intégration :

$$I_{\mu\mu'}^{(N)} = \int d^N u \psi_0(\vec{u}) \psi_\mu^*(\vec{u}) G_{\mu'}^{(N)}(\vec{u}/\sqrt{\beta}) \quad (\text{C.183})$$

En insérant (C.149), on obtient :

$$I_{\mu\mu'}^{(N)} = \left(\frac{\beta p^2}{g} \right)^{N/2} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \right)^{X'_\mu} J_{\mu\mu'} \quad (\text{C.184})$$

avec :

$$J_{\mu\mu'} = \int d^N u e^{-\frac{\vec{u}^2}{2}} e^{-\frac{\vec{u}^2}{2g}} \psi_\mu^*(\vec{u}) \psi_{\mu'} \left(\frac{\vec{u}}{\sqrt{g}} \right) \quad (\text{C.185})$$

Cette dernière intégrale se calcule facilement avec les fonctions génératrices des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique. En utilisant (C.114), on a :

$$\sum_{\mu\mu'} \chi_\mu(\vec{t}) \chi_{\mu'}^*(\vec{t}') J_{\mu\mu'} = \pi^{-N/2} \int d^N u e^{-u^2 \left(1 + \frac{1}{g} \right) + 2 \left(\vec{t} + \frac{\vec{t}'}{\sqrt{g}} \right) \vec{u} - \vec{t}^2 - \vec{t}'^2} \quad (\text{C.186})$$

L'intégrale au second membre est immédiate. L'exposant de l'exponentielle est :

$$- \left[\vec{u} \sqrt{\frac{1+g}{g}} - \sqrt{\frac{g}{1+g}} \left(\vec{t} + \frac{\vec{t}'}{\sqrt{g}} \right) \right]^2 - \left[\frac{\vec{t}}{\sqrt{1+g}} - \vec{t}' \sqrt{\frac{g}{1+g}} \right]^2$$

Donc :

$$\sum_{\mu\mu'} \chi_\mu(\vec{t}) \chi_{\mu'}^*(\vec{t}') J_{\mu\mu'} = \left(\frac{g}{1+g} \right)^{N/2} e^{-\vec{T}^2} = \left(\frac{g}{1+g} \right)^{N/2} \sum_{n=0} \frac{(-)^n}{n!} \vec{T}^{2n} \quad (\text{C.187})$$

avec

$$\vec{T} = \frac{\vec{t}}{\sqrt{1+g}} - \vec{t} \sqrt{\frac{g}{1+g}} \quad (\text{C.188})$$

La définition (C.115) des fonctions génératrices montre que

$$\vec{T}^{2n} = \begin{cases} \frac{\chi_{(0n)}(\vec{T})}{\mathcal{N}_{(0n)}} & \text{si } N = 2 \\ \frac{\chi_{2n}(T)}{\mathcal{N}_{2n}} & \text{si } N = 1 \end{cases} \quad (\text{C.189})$$

Dans le cas $N = 1$, (C.187) s'écrit ainsi :

$$\sum_{n_{z\mu} n_{z\mu'}} \chi_{n_{z\mu}}(t) \chi_{n_{z\mu'}}(t') J_{n_{z\mu} n_{z\mu'}} = \left(\frac{G_z}{1+G_z} \right)^{1/2} \sum_{n=0} \frac{(-)^n \chi_{2n}(T)}{n! \mathcal{N}_{2n}} \quad (\text{C.190})$$

En utilisant les relations (C.115),(C.116) (C.117), on a :

$$\begin{aligned} \chi_{2n}(T) &= \sum_{n_1 n_2} [n_1 + n_2 = 2n] \left(\frac{1}{\sqrt{1+G_z}} \right)^{n_1} \left(-\sqrt{\frac{G_z}{1+G_z}} \right)^{n_2} \chi_{n_1}(t) \chi_{n_2}(t') \\ &= \sum_{n_1 n_2} \delta_{n_1+n_2, 2n} \frac{\mathcal{N}_{n_1} \mathcal{N}_{n_2}}{\mathcal{N}_{2n}} \left(\frac{1}{\sqrt{1+G_z}} \right)^{n_1} \left(-\sqrt{\frac{G_z}{1+G_z}} \right)^{n_2} \chi_{n_1}(t) \chi_{n_2}(t') \end{aligned}$$

Le second membre de (C.190) est donc :

$$\left(\frac{G_z}{1+G_z} \right)^{1/2} \sum_{n_1 n_2} \frac{(-)^{(n_1+n_2)/2}}{((n_1+n_2)/2)!} \frac{\mathcal{N}_{n_1} \mathcal{N}_{n_2}}{(\mathcal{N}_{n_1+n_2})^2} \frac{(-)^{n_2} G_z^{n_2/2}}{(1+G_z)^{(n_1+n_2)/2}} \chi_{n_1}(t) \chi_{n_2}(t') \quad (\text{C.191})$$

En identifiant avec le premier membre, on obtient :

$$J_{n_{z\mu} n_{z\mu'}} = \left(\frac{G_z}{1+G_z} \right)^{1/2} \frac{(-)^{(n_{z\mu}+n_{z\mu'})/2}}{((n_{z\mu}+n_{z\mu'})/2)!} \frac{\mathcal{N}_{n_{z\mu}} \mathcal{N}_{n_{z\mu'}}}{(\mathcal{N}_{n_{z\mu}+n_{z\mu'}})^2} \frac{(-)^{n_{z\mu'}} G_z^{n_{z\mu}'/2}}{(1+G_z)^{(n_{z\mu}+n_{z\mu'})/2}} \quad (\text{C.192})$$

ce qui donne en utilisant (C.113) :

$$J_{n_{z\mu} n_{z\mu'}} = (-)^{\frac{n_{z\mu}-n_{z\mu'}}{2}} \frac{G_z^{(n_{z\mu}'+1)/2}}{(1+G_z)^{(n_{z\mu}+n_{z\mu}'+1)/2}} \frac{(n_{z\mu}+n_{z\mu}')!}{((n_{z\mu}+n_{z\mu}')/2)!} \frac{1}{2^{(n_{z\mu}+n_{z\mu}')/2} \sqrt{n_{z\mu}! n_{z\mu}'!}} \quad (\text{C.193})$$

Finalement (C.184) fournit :

$$I_{n_{z\mu} n_{z\mu'}}^{(1)} = \left(\frac{\beta p^2}{G_z} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\sqrt{G_z}} \right)^{n_{z\mu}'} J_{n_{z\mu} n_{z\mu}'}$$

c'est-à-dire :

$$I_{n_{z\mu}n_{z\mu'}}^{(1)} = (-)^{\frac{n_{z\mu} - n_{z\mu'}}{2}} \sqrt{\frac{2^{-n_{z\mu} - n_{z\mu'}}}{n_{z\mu}!n_{z\mu'}!}} \frac{(n_{z\mu} + n_{z\mu'})!}{((n_{z\mu} + n_{z\mu'})/2)!} \frac{p\sqrt{\beta_z}}{(1 + G_z)^{(n_{z\mu} + n_{z\mu'} + 1)/2}} \quad (\text{C.194})$$

