



HAL
open science

Effet de l'appariement sur la dynamique nucléaire

G. Scamps

► **To cite this version:**

G. Scamps. Effet de l'appariement sur la dynamique nucléaire. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université de Caen, 2014. Français. NNT: . tel-01060208

HAL Id: tel-01060208

<https://theses.hal.science/tel-01060208v1>

Submitted on 3 Sep 2014

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 Caen Basse-Normandie
U.F.R. de Sciences
ÉCOLE DOCTORALE SIMEM

Thèse de doctorat

présentée et soutenue le : 11 Juin 2014

par

M. Guillaume SCAMPS

pour obtenir le

DOCTORAT de l'UNIVERSITÉ de CAEN

Spécialité : Constituants élémentaires et physique théorique

**Effet de l'appariement
sur la dynamique nucléaire**

MEMBRES du JURY :

Mr Denis Lacroix	Chercheur, IPNO, Orsay	(<i>Directeur de thèse</i>)
Mr Olivier Juillet	Professeur, LPC, Caen	(<i>Président du jury</i>)
Mme Marcella Grasso	Chercheur, IPNO, Orsay	(<i>Rapporteur</i>)
Mr Cédric Simenel	Chercheur, ANU, Canberra, Australie	(<i>Rapporteur</i>)
Mr Yorick Blumenfeld	Directeur de recherche, IPNO, Orsay	
Mr Michael Bender	Directeur de recherche, CENBG, Bordeaux	

Université de Caen Basse-Normandie
U.F.R. de Sciences
ÉCOLE DOCTORALE SIMEM

Thèse de doctorat

présentée et soutenue le : 11 Juin 2014

par

M. Guillaume SCAMPS

pour obtenir le

DOCTORAT de l'UNIVERSITÉ de CAEN

Spécialité : Constituants élémentaires et physique théorique

**Effet de l'appariement
sur la dynamique nucléaire**

MEMBRES du JURY :

Mr Denis Lacroix	Chercheur, IPNO, Orsay	<i>(Directeur de thèse)</i>
Mr Olivier Juillet	Professeur, LPC, Caen	<i>(Président du jury)</i>
Mme Marcella Grasso	Chercheur, IPNO, Orsay	<i>(Rapporteur)</i>
Mr Cédric Simenel	Chercheur, ANU, Canberra, Australie	<i>(Rapporteur)</i>
Mr Yorick Blumenfeld	Directeur de recherche, IPNO, Orsay	
Mr Michael Bender	Directeur de recherche, CENBG, Bordeaux	

Remerciements

J'aimerais tout d'abord remercier les deux directeurs du GANIL présents durant ma thèse M. Sydney Galès et M. Florent Staley de m'avoir accueillis au sein du GANIL. Et je remercie également le ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche pour avoir financé mon travail de thèse.

Je tiens à remercier les membres du jury, le président, Olivier Juillet, les rapporteurs Marcella Grasso et Cédric Simenel pour toutes les corrections et remarques qu'ils m'ont apportées. Je remercie aussi les deux examinateurs Yorick Blumenfeld et Michael Bender. Enfin mes remerciements viennent à mon directeur de thèse Denis, je te remercie pour ce sujet de thèse qui m'a permis d'appréhender de nombreux aspects de la physique nucléaire. Merci pour tout ce que tu m'as appris durant cette thèse ainsi que de m'avoir fait confiance durant ces trois années. J'ai beaucoup apprécié la passion de la recherche dont tu fais preuve ainsi que ton sens de la communication.

Merci à tous les permanents du Ganil : Abdou, Antoine, Beyhan, David, Emmanuel, Eric, Fanny, François, John, Julien, Hervé, Marek, Navin, Olivier, Pierre, Piet, Thomas et Xavier. Je dis un grand merci à tous les doctorants et post-docs que j'ai côtoyés durant cette thèse : Guillain, Guillaume, Olivier, Aurore, Yannen, Alexandre, Paola, Mark, Danilo, Carme, Marine, Hongliang, Haifa, Jose, Marija, Alexis, Kévin, Aurélie, Florent, Pierre et le petit nouveau Quentin.

Je n'oublie pas mon collègue de bureau Mathieu pour son amitié et sa bonne humeur (hmm). Désolé de t'abandonner ici. Mais tu pourras venir quand tu veux au Japon. Et merci d'avoir corrigé les fautes de Français dans ma thèse.

Merci Victor pour tes coupes de cheveux improbables. Merci à Jérémie pour toutes les blagues "hilarantes", références à RRRrrrr!!! et aux chaussettes. Et j'aimerais mettre en exergue mes remerciements pour Diego. Merci pour toutes les (nombreuses) pauses cafés. Je vous souhaite à tous bonne chance pour vos postdocs et j'espère que l'on pourra se revoir très vite.

Enfin j'aimerais remercier ma famille pour m'avoir toujours soutenu tout au long de mes études.

Table des matières

Introduction	7
1 Approches dynamiques microscopiques incluant l'appariement	11
1.1 La théorie Hartree-Fock (HF)	12
1.1.1 État de particules indépendantes	12
1.1.2 Détermination des équations HF à partir du principe variationnel	13
1.1.3 Symétries et brisures de symétrie.	14
1.2 La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov	15
1.2.1 Notion de quasi-particules	15
1.2.2 L'équation HFB statique	17
1.2.3 L'approximation BCS (Bardeen, Cooper, Schrieffer)	17
1.2.4 Non-conservation du nombre de particules	19
1.3 Théories dépendantes du temps	20
1.3.1 La théorie Hartree-Fock dépendant du temps (TDHF)	21
1.3.2 La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov dépendante du temps (TDHFB)	22
1.3.3 La limite TDHF+BCS (Bardeen, Cooper, Schrieffer)	23
1.3.4 La théorie de la matrice densité dépendante du temps (TDDM)	25
1.4 Conclusion	28
2 Application des théories de champ moyen avec appariement dans un modèle d'évaporation à une dimension.	31
2.1 Motivations	31
2.2 Modèle dynamique à une dimension	32
2.3 Détermination des équations pour chacune des théories	33
2.3.1 Détermination des équations TDHFB pour le modèle à une dimension	34
2.3.2 Équations TDHF+BCS pour le modèle à un corps	39
2.4 Solution exacte pour deux particules	40
2.5 Composante non physique de l'évolution TDHF+BCS	40
2.5.1 Oscillation du nombre de particules	41
2.5.2 Équation de continuité	42

2.5.3	Approximation des nombres d'occupation constants	43
2.6	Comparaison des différentes théories	44
2.6.1	Résultats statiques	44
2.6.2	Résultats dynamiques	45
2.7	Restauration de la symétrie associée au nombre de particules durant l'évolution	46
2.7.1	Effet de la brisure de symétrie associée au nombre de particules dans la dynamique des noyaux superfluides.	47
2.7.2	Projection après variation dans les méthodes dépendantes du temps et émission de particules	48
2.8	Conclusion	49
3	La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité	51
3.1	La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité	51
3.1.1	La fonctionnelle de Skyrme	52
3.1.2	Inclusion de l'appariement	54
3.1.3	Le code EV8	56
3.1.4	Amélioration de la stabilité numérique de EV8	58
3.2	Propriétés statiques du noyau avec les fonctionnelles de Skyrme	59
3.2.1	Détermination de la forme des noyaux	61
3.2.2	Déformation et polarisation de la surface des noyaux	64
3.2.3	Effets de l'appariement sur les propriétés statiques du noyau	66
3.3	La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité dépendante du temps	69
3.3.1	Le code TDHF3D	69
3.4	Conclusion	71
4	Étude systématique des résonances géantes	73
4.1	Calcul de réponse linéaire	74
4.2	Effet de l'appariement sur les résonances géantes	77
4.2.1	Effet de l'appariement sur les résonances géantes isovecteurs dipolaires	77
4.2.2	Effet de l'appariement sur les résonances géantes isoscalaires quadrupolaires	78
4.2.3	Influence de l'approximation BCS, comparaison avec la QRPA	80
4.2.4	Effet de la restauration du nombre de particules	80
4.3	Étude systématique des résonances géantes quadrupolaires pour les noyaux sphé- riques	81
4.3.1	Vérification des règles de somme	82
4.3.2	Détermination des pics de basse énergie	82
4.3.3	Énergie moyenne et largeur de la résonance principale	85
4.3.4	Détermination de l'énergie de symétrie	93
4.4	Effets de la déformation sur les résonances géantes quadrupolaires	95

4.4.1	Correction de la rotation non physique pour $ K =1$	96
4.4.2	Noyaux possédant un axe de symétrie	98
4.4.3	Noyaux triaxiaux	108
4.5	Conclusion	112
5	Application de TDHF+BCS aux réactions nucléaires.	115
5.1	Introduction	115
5.2	Description des réactions nucléaires à l'aide du champ moyen dépendant du temps	117
5.2.1	Calcul des probabilités de transfert.	119
5.3	Inclusion de l'appariement	121
5.3.1	Calcul des probabilités de transfert pour un système superfluide	122
5.3.2	Double projection	123
5.3.3	Équation de continuité à deux corps	124
5.4	Effets systématiques de l'appariement sur une chaîne isotopique, réaction $^{40}\text{Ca}+^{A}\text{Ca}$	128
5.4.1	Détermination de la force d'appariement	128
5.4.2	Effet du type d'interaction d'appariement	129
5.4.3	Influence de l'intensité de l'interaction d'appariement	129
5.4.4	Effet de structure	130
5.4.5	Relation entre P_{2n} et P_{1n}^2	133
5.5	Réaction $^{96}\text{Zr}+^{40}\text{Ca}$	135
5.6	Probabilités de transfert au voisinage de la barrière	136
5.7	Conclusion	137
	Conclusion	139
A	Méthodes de restauration de symétries associées au nombre de particules.	143
A.1	Valeur d'un opérateur à un corps sur un état projeté	144
A.1.1	Cas général	144
A.1.2	Projection dans le cas BCS	144
A.2	Projection sur un nombre de particules dans une boîte	145
A.2.1	Projection dans le cas HF	146
A.2.2	Projection dans le cas BCS	146
A.2.3	Projection dans le cas BCS avec double projection	147
A.2.4	Projection dans le cas de la théorie d'occupation moyenne	148
B	Opérateur d'excitation quadrupolaire	151
B.1	Opérateurs réels	151
B.2	Règles de somme	152
	Publications issues de cette thèse	166

Introduction

Le problème à N corps en physique nucléaire est probablement l'un des plus complexes existant dans la nature. Cela vient (i) de la nature de l'interaction forte qui présente un cœur dur à courte distance (ii) du nombre important de constituants (iii) de la nature quantique et relativiste (iv) de la diversité des phénomènes qui s'y produisent. De nombreuses approches ont été élaborées pour appréhender ce problème allant du plus simple au plus complexe : le modèle de la goutte liquide, les théories basées sur le champ moyen, le modèle en couche et les méthodes Monte-Carlo quantiques.

En plus de la complexité intrinsèque du problème théorique, la physique nucléaire possède un grand nombre de phénomènes différents. On peut citer de façon non exhaustive pour les propriétés statiques : les phénomènes de superfluidité, de déformation, les noyaux à halo, les évolutions des nombres magiques, la formation d'amas (clustering)... Au cours de ces 50 dernières années, de nombreux efforts ont été faits pour comprendre microscopiquement les propriétés statiques des noyaux.

Les phénomènes dynamiques sont plus difficiles à décrire théoriquement. Les phénomènes suivants peuvent être cités : les réactions de fusion, de fission, de transfert, de cassure, les radioactivités exotiques et les résonances géantes. Ces phénomènes sont assez bien compris de façon phénoménologique, mais il est encore difficile de les décrire précisément de façon microscopique. En effet, lors des réactions, de nombreux degrés de liberté peuvent jouer un rôle. Certaines approximations valides pour les calculs statiques peuvent alors ne plus l'être pour les calculs dynamiques. De plus, le nombre important de degrés de liberté empêche de décrire ces phénomènes avec des approches de type *ab initio*, c'est-à-dire, où on résout de manière exacte le problème à N corps.

Il est pourtant nécessaire de décrire microscopiquement ces phénomènes. Pour cela, la théorie Hartree-Fock dépendante du temps (TDHF) a été proposée par Dirac [1] et utilisée pour la première fois dans les années 70 dans un cas à une dimension [2]. Cette théorie suppose que les nucléons sont indépendants dans un champ moyen créé par l'ensemble des nucléons. En déterminant l'état fondamental Hartree-Fock de deux noyaux et en les plaçant sur un réseau avec une vitesse initiale, il est possible d'étudier les collisions entre ces deux noyaux. Cette méthode a permis de déterminer de façon microscopique les barrières de fusion [3, 4], de mieux

comprendre les réactions de quasi-fission et de transfert [5, 6, 7]. Dans sa limite de petite amplitude, TDHF permet aussi de fournir une version dynamique des résonances géantes [8, 9]. Une revue complète des différents succès de TDHF peut être obtenue dans les références [10, 11]. La théorie TDHF est donc un outil puissant pour étudier les phénomènes dynamiques en physique nucléaire.

D'un autre côté, pour décrire correctement les propriétés statiques des noyaux, il est nécessaire d'inclure les effets allant au delà des particules indépendantes. Notamment, un effet important est le phénomène d'appariement. En effet, la superfluidité est responsable d'une part non négligeable de l'énergie de liaison. De plus, l'appariement provoque un gap dans le spectre d'excitation. De nos jours, toutes les applications de structure nucléaire basées sur le champ moyen tiennent compte de l'appariement soit avec l'approximation BCS [12], soit avec la version HFB [13, 14] ou en allant plus loin, en restaurant les symétries [15]. On comprend ainsi la nécessité d'inclure l'appariement dans la dynamique nucléaire.

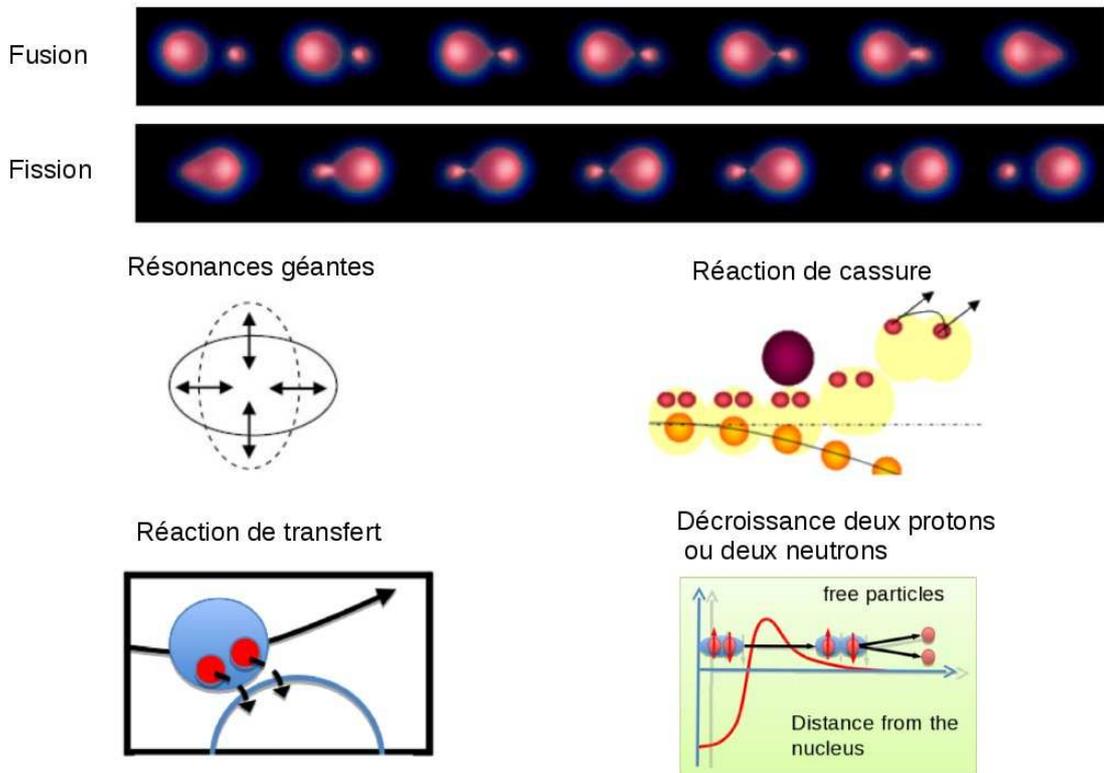


FIG. 1 – Présentation des différents phénomènes où on peut s'attendre à un effet important de l'appariement.

D'un point de vue physique, on peut anticiper qu'un certain nombre de phénomènes soit sensibles aux corrélations d'appariement (voir illustration 1) :

- La radioactivité deux neutrons ou deux protons, où les corrélations d'appariement peuvent jouer un rôle dans le caractère simultané des deux émissions.
- Le phénomène de cassure, où un potentiel extérieur peut briser une paire de nucléons.
- Les réactions de transfert, où les corrélations d'appariement vont privilégier le transfert d'une paire.
- Les réactions de fusion.
- Les réactions de fission.
- Les mouvement collectifs qui peuvent se coupler aux excitations de paires.

Le but de cette thèse est (i) de déterminer la meilleure manière d'inclure l'appariement dans les théories de champ moyen dépendantes du temps, (ii) de construire un modèle numérique avec une interaction réaliste tenant compte de l'appariement, (iii) de déterminer les différents effets de l'appariement sur la dynamique nucléaire. Au chapitre 1, nous présenterons les différentes théories de champ moyen dynamique avec et sans appariement. Ces théories seront ensuite testées dans un modèle schématique en une dimension au chapitre 2. Les avantages et inconvénients de chacune des théories seront ainsi discutés.

La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité sera ensuite présentée au chapitre 3. Cette théorie permet à partir d'une interaction effective microscopique d'effectuer des calculs réalistes avec les théories allant au delà du champ moyen. Une application systématique de cette théorie sera effectuée pour déterminer les propriétés statiques des noyaux. Le programme numérique développé dans notre étude permettant d'étudier la dynamique nucléaire de manière cohérente avec les modèles de structure avec appariement sera ensuite présenté.

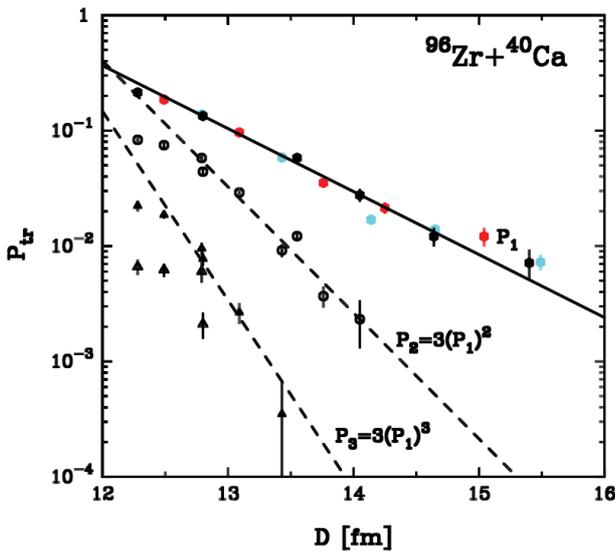


FIG. 2 – Probabilités de transfert en fonction de la distance minimale d'approche pour la réaction $^{96}\text{Zr} + ^{40}\text{Ca}$. Extrait de la référence [16]. P_1 , P_2 et P_3 dénote les probabilités de transfert de 1, 2 ou 3 neutrons du zirconium au calcium.

Ce programme sera ensuite appliqué à l'étude des résonances géantes (chapitre 4). Celui-ci étant relativement rapide, une étude complète le long de la charte des noyaux sera effectuée. Le spectre des résonances quadrupolaires isoscalaire et isovecteur pour tous les noyaux sphériques et déformés sera déterminé. On pourra ainsi caractériser les effets généraux de l'appariement sur les résonances géantes. Cette étude permettra aussi de comparer notre approche aux calculs de QRPA (*quasi-particle random phase approximation*).

La dernière partie sera consacrée aux réactions, notamment celles de transfert. Pour lesquelles, il a récemment été montré expérimentalement que les corrélations jouent un rôle. En effet, pour la réaction $^{96}\text{Zr}+^{40}\text{Ca}$, il a été trouvé expérimentalement la relation $P_2=3P_1^2$ avec P_1 et P_2 les probabilités de transférer un et deux neutrons [16] (voir figure 2). Alors que pour des particules indépendantes, on s'attend à la relation $P_2\simeq P_1^2$. Le but de cette étude est donc de déterminer le rôle de l'appariement pour ces réactions de transfert. Déterminer les probabilités de transfert à partir des théories de champ moyen n'est pas triviale. La méthode de projection [6] développée pour TDHF a été étendue au cas avec appariement. Avec cette technique, l'effet de l'appariement sera systématiquement étudié pour un cas test, les réactions $^{40}\text{Ca}+^A\text{Ca}$. Puis une comparaison sera effectuée avec les données expérimentales.

Chapitre 1

Approches dynamiques microscopiques incluant l'appariement

Les théories de champ moyen ont l'avantage de remplacer un problème à N corps, très rarement possible à résoudre exactement en pratique, en un problème de particules indépendantes sujettes à un champ moyen effectif. En effet, dans le cadre de la physique nucléaire, les approches ab-initio sont restreintes aux noyaux ayant un petit nombre de nucléons ($A < 16$). En couplant les approches de type champ moyen avec des interactions effectives, on a pu dans les années 70 décrire les propriétés de l'état fondamental (énergie de liaison, rayon, déformation ...) des noyaux dans leur globalité.

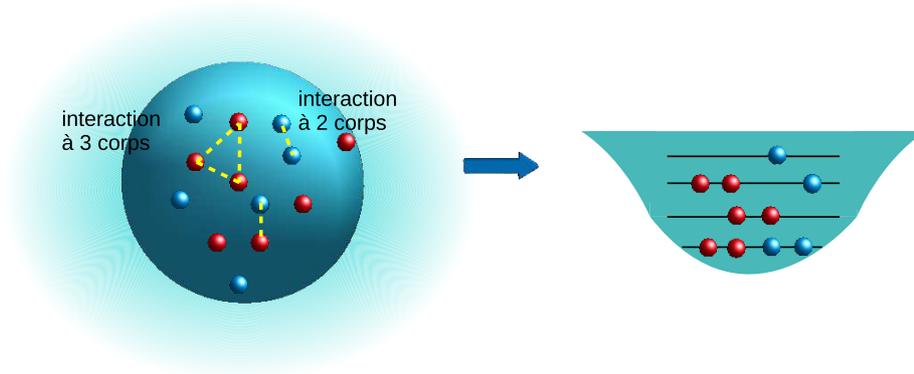


FIG. 1.1 – Illustration de l'approximation de champ moyen qui consiste à approximer un ensemble de nucléons en interaction par un ensemble de particules indépendantes dans un champ moyen.

Dans ce chapitre, les différentes théories dynamiques de type champ moyen avec et sans

appariement utilisées dans cette thèse seront présentées. Considérons comme point de départ le Hamiltonien à deux corps écrit en seconde quantification sous la forme suivante,

$$\hat{H} = \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij|v_{12}|kl\rangle_A a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k. \quad (1.1)$$

Cet Hamiltonien est composé d'un terme d'énergie cinétique T et d'une interaction à deux corps v_{12} , l'indice A indique que l'interaction est antisymétrisée,

$$\langle ij|v_{12}|kl\rangle_A = \langle ij|v_{12}|kl\rangle - \langle ij|v_{12}|lk\rangle. \quad (1.2)$$

Les opérateurs a_i^\dagger et a_i représentent respectivement les opérateurs de création et d'annihilation de fermions dans l'état à un corps $|i\rangle$. Ces opérateurs respectant les règles d'anticommution,

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = 0, [a_i, a_j]_+ = 0 \text{ et } [a_i, a_j^\dagger]_+ = \delta_{ij}. \quad (1.3)$$

1.1 La théorie Hartree-Fock (HF)

En physique nucléaire, les méthodes dites *Energy density functional* (EDF) statiques et dynamiques sont très fortement inspirées des théories HF et TDHF. L'essence des ces théories est donnée dans ce chapitre.