Dans le cas $N = 2$, (C.187) s'écrit :

$$\sum_{m_\mu n_{\perp\mu} m'_\mu n_{\perp\mu'}} \chi_{m_\mu n_{\perp\mu}}(\vec{t}) \chi_{m'_\mu n_{\perp\mu'}}^*(\vec{t}') J_{m_\mu n_{\perp\mu} m'_\mu n_{\perp\mu'}} = \frac{G_\perp}{1 + G_\perp} \sum_{n=0} \frac{(-)^n}{n!} \frac{\chi_{(0n)}(\vec{T})}{\mathcal{N}_{(0n)}} \quad (\text{C.195})$$

En utilisant les relations (C.115),(C.116) (C.117) :

$$\begin{aligned} \chi_{(0n)}(\vec{T}) &= \sum_{(1)(2)} [(1) + (2) = (0n)] \left(\frac{1}{\sqrt{1 + G_\perp}} \right)^{X_1} \left(-\sqrt{\frac{G_\perp}{1 + G_\perp}} \right)^{X_2} \chi_{(1)}(\vec{t}) \chi_{(2)}(\vec{t}') \\ &= \sum_{(1)(2)} \delta_{(1)+(2),(0n)} \frac{\mathcal{N}_{(1)}\mathcal{N}_{(2)}}{\mathcal{N}_{(0n)}} \left(\frac{1}{\sqrt{1 + G_\perp}} \right)^{X_1} \left(-\sqrt{\frac{G_\perp}{1 + G_\perp}} \right)^{X_2} \chi_{(1)}(\vec{t}) \chi_{(2)}(\vec{t}') \end{aligned}$$

Le δ dans la somme implique $m_1 + m_2 = 0$ et $2n_{\perp 1} + |m_1| + 2n_{\perp 2} + |m_2| = 2n$, donc : $m_1 = -m_2$ et $n = n_{\perp 1} + n_{\perp 2} + |m_1|$. Le second membre de (C.195) s'écrit donc :

$$\frac{G_\perp}{1 + G_\perp} \sum_{m_1 n_{\perp 1} n_{\perp 2}} \frac{(-)^{n_{\perp 1} + n_{\perp 2} + |m_1|}}{(n_{\perp 1} + n_{\perp 2} + |m_1|)!} \frac{\mathcal{N}_{(1)}\mathcal{N}_{(2)}}{(\mathcal{N}_{(0, n_{\perp 1} + n_{\perp 2} + |m_1|)})^2} \frac{(-)^{X_2} G_\perp^{X_2/2}}{(1 + G_\perp)^{(X_1 + X_2)/2}} \chi_{(1)}(\vec{t}) \chi_{(2)}^*(\vec{t}') \quad (\text{C.196})$$

avec $(2) = (-m_1, n_{\perp 2})$. En identifiant avec le premier membre de (C.195), on obtient :

$$J_{m_\mu n_{\perp\mu} m'_\mu n_{\perp\mu'}} = \delta_{m_\mu, -m'_\mu} \frac{G_\perp}{1 + G_\perp} \frac{(-)^{n_{\perp\mu} + n_{\perp\mu'} + |m_\mu|}}{(n_{\perp\mu} + n_{\perp\mu'} + |m_\mu|)!} \frac{\mathcal{N}_\mu \mathcal{N}_{\mu'}}{(\mathcal{N}_{(0, n_{\perp\mu} + n_{\perp\mu'} + |m_\mu|)})^2} \frac{(-)^{X'_\mu} G_\perp^{X'_\mu/2}}{(1 + G_\perp)^{(X_\mu + X_{\mu'})/2}} \quad (\text{C.197})$$

ce qui donne en utilisant (C.113) :

$$J_{m_\mu n_{\perp\mu} m'_\mu n_{\perp\mu'}} = \delta_{m_\mu, -m'_\mu} \frac{G_\perp^{X'_\mu/2+1}}{(1 + G_\perp)^{n_{\perp\mu} + n_{\perp\mu'} + |m_\mu| + 1}} \frac{(n_{\perp\mu} + n_{\perp\mu'} + |m_\mu|)!}{\left[n_{\perp\mu}! (n_{\perp\mu} + |m_\mu|)! n_{\perp\mu'}! (n_{\perp\mu'} + |m_\mu|)! \right]^{1/2}} \quad (\text{C.198})$$

La relation (C.184) fournit alors :

$$I_{m_\mu n_{\perp\mu} m'_\mu n_{\perp\mu'}}^{(2)} = \frac{\beta_\perp p^2}{G_\perp} \left(\frac{1}{\sqrt{G_\perp}} \right)^{X'_\mu} J_{\mu\mu'}$$

c'est-à-dire :

$$I_{m_\mu n_{\perp\mu} m'_\mu n_{\perp\mu'}}^{(2)} = \delta_{m_\mu, -m'_\mu} \frac{\beta_\perp p^2}{(1 + G_\perp)^{n_{\perp\mu} + n_{\perp\mu'} + |m_\mu| + 1}} \frac{(n_{\perp\mu} + n_{\perp\mu'} + |m_\mu|)!}{\left[n_{\perp\mu}! (n_{\perp\mu} + |m_\mu|)! n_{\perp\mu'}! (n_{\perp\mu'} + |m_\mu|)! \right]^{1/2}} \quad (\text{C.199})$$

Finalement :

$$\begin{aligned}
 I_{r_\mu r_{\mu'}} &= \delta_{m_\mu, -m_{\mu'}} \frac{\beta_\perp p^2}{(1 + G_\perp)^{n_{\perp\mu} + n_{\perp\mu'} + |m_\mu| + 1}} \frac{(n_{\perp\mu} + n_{\perp\mu'} + |m_\mu|)!}{\left[n_{\perp\mu}! (n_{\perp\mu} + |m_\mu|)! n_{\perp\mu'}! (n_{\perp\mu'} + |m_\mu|)! \right]^{1/2}} \\
 &\times (-)^{\frac{n_{z\mu} - n_{z\mu'}}{2}} \frac{p\sqrt{\beta_z}}{(1 + G_z)^{(n_{z\mu} + n_{z\mu'} + 1)/2}} \sqrt{\frac{2^{-n_{z\mu} - n_{z\mu'}}}{n_{z\mu}! n_{z\mu'}!}} \frac{(n_{z\mu} + n_{z\mu'})!}{((n_{z\mu} + n_{z\mu'})/2)!}
 \end{aligned} \tag{C.200}$$

avec $G_\perp = 1 + \beta_\perp p^2$, $G_z = 1 + \beta_z p^2$.