1.1.1 État de particules indépendantes

La théorie Hartree-Fock consiste à supposer un espace variationnel constitué de déterminants de Slater. C'est-à-dire les états à N corps s'écrivant sous la forme,

$$|\Psi\rangle = \prod_{\alpha=1}^N c_\alpha^\dagger |-\rangle. \quad (1.4)$$

Où chaque $|\alpha\rangle$ correspond à un état à un corps, qui peut s'exprimer dans une base fixe comme :

$$|\alpha\rangle = \sum_i \langle i|\alpha\rangle |i\rangle = \sum_i \varphi_\alpha(i) |i\rangle. \quad (1.5)$$

De ce système de particules indépendantes, on peut définir les matrices densités à un et deux corps,

$$\rho_{ji} = \langle \Psi | a_i^\dagger a_j | \Psi \rangle \quad \text{et} \quad \rho_{kl ij}^{(2)} = \langle \Psi | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \Psi \rangle. \quad (1.6)$$

1.1. La théorie Hartree-Fock (HF)

Des expressions simples des matrices densités en fonction des φ_α peuvent être obtenues en utilisant les relations d'anticommuation $[a_i, c_\alpha^\dagger]_+ = \langle i|\alpha\rangle$,

$$\begin{aligned}
\rho_{ji} &= \langle - | \left(\prod_{\alpha=N}^1 c_\alpha \right) a_i^\dagger a_j \left(\prod_{\alpha=1}^N c_\alpha^\dagger \right) | - \rangle, \\
&= \langle - | c_N \dots c_2 \left(-a_i^\dagger c_1 + \langle 1|i \rangle \right) \left(-c_1^\dagger a_i + \langle j|1 \rangle \right) c_2^\dagger \dots c_N^\dagger | - \rangle, \\
&= \langle - | c_N \dots c_2 a_i^\dagger c_1 c_1^\dagger a_i c_2^\dagger \dots c_N^\dagger | - \rangle + \langle 1|i \rangle \langle j|1 \rangle, \\
&= \sum_{\alpha=1}^N \varphi_\alpha^*(i) \varphi_\alpha(j). \tag{1.7}
\end{aligned}$$

De même, on montre que

$$\rho_{lkji}^{(2)} = \rho_{lj} \rho_{ki} - \rho_{li} \rho_{kj}. \tag{1.8}$$

On remarque que la densité à deux corps dépend uniquement de la matrice à un corps. Il en est de même pour les matrices densités d'ordre supérieur. Par conséquent toute l'information d'un déterminant de Slater est contenue dans la matrice densité à un corps ρ .

1.1.2 Détermination des équations HF à partir du principe variationnel

Le principe variationnel de Rayleigh-Ritz consiste à minimiser l'énergie totale du système vis à vis de tous les états possibles contenus dans l'espace variationnel. C'est-à-dire trouver $|\Psi\rangle$ tel que :

$$\delta(\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle) = 0. \tag{1.9}$$

Où $-\lambda \langle \Psi | \Psi \rangle$ est une contrainte de normalisation. Au minimum d'énergie, le paramètre de Lagrange λ s'identifie à l'énergie du système. Pour déterminer les équations HF avec le principe variationnel, il nous faut tout d'abord calculer l'énergie. Avec le Hamiltonien (1.1) et l'état à N corps $|\Psi\rangle$, l'énergie du système devient,

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{ij} T_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | v_{12} | kl \rangle_A \rho_{lkji}^{(2)}. \tag{1.10}$$

En utilisant les expressions (1.7) et (1.8), l'énergie se réécrit comme une fonctionnelle de la matrice densité à un corps,

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= \sum_{ij} T_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | v_{12} | kl \rangle_A (\rho_{lj} \rho_{ki} - \rho_{li} \rho_{kj}), \\
&= \sum_{ij} (T_{ij} + \frac{1}{2} \Gamma_{ij}) \rho_{ji}, \tag{1.11}
\end{aligned}$$

avec Γ_{ij} représentant le champ moyen,

$$\Gamma_{ij} = \sum_{kl} \langle ik|v_{12}|jl \rangle_A \rho_{lk}, \quad (1.12)$$

et $\langle ij|v_{12}|kl \rangle_A$ l'interaction à deux corps antisymétrisée. L'énergie ne dépendant que des fonctions d'ondes individuelles, on va minimiser l'énergie par rapport aux variations de toutes les fonctions d'ondes individuelles $\varphi_\beta^*(j)$,

$$\frac{\partial}{\partial \varphi_\beta^*(j)} \left[\sum_\alpha E(\{\varphi_\alpha(i), \varphi_\alpha^*(i)\}) - \epsilon_\alpha \left(\sum_i \varphi_\alpha^*(i) \varphi_\alpha(i) - 1 \right) \right] = 0. \quad (1.13)$$

On obtient ainsi l'équation aux valeurs propres,

$$\hat{h}|\alpha\rangle = \epsilon_\alpha|\alpha\rangle, \quad (1.14)$$

\hat{h} étant le Hamiltonien à un corps,

$$\hat{h} = \sum_{ij} (T_{ij} + \Gamma_{ij}) a_i^\dagger a_j. \quad (1.15)$$

L'équation aux valeurs propres équivaut à l'équation de Hartree-Fock [17, 18],

$$[\hat{h}, \hat{\rho}] = 0. \quad (1.16)$$

On a ainsi remplacé le problème initial à N corps, par un problème plus simple puisqu'il s'agit d'une simple recherche de valeurs propres pour chaque particule. Les particules occupant les états de plus basse énergie (comme sur le schéma 1.2) de façon à minimiser l'énergie. Il est à noter que Γ dépend de ρ et doit donc être déterminé de manière auto-consistante.

L'approximation de HF ou dans sa version EDF, en réduisant l'information aux degrés de liberté à un corps, sont des outils puissants. Il est toutefois nécessaire d'introduire des degrés de liberté plus complexes liés aux propriétés à deux corps et plus. Ceci afin de comprendre des effets allant au delà des particules indépendantes et pour comprendre leur influence sur des propriétés à un corps.

1.1.3 Symétries et brisures de symétrie.

Une manière élégante d'ajouter des corrélations aux théories de champ moyen est de briser les symétries. Considérons un opérateur de transformation \hat{Q} , la symétrie par transformation \hat{Q} étant respectée par le Hamiltonien général,

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = 0. \quad (1.17)$$

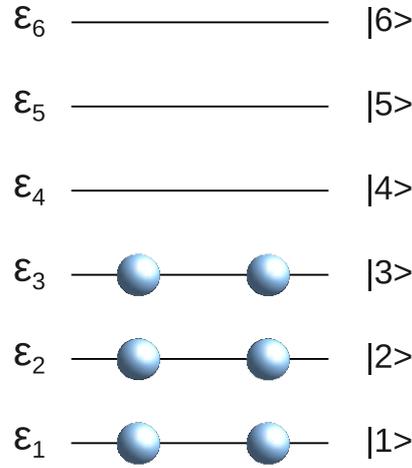


FIG. 1.2 – Schéma des occupations des états individuels. Les particules occupent les états de plus basse énergie de façon à minimiser l'énergie totale du système.

La solution exacte de la diagonalisation du Hamiltonien $|\Psi\rangle$ est donc un vecteur propre de l'opérateur \hat{Q} . En conséquence, les fluctuations ΔQ associées à l'opérateur \hat{Q} sont nulles. On peut montrer que si cet opérateur \hat{Q} commute avec le Hamiltonien exact alors il commute avec le Hamiltonien de champ moyen. La méthode de la brisure de symétrie consiste à considérer un déterminant de Slater qui brise certaines symétries de façon à obtenir des énergies de champ moyen plus basses. Ces brisures de symétrie pouvant ensuite être restaurées à l'aide de projecteurs.

Par exemple, considérons la symétrie associée à la position du centre de masse. Le Hamiltonien nucléaire étant invariant par translation, la solution exacte du Hamiltonien est un noyau délocalisé dans tout l'espace. Néanmoins avec les théories de champ moyen, on brise systématiquement cette symétrie en localisant le noyau, de cette façon, on crée des corrélations au niveau du champ moyen.

Une façon de rajouter des corrélations à la théorie Hartree-Fock, est de briser la symétrie associée au nombre de particules, dans ce cas, on obtient la théorie Hartree-Fock-Bogoliubov.

1.2 La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov

1.2.1 Notion de quasi-particules

Pour tenir compte des effets d'appariement dans le noyau, on doit considérer un état à N corps plus général qu'un déterminant de Slater. Pour cela, on utilise la transformation généralisée de Bogoliubov [19], qui introduit la notion de quasi-particules définie par les

opérateurs de création et d'annihilation de quasi-particules :

$$\begin{cases} \beta_\alpha = \sum_i U_{i\alpha}^* a_i + V_{i\alpha}^* a_i^\dagger \\ \beta_\alpha^\dagger = \sum_i U_{i\alpha} a_i^\dagger + V_{i\alpha} a_i \end{cases}. \quad (1.18)$$

Ces équations peuvent être écrites sous forme matricielle,

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^+ & V^+ \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{W}^\dagger \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

De façon à ce que les opérateurs de création et d'annihilation obéissent aux règles d'anticommutation des fermions (1.3), la matrice \mathcal{W} doit vérifier $\mathcal{W}^+ \mathcal{W} = 1$ et $\mathcal{W} \mathcal{W}^+ = 1$.

La théorie HFB consiste à supposer que l'état à N corps s'écrit comme,

$$|\Psi\rangle \propto \prod_\alpha \beta_\alpha |-\rangle. \quad (1.20)$$

Cet état est par construction un vide de quasi-particules puisque il vérifie $\beta_\alpha |\Psi\rangle = 0$ pour toutes quasi-particules α . De la même façon que pour HF, on détermine les matrices densités à un et deux corps,

$$\rho_{ij} = \sum_\alpha V_{i\alpha}^* V_{\alpha j} \quad \text{et} \quad \rho_{ijkl}^{(2)} = \rho_{ik} \rho_{jl} - \rho_{il} \rho_{jk} + \kappa_{ij} \kappa_{kl}^*. \quad (1.21)$$

On s'aperçoit alors que la matrice densité à deux corps contient un terme de corrélation $\kappa_{ij} \kappa_{kl}^*$, qui dépend de la matrice densité anormale κ_{ij} :

$$\kappa_{ij} = \langle \Psi | a_j a_i | \Psi \rangle = \sum_\alpha V_{i\alpha}^* U_{\alpha j}. \quad (1.22)$$

De manière générale, toute observable à un corps et plus, peut s'écrire comme une fonctionnelle des matrices ρ et κ . On obtient ainsi pour l'énergie dans l'état de quasi-particules,

$$E = \sum_{ij} (T_{ij} + \frac{1}{2} \Gamma_{ij}) \rho_{ji} + \frac{1}{2} \Delta_{ij} \kappa_{ij}^*, \quad (1.23)$$

où le champ d'appariement Δ est défini par :

$$\Delta_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{kl} \langle ij | v_{12} | kl \rangle_A \kappa_{kl}. \quad (1.24)$$

1.2.2 L'équation HFB statique

En utilisant le principe variationnel, on obtient les équations statiques de HFB [20],

$$\begin{pmatrix} h_{ij} & \Delta_{ij} \\ -\Delta_{ij}^* & -h_{ij}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{j\alpha} \\ V_{j\alpha} \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} U_{i\alpha} \\ V_{i\alpha} \end{pmatrix}. \quad (1.25)$$

En définissant un Hamiltonien, une densité et un ket généralisé,

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix}, \quad \mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho \end{pmatrix}, \quad |\omega_\alpha\rangle = \begin{pmatrix} U_{i\alpha} \\ V_{i\alpha} \end{pmatrix}, \quad (1.26)$$

il est possible de faire un parallèle entre les équations HF et HFB :

$$\begin{aligned} \rho &\rightarrow \mathcal{R}, \\ h[\rho] &\rightarrow \mathcal{H}[\mathcal{R}], \\ |\varphi_i\rangle &\rightarrow |\omega_\alpha\rangle, \\ a_i^\dagger &\rightarrow \beta_\alpha^\dagger, \\ [h, \rho] = 0 &\rightarrow [\mathcal{H}, \mathcal{R}] = 0. \end{aligned}$$

Même si les équations HF et HFB sont formellement similaires, il existe des différences importantes dans la résolution des équations. Tout d'abord, une contrainte supplémentaire doit être ajoutée durant la minimisation de l'énergie HFB, il s'agit d'une contrainte sur le nombre de particules moyen dans l'état HFB. Avec cette contrainte, l'équation HFB devient,

$$\begin{pmatrix} h_{ij} - \lambda & \Delta_{ij} \\ -\Delta_{ij}^* & -h_{ij}^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{j\alpha} \\ V_{j\alpha} \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} U_{i\alpha} \\ V_{i\alpha} \end{pmatrix}, \quad (1.27)$$

où le paramètre λ est ajusté de façon à avoir $\langle N \rangle = \text{Tr}(\rho) = N$. Une autre différence provient du nombre d'états propres à considérer. Pour HF, les N états propres de plus basse énergie sont nécessaires. En revanche, pour HFB, les états de quasi-particule au dessus de l'énergie de Fermi sont aussi peuplés, tous les états sont donc pris en compte jusqu'à une certaine énergie de coupure E_{cut} . Numériquement, les calculs sont donc beaucoup plus lourds, puisqu'il faut considérer un Hamiltonien 4 fois plus grand et un nombre d'états plus important. En pratique, il y a donc une différence d'un facteur 100 à 1000 en temps de calcul entre l'exécution d'un code HF et d'un code HFB.

1.2.3 L'approximation BCS (Bardeen, Cooper, Schrieffer)

Une approximation intermédiaire entre HF et HFB, qui permet de réduire la complexité, est l'approximation BCS qui consiste à supposer que la matrice Δ s'écrit dans la base canonique,

$$\Delta_\alpha = \Delta_{\alpha\bar{\alpha}}. \quad (1.28)$$

Cette écriture revient à supposer que seules les particules sur des états conjugués interagissent entre elles. Dans la base canonique, les états individuels $|\alpha\rangle$ diagonalisent la densité à un corps :

$$\rho_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} n_{\alpha}, \quad (1.29)$$

n_{α} correspond au nombre d'occupation de l'état à un corps φ_{α} . Dans cette base, la matrice κ s'écrit sous une forme dite canonique,

$$\kappa_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\bar{\beta}} \kappa_{\alpha}. \quad (1.30)$$

L'avantage de cette base est que les composantes U et V qui contiennent toute l'information sur le système deviennent séparables,

$$U_{i\alpha} = u_{\alpha}^* \varphi_{\alpha}(i), \quad (1.31)$$

$$V_{i\alpha} = v_{\alpha}^* \varphi_{\alpha}^*(i). \quad (1.32)$$

On en déduit les expressions suivantes :

$$n_{\alpha} = v_{\alpha}^* v_{\alpha}, \quad (1.33)$$

$$\kappa_{\alpha} = u_{\alpha}^* v_{\alpha}, \quad (1.34)$$

$$\Delta_{\alpha} = - \sum_{\alpha' > 0} \bar{v}_{\alpha\bar{\alpha}\alpha'\bar{\alpha}'} \kappa_{\alpha'}. \quad (1.35)$$

Dans la limite BCS, l'état à N corps peut s'écrire simplement sous la forme ¹,

$$|\Psi\rangle = \prod_{\alpha} (u_{\alpha} + v_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\bar{\alpha}}^{\dagger}) |-\rangle. \quad (1.36)$$

L'énergie avec contrainte sur le nombre de particules dans la base canonique s'écrit comme,

$$E = \sum_{\alpha \geq 0} (t_{\alpha\alpha} + \frac{1}{2} \Gamma_{\alpha\alpha} - \lambda) v_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha > 0} \Delta_{\alpha} \kappa_{\alpha}^*. \quad (1.37)$$

La minimisation de l'énergie par rapport aux fonctions d'ondes conduit à des équations de type champ moyen pour les états à un corps,

$$\hat{h}|\varphi_{\alpha}\rangle = \epsilon_{\alpha}|\varphi_{\alpha}\rangle, \quad (1.38)$$

et un équation du gap simplifiée pour chaque α :

$$2\tilde{\epsilon}_{\alpha} u_{\alpha} v_{\alpha} + \Delta_{\alpha} (v_{\alpha}^2 - u_{\alpha}^2) = 0 \quad \text{pour } \alpha > 0, \quad (1.39)$$

avec

$$\tilde{\epsilon}_{\alpha} = \frac{1}{2} (\langle \alpha | \hat{h} | \alpha \rangle + \langle \bar{\alpha} | \hat{h} | \bar{\alpha} \rangle) - \lambda. \quad (1.40)$$

Le paramètre de Lagrange λ doit être ajusté de façon à fixer le nombre moyen de particules $N = \sum_{\alpha} v_{\alpha}^2$. La résolution de ces équations se fait de façon itérative,

¹C'est aussi le cas pour l'état général HFB dans la base canonique

- on part d'un jeu de fonctions d'ondes,
- on résout l'équation du gap,
- on ajuste le paramètre λ de façon à obtenir le bon nombre de particules en moyenne,
- on diagonalise le Hamiltonien de champ moyen.
- Puis on résout de nouveau l'équation du gap avec les nouvelles fonctions d'ondes jusqu'à ce que ce processus de minimisation converge.

Il est à noter que même si le nombre de particules est fixé en moyenne, comme on l'a vu dans le chapitre 1.1.3, à la fois dans la théorie HF+BCS ou HFB, la symétrie associée au nombre de particules est brisée.

1.2.4 Non-conservation du nombre de particules

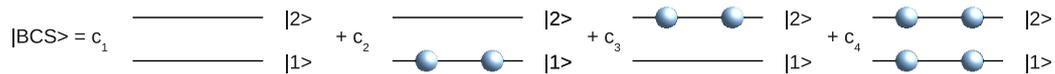
Pour montrer la non-conservation du nombre de particules, c'est-à-dire le fait qu'un vide de quasi-particules n'est pas vecteur propre de l'opérateur nombre de particules, on peut calculer les fluctuations associées à l'opérateur nombre de particules $\hat{N} = \sum_i a_i^\dagger a_i$,

$$\begin{aligned} \langle \Psi | N^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | N | \Psi \rangle^2 &= \sum_{ij} \langle \Psi | a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j | \Psi \rangle - \left(\sum_i \langle \Psi | a_i^\dagger a_i | \Psi \rangle \right)^2, \\ &= 2\text{Tr}(\kappa \kappa^\dagger) = 2\text{Tr}(\rho - \rho^2). \end{aligned} \quad (1.41)$$

On constate ainsi que, en dehors du cas où le vide de quasi-particules se ramène à un déterminant de Slater ($\kappa_{ij}=0 \forall ij$ et $\rho^2 = \rho$), le nombre de particules n'est pas exactement conservé dans un vide de quasi-particules. Pour mieux comprendre cet aspect, le cas simple avec 2 particules et 2 états à un corps doublement dégénérés en spin est considéré. Dans ce cas l'état BCS s'écrit,

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= (u_1 + v_1 a_1^\dagger a_1^\dagger)(u_2 + v_2 a_2^\dagger a_2^\dagger)|-\rangle, \\ &= u_1 u_2 |-\rangle + u_1 v_2 a_2^\dagger a_1^\dagger |-\rangle + u_2 v_1 a_1^\dagger a_2^\dagger |-\rangle + v_1 v_2 a_1^\dagger a_1^\dagger a_2^\dagger a_2^\dagger |-\rangle. \end{aligned} \quad (1.42)$$

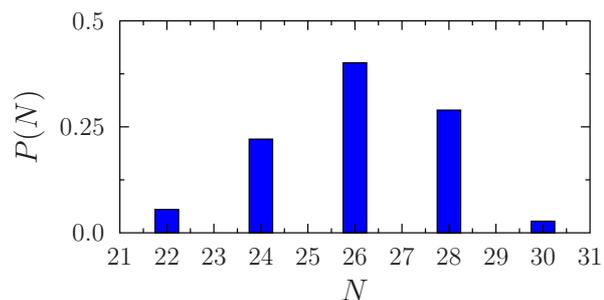
L'état BCS peut donc être réinterprété comme un mélange de configurations. L'état BCS mélangeant les déterminants de Slater de 0, 2 et 4 particules.



Dans une théorie de type modèle en couche, seuls les déterminants de Slater possédant le bon nombre de particules seraient pris en compte. Pour les applications aux noyaux avec un nombre fini de nucléons, on ajuste lors de l'initialisation le nombre moyen de nucléons $\langle \hat{N} \rangle = N$ à l'aide de la contrainte λ définie auparavant.

Un exemple est donné sur la figure 1.3, où la théorie BCS est appliquée au ^{46}Ca . Dans ce cas, le nombre moyen de neutrons est fixé à 26. Les quantités $P(N)$ (voir annexe A) représentent les contributions des déterminants de Slater à N particules dans le système. On voit sur la figure 1.3 que le nombre moyen de neutrons est 26, mais le vide de quasi-particules comporte aussi des composantes non-physiques de 22, 24, 28 et 30 neutrons.

FIG. 1.3 – Distribution du nombre de neutrons dans un état HFB pour le ^{46}Ca calculée avec le projecteur (1.44) (voir les détails en annexe A).



Des méthodes de projection existent de façon à supprimer les composantes non physiques. Ces méthodes consistent à écrire l'état à N corps comme,

$$|N\rangle = \hat{P}(N)|\Psi\rangle, \quad (1.43)$$

avec $\hat{P}(N)$ le projecteur sur les états contenant un nombre de particules N . Cet opérateur s'écrit,

$$\hat{P}(N) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(\hat{N}-N)} d\varphi. \quad (1.44)$$

Il existe deux approches différentes, la projection après la variation (PAV) qui consiste à résoudre les équations HFB puis à calculer les observables d'intérêt avec l'état projeté et la variation après la projection (VAP) qui consiste à minimiser l'énergie de l'état projeté en faisant varier les degrés de liberté de l'état HFB. L'avantage de la deuxième méthode est d'être purement variationnelle et donc d'être plus proche de la résolution exacte.

Ces deux méthodes n'ont pour l'instant été appliquées que pour étudier les propriétés statiques du noyaux [15]. Un des objectifs de cette thèse est d'étudier l'effet de la projection sur le bon nombre de particules lors de l'évolution des noyaux (voir section 4.2.4 et 5.3.1).

1.3 Théories dépendantes du temps

Les théories statiques décrites précédemment sont étendues ici au cas dynamique.