On voit que $I_{r_\mu r_{\mu'}}$ est symétrique en r_μ et $r_{\mu'}$ et égal à l'expression (C.175) de $\langle 00 | G | r_\mu r_{\mu'} \rangle$. L'équation (C.181) est donc vérifiée, et on retrouve bien l'expression habituelle des éléments de matrice d'une gaussienne pour $F[\rho] = 1$.

C.7.5 Cas où $G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$

Les définitions (C.1)-(C.2) montrent que $F[\rho] = [\rho(\vec{r})]^\alpha$ et, par conséquent :

$$\hat{v}_{12} = (W + B\hat{P}_\sigma - H\hat{P}_\tau - M\hat{P}_\sigma\hat{P}_\tau)[\rho(\vec{r})]^\alpha \delta(\vec{r})$$

L'équation (C.60) donne pour $G_{r_\mu}(\vec{r})$ l'expression simple :

$$G_{r_\mu}(\vec{r}) = \phi_0(\vec{r}) \phi_{r_\mu}(\vec{r}) \tag{C.201}$$

On retrouve cette expression également à partir de l'expression analytique (C.64) à la limite où la portée p de la gaussienne tend vers zéro. Comme $\exp(-r^2/p^2) \sim (p\sqrt{\pi})^3 \delta(\vec{r})$ quand $p \rightarrow 0$, le remplacement de $G(r)$ par $\delta(\vec{r})$ élimine de (C.64) le facteur $(\pi p^2)^{3/2}$. D'autre part, $G_\perp = G_z = 1$ et on voit que (C.64) redonne exactement (C.201). Avec cette expression de G , (C.59) s'écrit :

$$\begin{aligned}
 v_{r_a r_b, r_c r_d} &= \frac{1}{2} \int d^3 r \rho^\alpha(\vec{r}) \sum_{\nu_\mu} \left[\phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_c}(\vec{r}) T_{m_b \nu_b, m_d \nu_d}^{\nu_\mu} \phi_0(\vec{r}) \phi_{m_d - m_b, \nu_\mu}(\vec{r}) \right. \\
 &\quad \left. + \phi_{r_b}^*(\vec{r}) \phi_{r_d}(\vec{r}) T_{m_a \nu_a, m_c \nu_c}^{\nu_\mu} \phi_0(\vec{r}) \phi_{m_c - m_a, \nu_\mu}(\vec{r}) \right]
 \end{aligned} \tag{C.202}$$

En utilisant en sens inverse la relation de composition des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique de l'Appendice C.7.2, on trouve simplement :

$$\begin{aligned}
 v_{r_a r_b, r_c r_d} &= \frac{1}{2} \int d^3 r \rho^\alpha(\vec{r}) \left[\phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_c}(\vec{r}) \phi_{r_b}^*(\vec{r}) \phi_{r_d}(\vec{r}) + \phi_{m_a \nu_b}^*(\vec{r}) \phi_{m_d \nu_d}(\vec{r}) \phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_c}(\vec{r}) \right] \\
 &= \int d^3 r \rho^\alpha(\vec{r}) \phi_{r_a}^*(\vec{r}) \phi_{r_b}^*(\vec{r}) \phi_{r_c}(\vec{r}) \phi_{r_d}(\vec{r})
 \end{aligned} \tag{C.203}$$

ce qui est exactement la définition de l'élément de matrice spatial de \widehat{v}_{12} dans le cas présent.

On note que dans ce cas, l'expression (C.66) fournit :

$$\widetilde{G}_{m_a \nu_a, m_c \nu_c}(\tilde{r}) = \sum_{\nu_\mu} T_{m_a \nu_a, m_c \nu_c}^{\nu_\mu} \phi_0(\tilde{r}) \phi_{|m_c - m_a|, \nu_\mu}(\tilde{r}) = \phi_{|m_a|, \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m_c|, \nu_c}(\tilde{r}) \quad (\text{C.204})$$

L'expression (C.73) du champ d'échange non diagonal en m s'annule alors identiquement. Le champ d'échange diagonal en m (C.71) devient :

$$\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m + s}(E) = 2\pi \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \sum_{m' \geq 0 \nu_b \nu_d} \phi_{|m'| \nu_d}(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m'| \nu_b}(\tilde{r}) \left(R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs(+)} + R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs(-)} \right) \quad (\text{C.205})$$

et l'on a d'après (C.72) :

$$R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs(+)} + R_{m' \nu_d \nu_b}^{qs(-)} = \sum_{q'} (2M + H - (2B + W) \delta_{qq'}) \left(\Theta(m' + s) \rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' + s} + \Theta(m' - s) \rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' - s} \right) \quad (\text{C.206})$$

Cette expression est invariante quand on change s en $-s$, et on peut remplacer s par $1/2$. On retrouve ainsi l'expression (C.70) de $R_{m' \nu_d \nu_b}^q$, à condition de changer (W, B, H, M) en (M, H, B, W) . Autrement dit, avec ce changement, le champ d'échange (C.71) a la même expression que le champ direct (C.69). Ceci n'est pas surprenant car le champ d'échange s'obtient en remplaçant l'interaction \widehat{v}_{12} par $-\widehat{P}_\sigma \widehat{P}_\tau \widehat{v}_{12}$, puisque ici, l'interaction étant de portée nulle, on peut prendre $\widehat{P}_r = 1$. Il suffit donc de calculer le champ direct. Le champ d'échange s'en déduira immédiatement avec la substitution ci-dessus.

Le champ direct est donné par (C.69) qui s'écrit ici :

$$\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m \pm 1/2}(D) = 2\pi \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \sum_{m' \geq 0 \nu_b \nu_d} \phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \phi_{|m'| \nu_b}(\tilde{r}) \phi_{|m'| \nu_d}(\tilde{r}) R_{m' \nu_d \nu_b}^q \quad (\text{C.207})$$

avec

$$R_{m' \nu_d \nu_b}^q = \sum_{q'} [2W + B - (2H + M) \delta_{qq'}] \left[\rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' + 1/2} + \Theta(m' - 1/2) \rho_{m' \nu_d, m' \nu_b}^{q' m' - 1/2} \right] \quad (\text{C.208})$$