1.3.1 La théorie Hartree-Fock dépendant du temps (TDHF)

Une des façon d'obtenir les équations du mouvement de TDHF, est d'utiliser le principe de moindre action qui s'écrit en physique quantique [21],

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} \langle \Psi(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Psi(t) \rangle - \langle \Psi(t) | \hat{H} | \Psi(t) \rangle dt = 0. \quad (1.45)$$

Les variations de l'action doivent être effectuées par rapport aux degrés de liberté du déterminant de Slater en fixant les bornes $\delta\Psi(t_0) = 0$ et $\delta\Psi(t_1) = 0$. Cela revient à faire varier l'ensemble des composantes de chaque fonction d'onde $\varphi_\alpha^*(i, t)$,

$$\frac{\partial}{\partial \varphi_{\alpha'}^*(i', t')} \int_{t_0}^{t_1} \sum_{\alpha} \sum_{ij} \left(i\hbar \varphi_{\alpha}^*(i, t) \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{\alpha}(i, t) - \varphi_{\alpha}^*(i, t) h_{ij} \varphi_{\alpha}(j, t) \right) dt = 0. \quad (1.46)$$

On obtient ainsi l'équation du mouvement de TDHF [1],

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha(t)\rangle = \hat{h}[\rho(t)] |\alpha(t)\rangle. \quad (1.47)$$

Il est à noter que dans le cas stationnaire, l'équation de Hartree-Fock (1.16) est conservée. Dans la théorie TDHF, les nombres d'occupation n_i sont constants et la densité $\hat{\rho}(t) = \sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}(t)\rangle n_{\alpha} \langle \phi_{\alpha}(t)|$ évolue comme,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{h}[\rho(t)], \hat{\rho}(t)]. \quad (1.48)$$

Cette équation aurait pu également être obtenue en utilisant l'équation d'Ehrenfest appliquée aux états à un corps,

$$i\hbar \frac{d\langle a_j^\dagger a_i \rangle}{dt} = \langle [a_j^\dagger a_i, H] \rangle, \quad (1.49)$$

en supposant qu'à l'instant t l'état est un déterminant de Slater et en appliquant le théorème de Wick. Ainsi l'utilisation du principe variationnel en parallèle avec les déterminants de Slater assure que l'évolution des degrés de liberté à un corps est optimisée au moins pour des temps courts.

Il est possible de montrer que l'évolution TDHF conserve au cours du temps les propriétés suivantes [20, 22] :

- conservation de l'énergie,
- conservation de l'orthogonalité entre les fonctions d'ondes,
- conservation du nombre de particules,
- conservation de l'impulsion,
- conservation du moment angulaire,
- l'état reste un déterminant de Slater au cours du temps ($\frac{d(\rho^2 - \rho)}{dt} = 0$).

1.3.2 La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov dépendante du temps (TDHFB)

Pour déterminer les équations du mouvement de la théorie TDHFB, nous allons utiliser le théorème de Thouless.

En partant de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, l'évolution exacte d'un état de quasi-particules au cours du temps est donnée par :

$$|\Psi(t + \Delta t)\rangle = e^{\frac{\Delta t}{i\hbar}\hat{H}}|\Psi(t)\rangle. \quad (1.50)$$

Il est possible de montrer [20] que,

$$\begin{aligned} H|\Psi\rangle = & E|\Psi\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta}^{20} \beta_{\alpha}^{\dagger} \beta_{\beta}^{\dagger} |\Psi\rangle \\ & + \sum_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} H_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4}^{40} \beta_{\alpha_1}^{\dagger} \beta_{\alpha_2}^{\dagger} \beta_{\alpha_3}^{\dagger} \beta_{\alpha_4}^{\dagger} |\Psi\rangle, \end{aligned} \quad (1.51)$$

avec

$$H^{20} = U^{\dagger} h V^* - V^{\dagger} h^t U^* + U^{\dagger} \Delta U^* - V^{\dagger} \Delta^* V^*, \quad (1.52)$$

$$H_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4}^{40} = \frac{1}{4} \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4} \langle i_1 i_2 | v_{12} | i_3 i_4 \rangle_A U_{i_1 \alpha_1}^* U_{i_2 \alpha_2}^* V_{i_4 \alpha_3}^* V_{i_3 \alpha_4}^*. \quad (1.53)$$

Le théorème de Thouless stipule que si $|\Psi_1\rangle$ est un vide de quasi-particules alors [20]

$$|\Psi_2\rangle = e^{\sum_{\alpha\alpha'} Z_{\alpha\alpha'} \beta_{\alpha} \beta_{\alpha'}^{\dagger}} |\Psi_1\rangle, \quad (1.54)$$

est aussi un vide de quasi-particules, avec β_{α} l'annihilateur de quasi-particules et Z une matrice quelconque. En négligeant le terme en H^{40} , on voit que l'état de quasi-particules initial se transforme en un autre état de quasi-particules. L'évolution de ce vide s'écrit, en définissant $\hat{S} = \frac{\Delta t}{i\hbar} \sum H_{\alpha\beta}^{20}$,

$$|\Psi(t + \Delta t)\rangle = e^{\frac{\Delta t}{i\hbar} E} e^{\hat{S}} |\Psi(t)\rangle = e^{\frac{\Delta t}{i\hbar} E} e^{\hat{S}} \prod_{\alpha} \beta_{\alpha}(t) |-\rangle = \prod_{\alpha} \beta_{\alpha}(t + dt) |-\rangle. \quad (1.55)$$

La phase $e^{\frac{\Delta t}{i\hbar} E}$ sera négligée dans la suite puisqu'elle ne change pas l'évolution des observables. En utilisant les propriétés, $e^{\hat{S}} e^{-\hat{S}} = 1$ et $e^{\hat{S}} |-\rangle = 0$, on en déduit l'évolution des opérateurs d'annihilation de quasi-particules,

$$\beta_{\alpha}(t + \Delta t) = \beta_{\alpha}(t) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \sum_{\alpha'} H_{\alpha'\alpha}^{20} \beta_{\alpha'}(t) - H_{\alpha\alpha'}^{20} \beta_{\alpha'}(t), \quad (1.56)$$

ce qui sous forme matricielle devient :

$$i\hbar \partial_t V^* = (1 - \rho) h V^* + \kappa \Delta^* V^* + \kappa h^t U^* + (1 - \rho) \Delta U^*, \quad (1.57)$$

$$i\hbar \partial_t U = \rho h^{\dagger} U - \kappa h^* V - \kappa \Delta^* U + \rho \Delta V. \quad (1.58)$$

L'évolution des matrices densités normale et anormale s'écrit alors :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [h, \rho] + \kappa \Delta^* - \Delta \kappa^*, \quad (1.59)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \kappa = h\kappa + \kappa h^* - \rho \Delta + \Delta(1 - \rho^*), \quad (1.60)$$

ce qui peut s'écrire sous forme condensée [21],

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{R} = [\mathcal{H}, \mathcal{R}]. \quad (1.61)$$

On vérifie ainsi que la solution statique de l'évolution TDHFB correspond bien à l'équation HFHFB : $[\mathcal{H}, \mathcal{R}] = 0$. On peut vérifier qu'une expression plus simple de l'évolution des matrices U et V [23, 24, 25],

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} U_{i\alpha} \\ V_{i\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{ij} & \Delta_{ij} \\ -\Delta_{ij}^* & -h_{ij}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{j\alpha} \\ V_{j\alpha} \end{pmatrix}, \quad (1.62)$$

donne la même évolution des observables ρ et κ . Cette expression permet de limiter de façon importante le temps de calcul numérique.

Il est à noter qu'un résultat équivalent aurait pu être obtenu à partir d'un principe variationnel [21] ou plus simplement en utilisant le théorème d'Ehrenfest pour les observables $\langle a_j^\dagger a_i \rangle$, $\langle a_j^\dagger a_i^\dagger \rangle$ et $\langle a_j a_i \rangle$ [26]

1.3.3 La limite TDHF+BCS (Bardeen, Cooper, Schrieffer)

Un point faible de la théorie TDHFB est le coût numérique de son implémentation, on peut estimer à un facteur 100 ou 1000 la différence en temps de calcul entre un programme TDHF et un programme TDHFB. C'est pour cela que très peu d'applications avec des interactions réalistes ont été effectuées de la théorie TDHFB.

Pour limiter le coût numérique des applications, plusieurs approximations peuvent être effectuées comme par exemple, la linéarisation des équations TDHFB, qui aboutit à la *Quasi-Particle Random-Phase Approximation* (QRPA) [27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34]. Cette approximation n'étant valable que pour des excitations de faible amplitude.

De la même façon que pour déterminer les équations statiques (voir 1.2.3), on se place dans la base canonique à tout instant :

$$U_{i\alpha}(t) = u_\alpha^*(t) \varphi_\alpha(i, t), \quad (1.63)$$

$$V_{i\alpha}(t) = v_\alpha^*(t) \varphi_\alpha^*(i, t). \quad (1.64)$$

En utilisant les équations (1.59) et (1.60) dans cette base, les équations du mouvement de TDHF+BCS s'écrivent [35, 36] :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_\alpha(t)}{\partial t} = (h[\rho](t) - \eta_\alpha(t))\varphi_\alpha(t), \quad (1.65)$$

$$i\hbar \frac{\partial n_\alpha(t)}{\partial t} = \kappa_\alpha(t)\Delta_\alpha^*(t) - \kappa_\alpha^*(t)\Delta_\alpha(t), \quad (1.66)$$

$$i\hbar \frac{\partial \kappa_\alpha(t)}{\partial t} = \kappa_\alpha(t)(\eta_\alpha(t) + \eta_{\bar{\alpha}}(t)) + \Delta_\alpha(t)(2n_\alpha(t) - 1). \quad (1.67)$$

$\eta_\alpha(t)$ est une variable réelle dépendante du temps qui ne modifie pas l'évolution des observables. Néanmoins, de façon à minimiser les erreurs numériques, on prendra dans la suite, $\eta_\alpha(t) = \langle \varphi_\alpha(t) | h[\rho] | \varphi_\alpha(t) \rangle$. Ce choix permet de minimiser les changements de phase des ondes au cours du temps [35] et donc de réduire les erreurs numériques dues à la résolution de l'équation différentielle avec des méthodes types Runge-Kutta. Il faut noter que les équations TDHF+BCS peuvent aussi être dérivées à partir du principe variationnel [36].

On peut vérifier que TDHF+BCS possède les mêmes lois de conservation que TDHFB, par exemple pour $N(t)$ et $E(t)$.

Conservation du nombre moyen de particules

L'application du champ moyen (1.65) conserve les propriétés de normalisation des fonctions d'ondes individuelles puisque l'hamiltonien de champ moyen $\hat{h}[\rho]$ est hermitien. L'évolution de $N(t) = \sum_\alpha n_\alpha \langle \alpha | \alpha \rangle$ ne dépend donc que de l'évolution des nombres d'occupation,

$$\frac{dN}{dt} = \sum_{\alpha>0} \frac{dn_\alpha}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} \left(\sum_{\alpha, \alpha'>0} \kappa_\alpha \bar{v}_{\alpha\bar{\alpha}\alpha'\bar{\alpha}'}^* \kappa_{\alpha'}^* - \kappa_\alpha \bar{v}_{\alpha\bar{\alpha}\alpha'\bar{\alpha}'} \kappa_{\alpha'} \right), \quad = 0 \quad (1.68)$$

Conservation de l'énergie avec TDHF+BCS

En séparant l'énergie en une contribution du champ moyen et une d'appariement, on obtient :

$$\frac{dE}{d\rho} \frac{d\rho}{dt} = \sum_{\alpha>0} \frac{dn_\alpha}{dt} (\eta_\alpha(t) + \eta_{\bar{\alpha}}(t)), \quad (1.69)$$

$$\sum_{\alpha>0} \frac{dE}{d\kappa_\alpha} \frac{d\kappa_\alpha}{dt} + \frac{dE}{d\kappa_\alpha^*} \frac{d\kappa_\alpha^*}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha>0} (\kappa_\alpha^* \Delta_\alpha - \Delta_\alpha^* \kappa_\alpha) (\eta_\alpha(t) + \eta_{\bar{\alpha}}(t)). \quad (1.70)$$

En utilisant (1.66), on obtient bien la conservation de l'énergie. Outre ces deux quantités, TDHF+BCS conserve [35],

- l'orthogonalité entre les fonctions d'ondes,
- l'impulsion,

– le moment angulaire.

Néanmoins, au chapitre suivant, nous verrons que l'équation de continuité n'est pas respectée contrairement à TDHFB. En particulier, l'absence de cette loi de conservation locale peut amener à des difficultés spécifiques sur l'interprétation physique de certains processus.

Il faut noter ici que l'approximation qui consiste à négliger les excitations à 4 quasi-particules durant l'évolution n'est pas sans conséquences. Pour caractériser plus précisément l'effet de cette approximation, on peut replacer la théorie TDHFB dans le cadre de la théorie de la matrice densité dépendante du temps (TDDM).

1.3.4 La théorie de la matrice densité dépendante du temps (TDDM)

La théorie de la matrice densité dépendante du temps est une théorie qui formalise le problème à N corps dépendant du temps, en tenant compte explicitement des degrés de liberté à deux corps. On donne ici les équations de cette théorie, en interprétant physiquement les différents termes, de façon à comprendre les approximations contenues dans la théorie TDHFB.

Il est possible de décrire exactement un système à N corps par une matrice densité $\rho^{(N)}$ qui contient toutes les corrélations à N corps. Cette densité est définie comme,

$$\rho_{i_1 \dots i_N j_1 \dots j_N}^{(N)} = \langle \Psi | a_{j_1}^\dagger \dots a_{j_N}^\dagger a_{i_N} a_{i_1} | \Psi \rangle. \quad (1.71)$$

En utilisant l'équation de Liouville-von Neumann, le système évolue comme²,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho^{(N)} = [H, \rho^{(N)}]. \quad (1.73)$$

Avec H la matrice définie telle qu'un Hamiltonien à N corps s'écrive comme,

$$\hat{H} = \sum_{i_1 \dots i_N j_1 \dots j_N} H_{i_1 \dots i_N j_1 \dots j_N} a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_N}^\dagger a_{j_1} \dots a_{j_N}. \quad (1.74)$$

La résolution de l'équation différentielle (1.73) permettrait d'obtenir l'évolution exacte du système en prenant en compte les corrélations à tous les ordres. Cependant, la taille des matrices à prendre en compte est beaucoup trop importante et est rédhibitoire pour toute application réaliste en physique nucléaire. Il est donc nécessaire de trouver un schéma d'approximations permettant de limiter la taille des matrices à prendre en compte.

²On rappelle ici la définition de la multiplication entre deux matrices possédant chacune $2N$ indices

$$[AB]_{i_1 \dots i_N k_1 \dots k_N} = \sum_{j_1 \dots j_N} A_{i_1 \dots i_N j_1 \dots j_N} B_{j_1 \dots j_N k_1 \dots k_N}. \quad (1.72)$$

La hiérarchie BBGKY (Born, Bogoliubov, Green, Kirkwood, Yvon)

La hiérarchie BBGKY [37, 38, 39] consiste à supposer que les corrélations à N corps ont plus de poids dans l'évolution que les corrélations à N+1 corps. Par conséquent, il est possible d'établir un schéma d'approximations successives. Pour cela, on écrit l'évolution de toutes les matrices densités en utilisant le théorème d'Erhenfest,

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_1 = [T_1, \rho_1] + \text{Tr}_2[v_{12}, \rho_{12}] \\ i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{12} = [T_1 + T_2, \rho_{12}] + [v_{12}, \rho_{12}] + \text{Tr}_3[v_{13} + v_{23}, \rho_{123}] \\ \vdots \\ i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{1\dots n} = [\sum_{i=1}^n T_i, \rho_{1\dots n}] + [\sum_{i<j=1}^n v_{ij}, \rho_{1\dots n}] + \text{Tr}_{n+1}[\sum_{i=1}^n v_{i,n+1}, \rho_{1\dots n+1}] \end{array} \right. , \quad (1.75)$$

où l'on utilise les notations condensées, $\rho_{12} = \rho_{i_1 i_2 j_1 j_2}^{(2)}$ et les traces partielles, par exemple $(\text{Tr}_2[v_{12}, \rho_{12}])_{i_1 j_1} = \sum_{k_1 k_2 i_2} v_{i_1 i_2 k_1 k_2} \rho_{k_1 k_2 j_1 i_2}^{(2)}$. On voit avec les équations (1.75), que l'évolution de la matrice densité à N corps dépend explicitement de la matrice densité à N+1 corps. De façon à avoir une équation fermée sur l'évolution de la matrice à N corps, il faut exprimer la matrice densité à N+1 corps en fonction de la matrice densité à N corps en négligeant les corrélations à N+1 corps. Par exemple, jusqu'à l'ordre 3, on a,

$$\rho_1 = \rho_1, \quad (1.76)$$

$$\rho_{12} = \rho_1 \rho_2 (1 - P_{12}) + C_{12}, \quad (1.77)$$

$$\begin{aligned} \rho_{123} = & \rho_1 \rho_2 \rho_3 (1 - P_{13})(1 - P_{12} - P_{23}) + \rho_1 C_{23} (1 - P_{12} - P_{13}) \\ & + \rho_2 C_{13} (1 - P_{12} - P_{23}) + \rho_3 C_{12} (1 - P_{13} - P_{23}) + C_{123}. \end{aligned} \quad (1.78)$$

Où l'on a défini les matrices de corrélation C_{12} et C_{123} et l'opérateur \hat{P}_{12} qui échange les particules 1 et 2, $\hat{P}_{12}|i, j\rangle = |j, i\rangle$. Ce qui donne pour la matrice $P_{12} : (AP_{12})_{i_1 i_2 j_1 j_2} = A_{i_1 i_2 j_2 j_1}$.

En négligeant les corrélations à deux corps et au delà, on obtient les équations TDHF. En effet, en injectant $\rho_{12} = \rho_1 \rho_2 (1 - P_{12})$ dans l'ensemble d'équations (1.75), on obtient,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_1 = [T_1, \rho_1] + [\text{Tr}_2(v_{12}^A \rho_2), \rho_1] = [h_1, \rho_1]. \quad (1.79)$$

Pour obtenir les équations TDDM, il faut tronquer la hiérarchie BBGKY au second ordre. C'est-à-dire qu'il faut tenir compte des corrélations à deux corps et négliger les corrélations d'ordre supérieur. On obtient ainsi les équations TDDM,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_1 = [h_1, \rho_1] + \frac{1}{2} \text{Tr}_2[v_{12}^A, C_{12}], \quad (1.80)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_{12} = [h_1 + h_2, C_{12}] + P_{12} + B_{12} + H_{12}, \quad (1.81)$$

avec

$$B_{12} = \left[(1 - \rho_1)(1 - \rho_2)v_{12}^A \rho_1 \rho_2 - \rho_1 \rho_2 v_{12}^A (1 - \rho_1)(1 - \rho_2) \right], \quad (1.82)$$

$$P_{12} = \frac{1}{2} \left[(1 - \rho_1 - \rho_2)v_{12}^A C_{12} - C_{12}v_{12}^A (1 - \rho_1 - \rho_2) \right], \quad (1.83)$$

$$\begin{aligned} H_{12} = & + \frac{1}{2} \text{Tr}_3 [v_{13}^A + v_{23}^A, \rho_1 C_{23} (1 - P_{12} - P_{13})] \\ & + \frac{1}{2} \text{Tr}_3 [v_{13}^A + v_{23}^A, \rho_2 C_{13} (1 - P_{12} - P_{23})] \\ & - \frac{1}{2} \text{Tr}_3 [v_{13}^A, C_{13}] \rho_2 (1 - P_{12}) - \frac{1}{2} \rho_1 \text{Tr}_3 [v_{23}^A, C_{23}] (1 - P_{12}). \end{aligned} \quad (1.84)$$

Le terme B , ou terme de Born représente l'évolution des corrélations dues aux collisions dans le noyau, ce terme est pris en compte dans les approches de type TDHF étendues (ETDHF) [40]. Le terme P représente les corrélations d'appariement, et il est possible de faire le lien entre ce terme et la théorie TDHFB. Le dernier terme H représente les corrélations aux ordres supérieurs.

Quelques applications réalistes de la théorie TDDM ont été effectuées en physique nucléaire [41, 42, 43], mais elles sont limitées du fait du coût numérique important. De façon équivalente à TDHFB et TDHF, en linéarisant les équations TDDM, on obtient la théorie de la *second random-phase approximation* (SRPA) [44, 45, 46].

Lien entre TDDM et TDHFB

Pour parvenir à retrouver l'évolution TDHFB à partir de TDDM, il faut négliger les termes B et H et supposer que la matrice corrélation à deux corps est séparable [47] et s'écrit donc

$$C_{ijkl}^{(2)} = \kappa_{ij} \kappa_{kl}^*. \quad (1.85)$$

Dans ce cas, la densité à un corps évolue comme,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{ij}^{(1)} &= ([h_1, \rho_1]_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{kmn} (v_{12}^A)_{ikmn} C_{mnjk}^{(2)} - C_{ikmn}^{(2)} (v_{12}^A)_{mnjk}, \\ &= ([h_1, \rho_1]_{ij}) + \Delta_{ik} \kappa_{jk}^* - \kappa_{ik} \Delta_{jk}^*. \end{aligned} \quad (1.86)$$

En utilisant la propriété $\kappa^t = -\kappa$, on retrouve l'équation (1.59). Pour l'évolution des corrélations, en partant de l'équation (1.60), on obtient,

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_{ijkl} = i\hbar \left[\frac{d\kappa_{ij}}{dt} \kappa_{kl}^* + \kappa_{ij} \frac{d\kappa_{kl}^*}{dt} \right], \quad (1.87)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{mno} h_{im} \kappa_{mj} \kappa_{kl}^* + \kappa_{im} h_{mj}^* \kappa_{kl}^* - \kappa_{ij} h_{km}^* \kappa_{ml}^* - \kappa_{ij} \kappa_{km}^* h_{ml} \\ &\quad - \frac{1}{2} \rho_{im} (v_{12}^A)_{mjno} \kappa_{no} \kappa_{kl}^* + \frac{1}{2} (v_{12}^A)_{imno} \kappa_{no} (\delta_{mj} - \rho_{mj}^*) \kappa_{kl}^* \\ &\quad + \frac{1}{2} \kappa_{ij} \rho_{km}^* (v_{12}^{A*})_{mlno} \kappa_{no}^* - \frac{1}{2} \kappa_{ij} (v_{12}^{A*})_{kmno} \kappa_{no}^* (\delta_{ml} - \rho_{ml}^*), \end{aligned} \quad (1.88)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{mnop} h_{im} C_{mjkl} + h_{jm} C_{imkl} - C_{ijml} h_{mk} - C_{ijkm} h_{ml} \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_{im} \delta_{jp} - \rho_{im} \delta_{jp} - \delta_{im} \rho_{jp}) (v_{12}^A)_{mpno} C_{nokl} \\ &\quad - C_{ijmn} (v_{12}^A)_{mnop} (\delta_{ok} \delta_{pl} - \rho_{ok} \delta_{pl} - \delta_{ok} \rho_{pl})]. \end{aligned} \quad (1.89)$$

On retrouve ainsi l'évolution de la matrice corrélation à deux corps (équation (1.81)) sans les termes B et H .

Les limitations de l'approche TDHFB sont alors claires, durant l'évolution les collisions ne sont pas prise en compte et les corrélations entre trois particules ou plus sont négligées.

1.4 Conclusion

Dans ce chapitre, les différentes théories dynamiques microscopiques incluant les effets d'appariement ont été présentées. Le schéma 1.4 résume les différents liens entre les théories présentées ici. En partant de l'évolution exacte du système à N corps, on peut ne tenir compte que des corrélations à deux corps, ce qui donne lieu à la théorie TDDM. Puis en négligeant les termes de collision et d'ordres supérieurs, on obtient la théorie TDHFB. De cette même théorie, en négligeant l'appariement, on obtient les équations TDHF. En parallèle de cette chaîne d'approximation, on peut supposer une interaction diagonale dans la base canonique. Cette approximation sur les théories TDDM et TDHFB donne lieu respectivement aux théories TDDM^P [42] et TDHF+BCS. Sur le schéma 1.4, est aussi montré le lien avec la hiérarchie entre les différentes théories en petite amplitude qui sont obtenues en linéarisant les équations dynamiques.