Or la densité de particules de type q est :

$$\begin{aligned} \rho^q(\tilde{r}) &= \sum_{bd} \sum_{\sigma} \phi_d(\vec{r}, \sigma) \rho_{db}^q \phi_b^*(\vec{r}, \sigma) \\ &= 2 \sum_{\substack{\Omega > 0 m_b m_d \\ \nu_b \nu_d}} \sum_{\sigma} \phi_{m_d \nu_d}(\vec{r}) \chi_{1/2}^{\Omega - m_d}(\sigma) \rho_{m_d \nu_d m_b \nu_b}^{q \Omega} \phi_{m_b \nu_b}^*(\vec{r}) \chi_{1/2}^{\Omega - m_b}(\sigma) \end{aligned} \quad (\text{C.209})$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned}
 \rho^q(\vec{r}) &= 2 \sum_{\substack{\Omega > 0 \\ \nu_b \nu_d}} \phi_{m' \nu_d}(\vec{r}) \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q \Omega} \phi_{m' \nu_b}^*(\vec{r}) = 2 \sum_{\substack{m' s \nu_b \nu_d \\ (m' + s > 0)}} \phi_{m' \nu_d}(\vec{r}) \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q m' + s} \phi_{m' \nu_b}^*(\vec{r}) \\
 &= 2 \sum_{m' \geq 0 \nu_b \nu_d} \phi_{|m'| \nu_d}(\vec{r}) \phi_{|m'| \nu_b}(\vec{r}) \left(\rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q m' + 1/2} + \Theta(m' - 1/2) \rho_{m' \nu_d m' \nu_b}^{q m' - 1/2} \right)
 \end{aligned} \tag{C.210}$$

On voit que (C.207) s'écrit alors :

$$\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m \pm 1/2}(D) = \pi \sum_{q'} \left(2W + B - (2H + M) \delta_{qq'} \right) \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \rho^{q'}(\tilde{r}) \tag{C.211}$$

Le champ d'échange est d'après la discussion ci-dessus :

$$\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m \pm 1/2}(E) = \pi \sum_{q'} \left(2M + H - (2B + W) \delta_{qq'} \right) \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \rho^{q'}(\tilde{r}) \tag{C.212}$$

et la somme des deux est :

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m \pm 1/2} &= \pi \sum_{q'} \left(2W + 2M + B + H - (W + M + 2B + 2H) \delta_{qq'} \right) \\
 &\quad \times \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \rho^{q'}(\tilde{r}) \\
 &= \pi \int d^2 \tilde{r} \rho^\alpha(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_a}(\tilde{r}) \phi_{|m| \nu_c}(\tilde{r}) \\
 &\quad \times \left[(2W + 2M + B + H) \rho(\tilde{r}) - (W + M + 2B + 2H) \rho^q(\tilde{r}) \right]
 \end{aligned} \tag{C.213}$$

ce qui peut aussi s'écrire :

$$\boxed{\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m \pm 1/2} = \frac{1}{2} \langle \phi_{m \nu_a} | \rho^\alpha(\vec{r}) \left[(2W + 2M + B + H) \rho(\vec{r}) - (W + M + 2B + 2H) \rho^q(\vec{r}) \right] | \phi_{m \nu_c} \rangle} \tag{C.214}$$

Dans la force de Gogny traditionnelle, le terme densité est tel que

$$W = t_0, \quad B = t_0 x_0, \quad H = M = 0 \tag{C.215}$$

et l'expression ci-dessus donne :

$$\Gamma_{m \nu_a, m \nu_c}^{q \Omega = m \pm 1/2} = t_0 \langle \phi_{m \nu_a} | \rho^\alpha(\vec{r}) \left[(1 + x_0/2) \rho(\vec{r}) - (x_0 + 1/2) \rho^q(\vec{r}) \right] | \phi_{m \nu_c} \rangle \tag{C.216}$$

ce qui est bien le résultat habituel.

C.7.6 Coefficients de Moshinsky en symétrie axiale

Ce sont les coefficients M tels que :

$$\phi_\mu(\vec{r}_1)\phi_\nu(\vec{r}_2) = \sum_{\lambda\sigma} M_{\mu\nu,\lambda\sigma} \phi_\lambda(\vec{r})\phi_\sigma(\vec{R}) \quad (\text{C.217})$$

avec :

$$\vec{r} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{\sqrt{2}}, \quad \vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.218})$$

Pour trouver les M , on utilise les fonctions génératrices de l'Appendice C.7.1. On peut supposer les fonctions de l'oscillateur harmonique toutes de paramètre unité, puisque le nombre et les arguments des fonctions dans les deux membres de (C.217) sont les mêmes. Etant donnée la forme (C.109) des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique, ces coefficients sont le produit de deux coefficients indépendants, l'un relatif à la direction $\vec{r}_\perp = (r_\perp \cos \varphi, r_\perp \sin \varphi)$ avec $r_\perp = \sqrt{x^2 + y^2}$, l'autre à la direction z . C'est bien ce que l'on trouvera à la fin.

D'après (C.114) :

$$\sum_{(\mu)(\nu)} \chi_{(\mu)}^*(\vec{t}_1) \chi_{(\nu)}^*(\vec{t}_2) \phi_{(\mu)}(\vec{r}_1) \phi_{(\nu)}(\vec{r}_2) = \pi^{-N/2} e^{-\frac{1}{2}(\vec{r}_1^2 + \vec{r}_2^2) + 2(\vec{t}_1\vec{r}_1 + \vec{t}_2\vec{r}_2) - \vec{t}_1^2 - \vec{t}_2^2} \quad (\text{C.219})$$

On pose :

$$\vec{t} = \frac{\vec{t}_1 - \vec{t}_2}{\sqrt{2}}, \quad \vec{T} = \frac{\vec{t}_1 + \vec{t}_2}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.220})$$

L'exposant de l'exponentielle dans (C.219) vaut alors :

$$-\frac{1}{2}(\vec{r}^2 + \vec{R}^2) + 2(\vec{t}\vec{r} + \vec{R}\vec{T}) - \vec{t}^2 - \vec{T}^2$$

et le second membre de (C.219) s'écrit :

$$\sum_{(\lambda)(\sigma)} \chi_{(\lambda)}^*(\vec{t}) \chi_{(\sigma)}^*(\vec{T}) \phi_{(\lambda)}(\vec{r}) \phi_{(\sigma)}(\vec{R}) \quad (\text{C.221})$$

Le coefficient M doit donc vérifier :

$$\sum_{(\mu)(\nu)} \chi_{(\mu)}(\vec{t}_1) \chi_{(\nu)}(\vec{t}_2) M_{\mu\nu,\lambda\sigma}^* = \chi_{(\lambda)}(\vec{t}) \chi_{(\sigma)}(\vec{T}) \quad (\text{C.222})$$

Or, en utilisant (C.115) et (C.117), le second membre de (C.222) s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \chi_{(\lambda)} \left(\frac{\vec{t}_1 - \vec{t}_2}{\sqrt{2}} \right) \chi_{(\sigma)} \left(\frac{\vec{t}_1 + \vec{t}_2}{\sqrt{2}} \right) &= \sum_{(1)(2)(3)(4)} [1 + 2 = \lambda] [3 + 4 = \sigma] \\
 &\quad \times \chi_{(1)} \left(\frac{\vec{t}_1}{\sqrt{2}} \right) \chi_{(2)} \left(-\frac{\vec{t}_2}{\sqrt{2}} \right) \chi_{(3)} \left(\frac{\vec{t}_1}{\sqrt{2}} \right) \chi_{(4)} \left(\frac{\vec{t}_2}{\sqrt{2}} \right) \\
 &= \sum_{(1)(2)(3)(4)(5)(6)} (-)^{X_2} [1 + 2 = \lambda] [3 + 4 = \sigma] [1 + 3 = 5] [2 + 4 = 6] \chi_{(5)} \left(\frac{\vec{t}_1}{\sqrt{2}} \right) \chi_{(6)} \left(\frac{\vec{t}_2}{\sqrt{2}} \right) \\
 &= \sum_{(1)(2)(3)(4)(5)(6)} \frac{(-)^{X_2}}{2^{(X_5+X_6)/2}} [1 + 2 = \lambda] [3 + 4 = \sigma] [1 + 3 = 5] [2 + 4 = 6] \chi_{(5)}(\vec{t}_1) \chi_{(6)}(\vec{t}_2)
 \end{aligned}$$

On en déduit :

$$M_{\mu\nu,\lambda\sigma}^* = \sum_{(1)(2)(3)(4)} \frac{(-)^{X_2}}{2^{(X_\mu+X_\nu)/2}} [1 + 2 = \lambda] [3 + 4 = \sigma] [1 + 3 = \mu] [2 + 4 = \nu] \quad (\text{C.223})$$

Les crochets sont donnés par (C.116). Comme ils sont réels, on obtient :

$$M_{\mu\nu,\lambda\sigma} = \sum_{(1)(2)(3)(4)} \frac{(-)^{X_2}}{2^{(X_\mu+X_\nu)/2}} \frac{\mathcal{N}_{(1)}^2 \mathcal{N}_{(2)}^2 \mathcal{N}_{(3)}^2 \mathcal{N}_{(4)}^2}{\mathcal{N}_{(\lambda)} \mathcal{N}_{(\sigma)} \mathcal{N}_{(\mu)} \mathcal{N}_{(\nu)}} \delta_{(1)+(2),(\lambda)} \delta_{(3)+(4),(\sigma)} \delta_{(1)+(3),(\mu)} \delta_{(2)+(4),(\nu)} \quad (\text{C.224})$$

Les quatre δ éliminent trois sommations. En effet, ils impliquent :

$$(1) = (\lambda) - (2), \quad (3) = (\sigma) - (\nu) + (2), \quad (4) = (\nu) - (2) \quad (\text{C.225})$$

avec :

$$\begin{cases} n_{z(1)\pm(2)} = n_{z1} \pm n_{z2} & \text{si } N = 1 \\ m_{(1)\pm(2)} = m_1 \pm m_2, \quad X_{(1)\pm(2)} = X_1 \pm X_2 & \text{si } N = 2 \end{cases} \quad (\text{C.226})$$

ainsi que la relation de consistance :

$$\boxed{(\lambda) + (\sigma) = (\mu) + (\nu)} \quad (\text{C.227})$$

On obtient ainsi :

$$M_{\mu\nu,\lambda\sigma} = \delta_{(\lambda)+(\sigma),(\mu)+(\nu)} \frac{2^{-(X_\mu+X_\nu)/2}}{\mathcal{N}_{(\lambda)} \mathcal{N}_{(\sigma)} \mathcal{N}_{(\mu)} \mathcal{N}_{(\nu)}} \sum_{(2)} (-)^{X_2} \mathcal{N}_{(2)}^2 \mathcal{N}_{(\lambda)-(2)}^2 \mathcal{N}_{(\sigma)-(\nu)+(2)}^2 \mathcal{N}_{(\nu)-(2)}^2 \quad (\text{C.228})$$

Les coefficients de Moshinsky qui interviennent dans les éléments de matrice du potentiel gaussien sont ceux avec $(\sigma) = 0$. D'après l'expression ci-dessus, ils s'écrivent :

$$M_{\mu\nu,\lambda 0} = \delta_{(\lambda),(\mu)+(\nu)} \frac{2^{-(X_\mu+X_\nu)/2}}{\mathcal{N}_{(\lambda)} \mathcal{N}_{(\mu)} \mathcal{N}_{(\nu)}} \sum_{(2)} (-)^{X_2} \mathcal{N}_{(2)}^2 \mathcal{N}_{(\lambda)-(2)}^2 \mathcal{N}_{-(\nu)+(2)}^2 \mathcal{N}_{(\nu)-(2)}^2$$

Comme $-(\nu) + (2)$ et $(\nu) - (2)$ doivent tous deux représenter des indices d'oscillateur positifs ou nuls, on doit avoir $(2)=(\nu)$. D'où :

$$M_{\mu\nu,\lambda 0} = \delta_{(\lambda),(\mu)+(\nu)} \frac{(-)^{X_\nu}}{2^{(X_\mu+X_\nu)/2}} \frac{\mathcal{N}_{(\mu)}\mathcal{N}_{(\nu)}}{\mathcal{N}_{(\lambda)}} \quad (\text{C.229})$$

En symétrie axiale les \mathcal{N} sont donnés par (C.113). On obtient pour le coefficient particulier (C.229) :

$$\begin{aligned} M_{\mu\nu,\lambda 0} &= \delta_{m_\lambda, m_\mu+m_\nu} \delta_{X_\lambda, X_\mu+X_\nu} \frac{(-)^{|m_\nu|}}{2^{(X_\mu+X_\nu)/2}} \frac{(-)^{n_{\perp\mu}+n_{\perp\nu}+n_{\perp\lambda}} [n_{\perp\lambda}! (n_{\perp\lambda} + |m_\lambda|)!]^{1/2}}{[n_{\perp\mu}! (n_{\perp\mu} + |m_\mu|)! n_{\perp\nu}! (n_{\perp\nu} + |m_\nu|)!]^{1/2}} \\ &\times \delta_{n_{z\lambda}, n_{z\mu}+n_{z\nu}} \frac{(-)^{n_{z\nu}}}{2^{(n_{z\mu}+n_{z\nu})/2}} \left[\frac{2^{n_{z\mu}+n_{z\nu}-n_{z\lambda}} n_{z\lambda}!}{n_{z\mu}! n_{z\nu}!} \right]^{1/2} \end{aligned}$$

c'est-à-dire puisque $n_{\perp\lambda} = n_{\perp\mu} + n_{\perp\nu} + \frac{1}{2}(|m_\mu| + |m_\nu| - |m_\lambda|)$:

$$\begin{aligned} M_{\mu\nu,\lambda 0} &= \delta_{m_\lambda, m_\mu+m_\nu} \delta_{X_\lambda, X_\mu+X_\nu} (-)^{\frac{|m_\mu|-|m_\nu|-|m_\lambda|}{2}} \left[\frac{2^{-X_\mu-X_\nu} n_{\perp\lambda}! (n_{\perp\lambda} + |m_\lambda|)!}{n_{\perp\mu}! (n_{\perp\mu} + |m_\mu|)! n_{\perp\nu}! (n_{\perp\nu} + |m_\nu|)!} \right]^{1/2} \\ &\times \delta_{n_{z\lambda}, n_{z\mu}+n_{z\nu}} (-)^{n_{z\nu}} \left[\frac{(n_{z\mu} + n_{z\nu})!}{2^{n_{z\mu}+n_{z\nu}} n_{z\mu}! n_{z\nu}!} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{C.230})$$