Chaque approximation réduit le coût en temps de calcul, mais appauvrit la description du phénomène physique étudié. De manière à trouver le bon compromis entre le temps de calcul et la richesse de la théorie, nous allons tester ces différentes théories sur un modèle simple à une dimension.

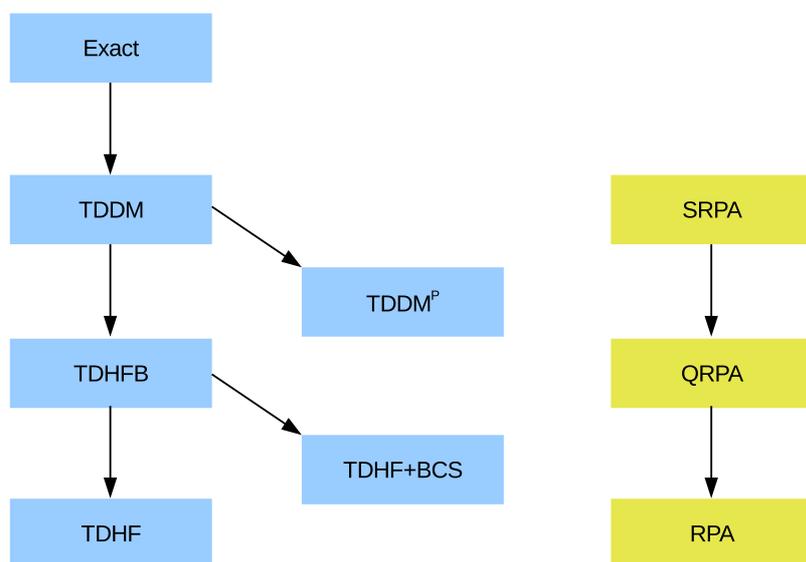


FIG. 1.4 – Schéma des différentes approximations successives présentées dans cette thèse. Les théories équivalentes en petite amplitude sont rappelées sur la droite du schéma.

Chapitre 2

Application des théories de champ moyen avec appariement dans un modèle d'évaporation à une dimension.

2.1 Motivations

Ce chapitre a pour vocation de comparer les différentes théories présentées dans le chapitre précédent dans un cas modèle et de trouver le meilleur compromis entre la simplicité de la théorie et la richesse de la physique qu'elle contient. Le but de ce chapitre est aussi

- de pouvoir mieux comprendre les différents aspects de chaque théorie et leurs approximations sous-jacentes,
- de présenter et tester les différentes implémentations numériques de ces théories,
- de comprendre du point de vue formel, numérique et d'interpréter les théories qui brisent le nombre de particules,
- d'anticiper les problèmes éventuels qui pourraient se poser dans des applications réalistes et de proposer des solutions pratiques.

Une motivation supplémentaire pour cette étude, est de comprendre une pathologie de la théorie TDHF+BCS qui a été révélée dans une précédente étude [48]. Dans ce mémoire, pour étudier le phénomène d'évaporation pour les noyaux riches en neutrons, une contrainte monopolaire est appliquée sur un noyau d' ^{22}O puis relaxée. La contrainte initiale ayant excité le noyau, il peut se désexciter en évaporant des neutrons. Pour caractériser cette désexcitation, le nombre moyen de neutrons présents dans une sphère autour du noyau (voir schéma 2.1) est calculé.

Les résultats de ce calcul sont présentés sur la fig. 2.2 avec la théorie TDHF et la théorie TDHF+BCS. Avec la théorie TDHF, le nombre de particules décroît exponentiellement et se stabilise à une certaine valeur asymptotique, c'est le comportement physique attendu [49]. À

l'inverse, la théorie TDHF+BCS présente des oscillations du nombre de particules au cours du temps. Ces oscillations sont non physiques puisque lorsqu'une particule est sortie du noyau, elle ne peut plus revenir. Ce chapitre va donc essayer de comprendre ces oscillations ainsi que de remédier à ce problème. Afin d'identifier l'origine de ce problème, nous avons considéré comme cas test un modèle à une dimension.

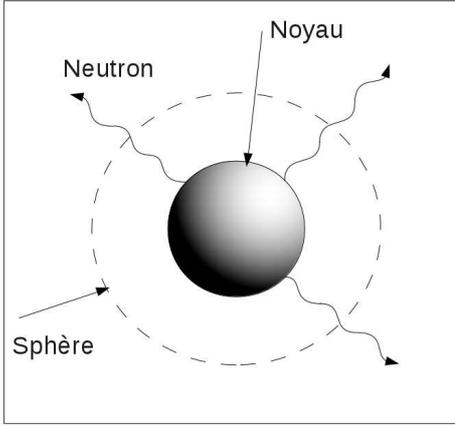


FIG. 2.1 – Schéma présentant l'évaporation des noyaux.

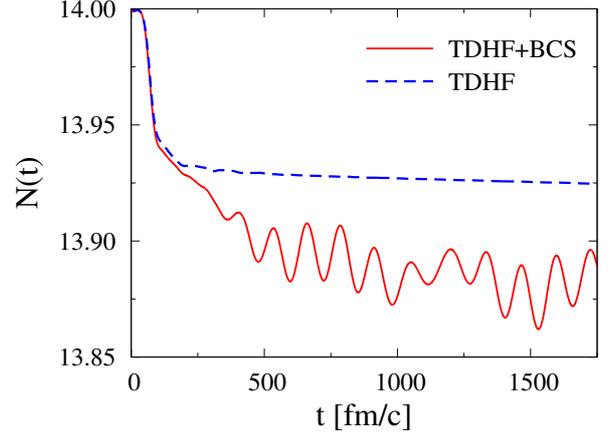


FIG. 2.2 – Nombre de particules à l'intérieur de la sphère calculé au cours du temps avec les théories TDHF et TDHF+BCS.

2.2 Modèle dynamique à une dimension

Le calcul réaliste précédent présenté sur la fig. 2.2, présente plusieurs inconvénients pour une étude précise des différentes théories : les temps de calcul sont longs, l'interaction est complexe et il n'est pas possible de comparer à des théories plus élaborées ou à la solution exacte. Un modèle d'évaporation simple à une dimension sera donc utilisé. Dans ce modèle, un ensemble de particules en interaction et soumis à un potentiel à un corps de Woods-Saxon est considéré. Ce modèle peut être vu comme un ensemble de particules de valence liées par un cœur inerte créant le potentiel de champ moyen fixe (Woods-Saxon). Afin d'exciter le système, une contrainte extérieure λx^2 est ajoutée à $t < 0$. Cette contrainte est ensuite relâchée à $t \geq 0$ et l'évolution du système est simulée (cf. fig. 2.3).

L'Hamiltonien à N corps correspondant à ce modèle est le suivant :

$$H = \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + V_{ext}(x_i) \right) + \sum_{i < j} V_{int}(x_i - x_j) \delta_{\sigma_i - \bar{\sigma}_j}, \quad (2.1)$$

où $\bar{\sigma}_i$ représente le spin opposé au spin σ_i . Chaque particule étant décrite par une coordonnée x et un spin $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow . Cet Hamiltonien comprend, un terme d'énergie cinétique, un potentiel

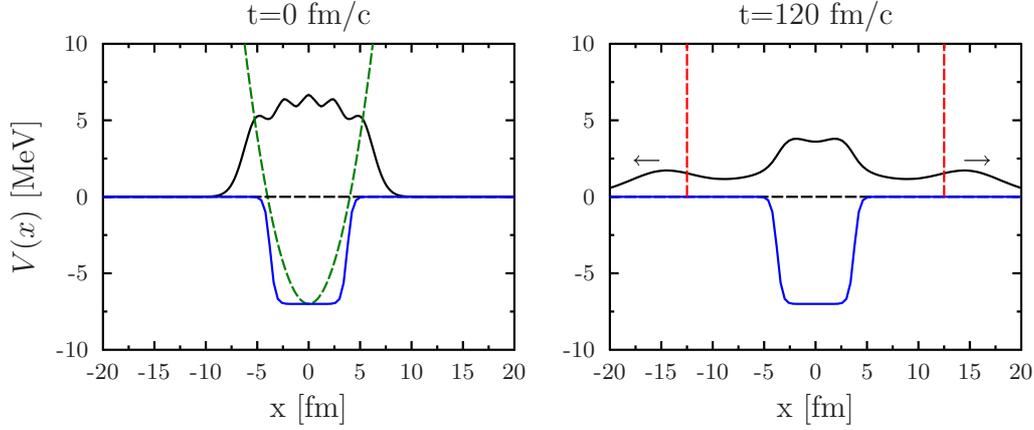


FIG. 2.3 – Schéma présentant le modèle d'évaporation en une dimension. À gauche, la densité à un corps et le potentiel confinant sont tracés durant la phase d'initialisation. À droite, la densité est tracée pour un temps intermédiaire après que la contrainte ait été relaxée.

extérieur et une interaction à deux corps entre particules de spins opposés. Le potentiel extérieur s'écrit comme,

$$V_{ext}(x) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{|x|-x_0}{a}\right)} + \lambda x^2 \quad \text{pour } t \leq 0, \quad (2.2)$$

$$V_{ext}(x) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{|x|-x_0}{a}\right)} \quad \text{pour } t > 0. \quad (2.3)$$

L'interaction entre les particules est choisie de forme gaussienne :

$$V_{int}(x_i - x_j) = V_{02} \exp\left(-\frac{(x_i - x_j)^2}{2\sigma_0^2}\right). \quad (2.4)$$

Le choix d'une force de portée finie permet d'éviter les problèmes de divergence UV généralement rencontrés lorsque HFB ou BCS sont appliqués avec des interactions de portée nulle [50].

Nous allons maintenant déterminer les équations associées aux différentes théories dans le cadre de ce modèle à une dimension.

2.3 Détermination des équations pour chacune des théories

Dans cette section, les équations des différentes théories décrites dans le chapitre précédent sont données de manière explicite pour le modèle à une dimension. Ainsi, les équations d'évolution TDHFB sont dérivées tandis que TDHF+BCS et TDHF sont déduites de celle-ci.

2.3.1 Détermination des équations TDHFB pour le modèle à une dimension

Pour déterminer les équations TDHFB, on réécrit tout d'abord l'Hamiltonien en seconde quantification,

$$H = \sum_{\sigma xx'} h_0(x, x') \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x') + \sum_{xx'} V_{int}(x, x') \psi_{\uparrow}^{\dagger}(x) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(x') \psi_{\downarrow}(x') \psi_{\uparrow}(x), \quad (2.5)$$

avec l'opérateur de champ $\psi_{\sigma}^{\dagger}(x)$ qui crée une particule en x avec le spin σ . L'Hamiltonien étant symétrique en spin, on peut utiliser une transformation de Bogoliubov particulière [51] qui va réduire l'information due à la symétrie de spin :

$$\beta_{\alpha+}^{\dagger} = \Delta x \sum_x \left(u_{\alpha}(x, t) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(x) + v_{\alpha}(x, t) \psi_{\downarrow}(x) \right), \quad (2.6)$$

$$\beta_{\alpha-}^{\dagger} = \Delta x \sum_x \left(u_{\alpha}(x, t) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(x) - v_{\alpha}(x, t) \psi_{\uparrow}(x) \right). \quad (2.7)$$

Dans cette transformation, l'espace est discrétisé avec un pas de réseau Δx et est supposé de taille finie entre $[-L, L]$, ceci permettant d'utiliser les relations matricielles. Dans la suite on utilisera la convention $\Delta x \sum_x \rightarrow \sum_x$. En utilisant cette transformation de Bogoliubov, on obtient une expression de la densité à un corps et du tenseur d'appariement,

$$\rho_{x\uparrow, x'\downarrow} = \rho_{x\downarrow, x'\uparrow} = 0, \quad (2.8)$$

$$\rho_{xx'} \equiv \rho_{x\uparrow, x'\uparrow} = \rho_{x\downarrow, x'\downarrow} = (v^* v^t)_{xx'} = \sum_{\alpha} v_{\alpha}^*(x) v_{\alpha}(x'), \quad (2.9)$$

$$\kappa_{x\uparrow, x'\uparrow} = \kappa_{x\downarrow, x'\downarrow} = 0, \quad (2.10)$$

$$\kappa_{xx'} \equiv \kappa_{x\downarrow, x'\uparrow} = -\kappa_{x\uparrow, x'\downarrow} = (v^* u^t)_{xx'} = \sum_{\alpha} v_{\alpha}^*(x) u_{\alpha}(x'). \quad (2.11)$$