Bibliographie

- [1] B. D. Day, Rev. Mod. Phys. **39**, 719 (1967).
- [2] R. Lazauskas, Master's thesis, Université Joseph-Fourier - Grenoble I (2003).
- [3] V.R. Pandharipande et al., Nucl. Phys. **A654**, 157c (1999).
- [4] P. Navratil et al., Phys. Rev. **C62**, 054311 (2000).
- [5] S.C. Pieper, K. Varga, R.B. Wiringa, Phys. Rev. **C66**, 044310 (2002).
- [6] J. Carlson et al., Nucl. Phys. **A401**, 59 (1983).
- [7] T. H. R. Skyrme, Nucl. Phys. **9**, 615 (1959).
- [8] J. Dechargé and D. Gogny, Phys. Rev. **C21**, 1568 (1980).
- [9] P. Ring et P. Schuck, *The Nuclear Many-body Problem* (Springer-Verlag, New York, (1980)).
- [10] T. Duguet, Master's thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris (2001).
- [11] B. Friedman, V.R. Pandharipande, Nucl. Phys. **A361**, 502 (1981).
- [12] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, R. Schaeffer, Nucl. Phys. **A627**, 710 (1997).
- [13] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, R. Schaeffer, Nucl. Phys. **A635**, 231 (1998).
- [14] H. De Vries, C. W. De Jager and C. De Vries, At. Data Nucl. Data Tables **36**, 495 (1987).
- [15] G. Audi and A.H. Wapstra, Nucl. Phys. **A595**, 409 (1995a).
- [16] G. Audi, A.H. Wapstra, C. Thibault, Nucl. Phys. **A729**, 337 (2003).
- [17] S. Raman, C.W. Nestor and P. Tikkanen, At. Data Nucl. Data Tables **78**, 1 (2001).
- [18] A.S. Davydov, *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1965).
- [19] I. Angeli, Atomic Data and Nuclear Data Tables **87**, 185 (2004).
- [20] G. Audi and A.H. Wapstra, Nucl. Phys. **A595**, 409 (1995b).
- [21] A. Bohr, B. R. Mottelson, D. Pines, Phys. Rev. **110**, 936 (1958).
- [22] G.F. Bertsch and H. Esbensen, Ann. Phys. **209**, 327 (1991).
- [23] T. Duguet, P. Bonche and P.-H. Heenen, Nucl. Phys. **A679**, 427 (2001).
- [24] A.L. Goodman, Phys. Rev. **C60**, 014311 (1999).

- [25] D. J. Thouless and J. G. Valatin, Nucl. Phys. **31**, 211 (1962).
- [26] D. R. Inglis, Phys. Rev. **103**, 1786 (1956).
- [27] S. T. Belyaev, Nucl. Phys. **24**, 322 (1961).
- [28] J. Libert, M. Girod and J.-P. Delaroche, Phys. Rev. **C60**, 054301 (1999).
- [29] C. F. von Weizsäcker, Z. Phys. **96**, 431 (1935).
- [30] H. A. Bethe and R. F. Bacher, Rev. Mod. Phys. **8**, 82 (1936).
- [31] W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Nucl. Phys. **81**, 1 (1966).
- [32] W.D. Myers, Nucl. Phys. **A145**, 387 (1969).
- [33] W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Ann. Phys. (N.Y.) **55**, 186 (1969).
- [34] P. Möller, J.R. Nix, Nucl. Phys. **A520**, 369c (1990).
- [35] P. Möller, J.R. Nix, W.D. Myers and W.J. Swiatecki, At. Data Nucl. Data Tables **59**, 185 (1995).
- [36] R. B. Wiringa, R. A. Smith and T. L. Ainsworth, Phys. Rev. **C29**, 1207 (1984).
- [37] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks and R. Schiavilla, Phys. Rev. **C51**, 38 (1995).
- [38] R.B. Wiringa, V. Fiks, Phys. Rev. **C38**, 1010 (1988).
- [39] A. Akmal, V.R. Pandharipande, D.G. Ravenhall, Phys. Rev. **C58**, 1804 (1998).
- [40] F. Chappert, Proceedings des Journées de Rencontres Jeunes Chercheurs; http://polywww.in2p3.fr/actualites/jjc/2005/Proc/New_jjc05.pdf (2005).
- [41] B. H. Brandow, Master's thesis, Cornell University (1964).
- [42] B. Frois, C. Papanicolas, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **37**, 133 (1987).
- [43] J.P. Blaizot, J.F. Berger, J. Dechargé and M. Girod, Nucl. Phys. **A591**, 435 (1995).
- [44] C. Mahaux and R. Sartor, Adv. Nucl. Phys. **20**, 1 (1991).
- [45] J. Goldstone, Proc. R. Soc. (London) **A239**, 267 (1957).
- [46] B. H. Brandow, Rev. Mod. Phys. **39**, 771 (1967).
- [47] H. A. Bethe, B. H. Brandow and A. G. Petschek, Phys. Rev. **129**, 225 (1963).
- [48] B. H. Brandow, Phys. Rev. **152**, 863 (1966).
- [49] J. P. Jeukenne, A. Lejeune and C. Mahaux, Nucl. Phys. **A245**, 411 (1975).
- [50] J. P. Jeukenne, A. Lejeune and C. Mahaux, Phys. Rep. **25**, 83 (1976).
- [51] H.Q. Song, M. Baldo, G. Giansiracusa, U. Lombardo, Phys. Rev. Lett. **81**, 1584 (1998).
- [52] H. A. Bethe, Ann. Rev. Nucl. Sci. **21**, 93 (1971).
- [53] D. W. L. Sprung, Advances in Nuclear Physics (J. W. Negele and E. Vogt, eds.) **5**, 225 (1972).
- [54] A. de Shalit and H. Feshbach, *Theoretical Nuclear Physics, Vol. I* (Wiley, New York, 1974).
- [55] B. D. Day, Rev. Mod. Phys. **50**, 495 (1978).

- [56] J. W. Negele, Rev. Mod. Phys. **54**, 913 (1982).
- [57] M. I. Haftel and F. Tabakin, Nucl. Phys. **A158**, 1 (1970).
- [58] M. Baldo, Communication privée (2006).
- [59] F. Coester, S. Cohen, B. D. Day and C. M. Vincent, Phys. Rev. **C1**, 769 (1970).
- [60] B. D. Day, Comments Nucl. Part. Phys. **11**, 115 (1983).
- [61] J. Carlson, V.R. Pandharipande, R.B. Wiringa, Nucl. Phys. **A401**, 59 (1983).
- [62] R. Schiavilla, V.R. Pandharipande, R.B. Wiringa, Nucl. Phys. **A449**, 219 (1986).
- [63] A. Lejeune, P. Grange, M. Martzoff, J. Cugnon, Nucl. Phys. **A453**, 189 (1986).
- [64] J. Dobaczewski, Acta Phys. Pol. B **30**, 1647 (1999).
- [65] J.W. Negele, K. Yazaki, Phys. Rev. Lett. **62**, 71 (1989).
- [66] J.P. Jeukenne, A. Lejeune, C. Mahaux, Phys. Lett. **25C**, 83 (1976).
- [67] H.A. Bethe, Rev. Mod. Phys. **62**, 801 (1990).
- [68] J. Cooperstein, Nucl. Phys. **A438**, 722 (1985).
- [69] M. Farine *et al.*, Nucl. Phys. **A696**, 396 (2001).
- [70] J. Rizzo, M. Colonna, M. Di Toro, V. Greco, Nucl. Phys. **A732**, 202 (2004).
- [71] V.R. Pandharipande, S.C. Pieper, Phys. Rev. **C45**, 791 (1992).
- [72] D. Persram, C. Gale, Phys. Rev. **C65**, 064611 (2002).
- [73] B.A. Li, C.B. Das, S. Das Gupta, C. Gale, Nucl. Phys. **A735**, 563 (2004).
- [74] O. Sjöberg, Nucl. Phys. **A265**, 511 (1976).
- [75] I. Bombaci, U. Lombardo, Phys. Rev. **C44**, 1892 (1991).
- [76] W. Zuo, I. Bombaci, U. Lombardo, Phys. Rev. **C60**, 24605 (1999).
- [77] W. Zuo, A. Lejeune, U. Lombardo, J.F. Mathiot, Eur. Phys. J. A **14**, 469 (2002).
- [78] V. Baran, M. Colonna, V. Greco, M. Di Toro, Phys. Rep. **410**, 335 (2005).
- [79] E.N.E. van Dalen, C. Fuchs, A. Faessler, Phys. Rev. Lett. **95**, 022302 (2005).
- [80] K. Oyamatsu *et al.*, Nucl. Phys. **A634**, 3 (1998).
- [81] B.A. Brown, Phys. Rev. Lett. **85**, 5296 (2000).
- [82] C.J. Horowitz, J. Piekarewicz, Phys. Rev. Lett. **86**, 5647 (2001).
- [83] R.J. Furnstahl, Nucl. Phys. **A706**, 85 (2002).
- [84] J.M. Lattimer, M. Prakash, Astrophys. J. **550**, 426 (2001).
- [85] K. Pomorski, J. Dudek, Phys. Rev. **C67**, 044316 (2003).
- [86] B.A. Li, C.M. Ko, W. Bauer, Int. J. Mod. Phys. E **7**, 147 (1998).
- [87] B.A. Li, W.U. Schröder, *Isospin Physics in Heavy-Ion Collisions at Intermediate Energies* (Nova Science Publishers, Inc., New York, 2001).
- [88] I. Bombaci, Réf. [87], p. 35 (2001).
- [89] B.A. Li, C.M. Ko, Z.Z. Ren, Phys. Rev. Lett. **78**, 1644 (1997).

- [90] B.A. Li, C.M. Ko, Nucl. Phys. **A618**, 498 (1997).
- [91] V. Baran *et al.*, Nucl. Phys. **A632**, 287 (1998).
- [92] H.S. Xu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **85**, 716 (2000).
- [93] W.P. Tan *et al.*, Phys. Rev. **C64**, 051901(R) (2001).
- [94] V. Baran *et al.*, Nucl. Phys. **A703**, 603 (2002).
- [95] M.B. Tsang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5023 (2001).
- [96] B.A. Li *et al.*, Phys. Rev. **C64**, 054604 (2001).
- [97] B.A. Li, Phys. Rev. Lett. **85**, 4221 (2000).
- [98] B.A. Li, Phys. Rev. Lett. **88**, 192701 (2002).
- [99] L.W. Chen, V. Greco, C.M. Ko, B.A. Li, Phys. Rev. Lett. **90**, 162701 (2003).
- [100] G. Bertsch, S. Das Gupta, Phys. Rep. **160**, 189 (1988).
- [101] M. Farine *et al.*, Z. Phys. A **339**, 363 (1991).
- [102] L. Shi, P. Danielewicz, Phys. Rev. **C68**, 064604 (2003).
- [103] B.A. Li, Phys. Rev. **C69**, 034614 (2004).
- [104] M.B. Tsang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **92**, 062701 (2004).
- [105] L.W. Chen *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 032701 (2005).
- [106] D.V. Shetty, S.J. Yennello, G.A. Souliotis, Phys. Rev. **C75**, 034602 (2007).
- [107] A. Ono, P. Danielewicz, W.A. Friedman, W.G. Lynch, M.B. Tsang, Phys. Rev. **C68**, 051601 (2003).
- [108] C.H. Johnson, C. Mahaux, Phys. Rev. **C38**, 2589 (1988).
- [109] W. Tornow, Z.P. Chen, J.P. Delaroche, Phys. Rev. **C42**, 693 (1990).
- [110] J.P. Delaroche, Y. Wang, J. Rapaport, Phys. Rev. **C39**, 391 (1989).
- [111] Y. Wang, C.C. Foster, R.D. Polak, J. Rapaport, E.J. Stephenson, Phys. Rev. **C47**, 2677 (1993).
- [112] G. Colo, P.F. Bortignon, D. Sarchi, E. Viguzzi, Acta Phys. Pol. **B34**, 2175 (2003).
- [113] G. Colo, P.F. Bortignon, Prog. Theor. Phys. **146**, 543 (2002).
- [114] W. Heisenberg, Z. Phys. **78**, 156 (1932).
- [115] C.T. Black *et al.*, Phys. Rev. Lett. **76**, 688 (1996).
- [116] W.A. de Heer, Rev. Mod. Phys. **65**, 611 (1993).
- [117] B. R. M. A. Bohr, *Nuclear Structure* (Benjamin, New York, 1969), Vol. 1.
- [118] H. Häkkinen, J. Kolehmainen, M. Koskinen, P.O. Lipas, M. Manninen, Phys. Rev. Lett. **78**, 1034 (1997).
- [119] K. Clemenger, Phys. Rev. **B32**, 1359 (1985).
- [120] M. Manninen, J. Mansikka-aho, H. Nishioka, Y. Takahashi, Z. Phys. D **31**, 259 (1994).
- [121] C. Yannouleas, U. Landman, Phys. Rev. **B51**, 1902 (1995).

- [122] W. Satula, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, Phys. Rev. Lett. **81**, 3599 (1998).
- [123] T. Duguet, P. Bonche, P.-H. Heenen, J. Meyer, Phys. Rev. **C65**, 014311 (2001).
- [124] B. Mottelson, J.G. Valatin, Phys. Lett. **5**, 511 (1961).
- [125] M. Bender, G.F. Bertsch, P.-H. Heenen, Phys. Rev. **C73**, 034322 (2006).
- [126] A. Bohr, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **26**, 14 (1952).
- [127] D. Gogny, Nucl. Phys. **A237**, 399 (1975).
- [128] D. Vautherin, D.M. Brink, Phys. Rev. **C5**, 626 (1972).
- [129] T. Duguet, P. Bonche, Phys. Rev. **C67**, 054308 (2003).
- [130] R.K. Bhaduri, Chindhu S. Warke, Phys. Rev. Lett. **20**, 1379 (1968).
- [131] D. Gogny, R. Padjen, Nucl. Phys. **A293**, 365 (1977).
- [132] L.D. Landau, JETP (Sov. Phys.) **32**, 59 (1957).
- [133] S.O. Bäckman, A.D. Jackson, J. Speth, Phys. Lett. **56B**, 209 (1975).
- [134] S.O. Bäckman, G.E. Brown, J.A. Niskanen, Phys. Rep. **124**, 1 (1985).
- [135] A.B. Migdal, *Theory of Finite Fermi Systems and Applications to Atomic Nuclei* (Interscience, New York, 1967).
- [136] J. Speth, L. Zamick, P. Ring, Nucl. Phys. **A232**, 1 (1974).
- [137] P. Ring, J. Speth, Phys. Lett. **44B**, 477 (1973).
- [138] P. Ring, J. Speth, Nucl. Phys. **A235**, 315 (1974).
- [139] M. Bender, J. Dobaczewski, J. Engel and W. Nazarewicz, Phys. Rev. **C65**, 054322 (2002).
- [140] S.O. Bäckman, Nucl. Phys. **A130**, 427 (1969).
- [141] B.L. Friman, A.K. Dhar, Phys. Lett. **85B**, 1 (1979).
- [142] A.A. Abrikosov, I.M. Khalatnikov, Rep. Prog. Phys. **22**, 329 (1959).
- [143] D. Hone, Phys. Rev. **125**, 1494 (1962).
- [144] N.D. Mermin, Phys. Rev. **159**, 161 (1967).
- [145] V. Baran, M. Colonna, M. Di Toro, V. Greco, Phys. Rev. Lett. **86**, 4492 (2001).
- [146] J. Margueron, Ph. Chomaz, Phys. Rev. **C67**, 041602(R) (2003).
- [147] J. Margueron, J. Navarro, P. Blottiau, Phys. Rev. **C70**, 028801 (2004).
- [148] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Dover, New York, 1964), ninth dover printing, tenth gpo printing ed., ISBN 0-486-61272-4.
- [149] B.-A. Li, Phys. Rev. **C69**, 064602 (2004).
- [150] A. B. et B. R. Mottelson, *Nuclear Structure* (World Scientific, Singapore, (1998)), (Première édition : 1969).
- [151] E.W. Otten, in *Treatise on Heavy-Ion Science*, edited by D. A. Bromley (Plenum, New York, 1989), vol. 7, p. 517.

- [152] N. Tajima, P. Bonche, H. Flocard, P.-H. Heenen and M.S. Weiss, Nucl. Phys. **A551**, 434 (1993).
- [153] M.M. Sharma, G.A. Lalazissis, P. Ring, Phys. Lett. B **317**, 9 (1993).
- [154] P.G. Reinhard, H. Flocard, Nucl. Phys. **A584**, 467 (1995).
- [155] M.M. Sharma, G.A. Lalazissis, J. König, P. Ring, Phys. Rev. Lett. **74**, 3744 (1995).
- [156] J.M. Pearson, M. Farine, Phys. Rev. **C50**, 185 (1994).
- [157] Reference Input Parameter Library - 2, IAEA, Vienna (2002), tecDoc (2003), non publié; aussi disponible à l'adresse électronique www-nds.iaea.org.
- [158] G.N. Smirenkin, report INDC (CCP) - 359, 1993, non publié; aussi disponible à l'adresse électronique www-nds.iaea.org/ripl/.
- [159] J.-P. Delaroche, M. Girod, H. Goutte, J. Libert, Nucl. Phys. **A771**, 103 (2006).
- [160] D. Lunney, J.M. Pearson, C. Thibault, Rev. Mod. Phys. **75**, 1021 (2003).
- [161] M. Bender, P.-H. Heenen, P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. **75**, 121 (2003).

Résumé :

L'interaction effective entre les nucléons est un ingrédient essentiel des calculs microscopiques de structure nucléaire. L'une des formes utilisée depuis les années 1970 est la force effective phénoménologique proposée par D. Gogny. Cette force donne d'excellents résultats dans les noyaux à l'approximation du champ moyen. La présence de composantes de contact ne permet pas cependant de l'employer en toute généralité pour décrire les corrélations au-delà du champ moyen qui se manifestent fréquemment dans les noyaux. Dans ce travail, nous étudions des extensions de la force de Gogny, notamment une généralisation où le terme dépendant de la densité de portée nulle est remplacé par un terme de portée finie. Les paramètres intervenant dans la forme analytique de la force sont ajustés sur les propriétés de la matière nucléaire infinie symétrique et de la matière neutronique, et sur les observables globales de quelques noyaux stables, en particulier celles associées aux corrélations d'appariement. Nous présentons la méthode permettant d'inclure ce type de force dans les codes de calcul Hartree-Fock-Bogoliubov et nous analysons les résultats obtenus dans de nombreux noyaux. Les nouvelles versions de la force de Gogny apparaissent reproduire la structure nucléaire avec une qualité égale ou supérieure à la version traditionnelle.

Mots-clés :

structure nucléaire, interaction effective de Gogny, méthodes de champ moyen, approximation Hartree-Fock-Bogoliubov, matière nucléaire, noyaux atomiques

Abstract :

The effective interaction between nucleons is the basic input to microscopic calculations in nuclear structure. One of the forms used since the 1970's is the phenomenological effective force proposed by D. Gogny. This force gives excellent results in nuclei at the mean-field approximation. The presence of contact terms does not allow, however, to use it for the description of beyond mean-field correlations present in nuclei.

In this work, we investigate some extensions of the Gogny force, and especially a generalization in which the zero range density dependent term has been replaced by a finite range term. The parameters occurring in the analytical form of the force have been adjusted on symmetric infinite nuclear matter and neutron matter properties, and on some selected observables for stable nuclei, especially those related to pairing correlations. We present the method to include this kind of force in Hartree-Fock-Bogoliubov calculations and we analyze the results obtained for various nuclei. The new versions of the Gogny force allow to reproduce nuclear structure properties with improved accuracy as compared to the former version.

Keywords :

nuclear structure, Gogny effective interaction, mean-field methods, Hartree-Fock-Bogoliubov approximation, nuclear matter, atomic nuclei