Avec ces notations, le nombre de particules s'exprime comme $N = 2\text{Tr}(\rho)$ tandis que les fluctuations associées au nombre de particules vérifient $\langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2 = 4\text{Tr}(\kappa \kappa^+) = 4\text{Tr}(\rho - \rho^2)$. Le champ moyen et le champ d'appariement, définis au chapitre précédent, deviennent :

$$\Gamma(x) = \sum_{x'} V_{int}(x, x') \rho(x', x'), \quad (2.12)$$

$$\Delta(x, x') = \Delta(x, \downarrow, x', \uparrow) = V_{int}(x, x') \kappa(x, x'). \quad (2.13)$$

L'énergie totale du système est donnée par :

$$E = \frac{\langle \Psi_{bogo} | H | \Psi_{bogo} \rangle}{\langle \Psi_{bogo} | \Psi_{bogo} \rangle} = \sum_{xx'} \left(2h_0(x, x') + \Gamma(x) \delta_{xx'} \right) \rho(x', x) + \Delta(x, x') \kappa^*(x, x'). \quad (2.14)$$

Une dérivation utilisant le principe variationnel conduit aux équations aux valeurs propres :

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & -\Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Le théorème de Thouless, en suivant la méthode précédemment décrite (voir section 1.3.2), nous donne les équations du mouvement :

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t u_\alpha &= \kappa h^* v_\alpha + \rho h^\dagger u_\alpha + \kappa \Delta^* u_\alpha - \rho \Delta v_\alpha \\ i\hbar\partial_t v_\alpha &= -(1 - \rho^*) h^* v_\alpha - \kappa^\dagger h^\dagger u_\alpha - (1 - \rho^*) \Delta^\dagger u_\alpha + \kappa^\dagger \Delta^t v_\alpha \end{cases}. \quad (2.16)$$

Cette expression peut être simplifiée pour finalement s'écrire,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h & -\Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

avec $h = h_0(x, x') + \Gamma(x)$. On retrouve ainsi des équations similaires aux équations générales HFB (1.27) et TDHFB (1.62).

La diagonalisation de la matrice \mathcal{H} déterminant les composantes u_α et v_α et ces composantes déterminant la matrice \mathcal{H} , le problème est dit auto-consistant. De plus il faut ajuster une contrainte de façon à obtenir le bon nombre moyen de particules. En pratique, le schéma numérique suivant a été utilisé pour résoudre les équations :

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{H} & \Rightarrow & U, V \Rightarrow \Gamma, \Delta \\ \uparrow & & \downarrow \\ & & \text{ajustement du paramètre } \lambda \end{array} \quad (2.18)$$

Le principe variationnel assurant la convergence de cet algorithme. Pour la résolution dynamique, un algorithme Runge-Kutta à l'ordre 4 est utilisé.

Comparaison des équations (2.16) et (2.17)

On compare ici l'efficacité numérique des deux équations (2.16) et (2.17). Le système est tout d'abord initialisé dans son état fondamental. Sans changer le potentiel, les équations du mouvement sont résolues numériquement. Dans ce cas, on s'attend à ce que le système n'évolue pas aux erreurs numériques près. L'accumulation de ces erreurs peut néanmoins modifier les constantes du système comme par exemple le nombre de particules.

Un exemple de stabilité numérique des propriétés statiques du système lorsque les équations TDHFB sont sous la forme (2.16) ou sous la forme (2.17) est donné sur la figure 2.4. On voit sur cette figure, que la formule (2.16) préserve mieux le nombre de particules. Cependant, le temps de calcul pour la formule (2.16) est environ quatre fois plus important que lorsque (2.17) est utilisée. Cela est dû au plus grand nombre d'opérations matricielles. Nous avons donc choisi d'utiliser la formule (2.17).

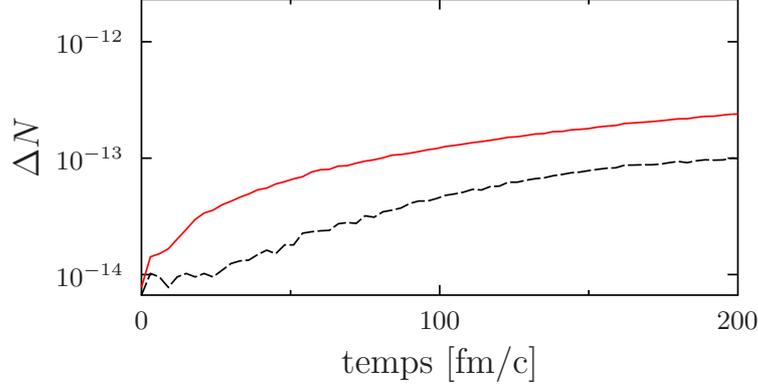


FIG. 2.4 – Erreurs numériques sur le nombre moyen de particules au cours du temps, $\Delta N = |N(t) - N(0)|$ lorsque l'état fondamental HFB est évolué en temps avec les équations TDHFB. L'évolution obtenue avec la formule (2.16) est présentée avec des pointillés et la ligne continue est obtenue avec la formule (2.17).

Conditions aux bords absorbantes et potentiel imaginaire

La taille du réseau étant finie, lorsque les particules sont émises, elles sont réfléchies sur les bords du réseau. Lorsqu'on étudie un phénomène pendant un temps relativement long, les particules émises sont réfléchies sur le noyau et perturbent les observables d'intérêt. Pour éviter ce phénomène, il faut augmenter la taille de la boîte de façon importante. Ceci est possible dans notre cas modèle qui est peu coûteux numériquement. Dans un cas réaliste en 3D, il serait impossible d'utiliser un espace très grand. En pratique, il est possible de réduire la taille de l'espace numérique en utilisant des conditions aux bords absorbantes. Pour cela, des méthodes exactes existent [52, 53], mais elles sont assez complexes à mettre en œuvre. Une alternative simple est d'utiliser un potentiel imaginaire aux bords de l'espace. En effet, lorsqu'on applique un potentiel imaginaire à un corps local dénoté par $iV_{im}(x)$ sur une fonction d'onde, on obtient l'équation différentielle suivante :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = iV_{im}(x)\varphi(x, t), \quad (2.19)$$

dont la solution est :

$$\varphi(x, t) = e^{\frac{V_{im}(x)t}{\hbar}} \varphi(x, 0), \quad (2.20)$$

en choisissant un potentiel imaginaire de signe négatif $e^{\frac{V_{im}(x)t}{\hbar}} < 1$. Ce qui a pour effet d'atténuer la fonction d'onde au cours du temps à la position x . Pour que l'effet absorbant du potentiel imaginaire soit optimal, c'est-à-dire pour que le potentiel imaginaire n'entraîne pas lui aussi

2.3. Détermination des équations pour chacune des théories

une réflexion, celui-ci doit être assez doux. En effet, un potentiel trop dur réfléchirait l'onde. Nous avons choisi un potentiel $V_{im}(x)$ de forme linéaire [54].

$$V_{im}(x) = 0 \quad \text{si } |x| < L - x_{im}, \quad (2.21)$$

$$V_{im}(x) = iV_{im} \frac{|x| - L + x_{im}}{x_{im}} \quad \text{si } |x| > L - x_{im}. \quad (2.22)$$

Ce potentiel est illustré dans le modèle à une dimension sur la figure 2.5.

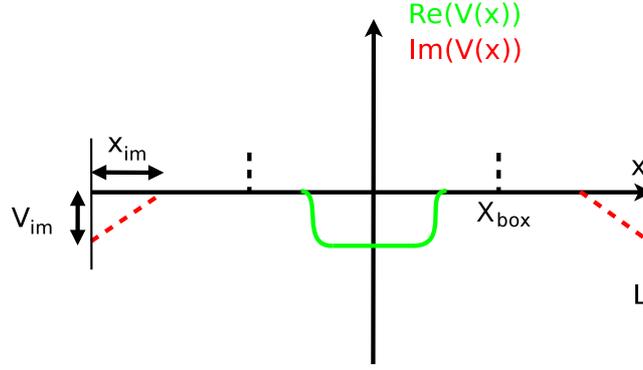


FIG. 2.5 – Représentation schématique de l'espace utilisé pour la dynamique, en trait plein vert, le potentiel réel de type Woods-Saxon et en tirets rouges le potentiel imaginaire appliqué aux bords de la boîte.

La méthode du potentiel imaginaire, fonctionne correctement pour TDHF mais amène à certaines ambiguïtés lorsqu'elle est utilisée dans le cadre de la théorie TDHFB [23]. De manière naïve, on s'attendrait à ce qu'on puisse directement ajouter un potentiel imaginaire à l'hamiltonien à un corps dans la formule (2.17), on obtiendrait alors les équations suivantes,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h + V_{im} & -\Delta \\ -\Delta^* & -h^* + V_{im} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

De sorte à tester cette équation du mouvement, le système a été initialisé avec une contrainte en λr^2 qui est relâchée à $t = 0$. Lors de l'évolution en temps, $N_B(t)$, le nombre de particules à l'intérieur d'une boîte $[-X_{box}, X_{box}]$ est calculé en intégrant la densité à un corps :

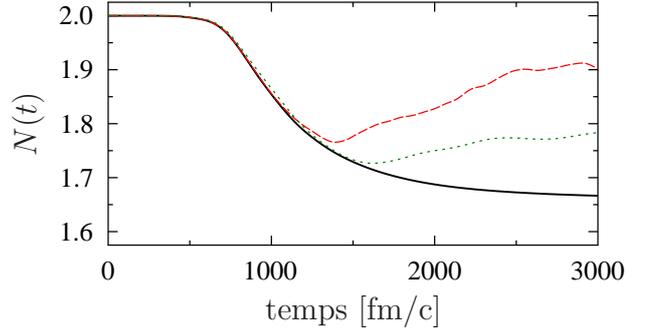
$$N_B(t) = \sum_\sigma \int_{-X_{box}}^{X_{box}} \rho_{x\sigma x\sigma}(t) dx. \quad (2.24)$$

Afin de tester l'efficacité de l'ajout du potentiel imaginaire, plusieurs calculs sont comparés. L'évolution de $N(t)$ dans une petit espace ($L=100$ fm) sans et avec potentiel imaginaire, L'évolution dans un espace très grand ($L=200$ fm) qui peut être considéré comme le cas parfait sans réflexion aux bords. Dans le cas sans potentiel imaginaire, $N(t)$ se comporte normalement

jusqu'à un temps donné puis augmente puisque les fonctions d'ondes reviennent vers le noyau (voir Fig. 2.6).

Sur la figure 2.6, le potentiel imaginaire est ajouté avec la formule (2.23), le résultat est alors légèrement amélioré. Mais indépendamment de l'amplitude du potentiel imaginaire, un résultat non physique persiste. Ceci est dû au fait que les équations (2.23) obtenues en ajoutant à la main un potentiel imaginaire à h ne préservent pas la condition d'unitarité $uu^\dagger + v^*v^t = 1$.

FIG. 2.6 – Évolution du nombre de particules à l'intérieur de la boîte avec un réseau très grand (ligne continue noire), avec un réseau plus étroit (tirets rouges) et avec un potentiel imaginaire appliqué avec la formule (2.23) (pointillés verts).



Pour obtenir une évolution qui conserve la propriété d'unitarité au cours du temps et qui donne la bonne évolution, il est nécessaire d'ajouter le potentiel imaginaire dans la formule (2.16). On obtient ainsi l'équation du mouvement suivante,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_\alpha = \kappa(h^* - V_{im})v_\alpha + \rho(h^\dagger - V_{im})u_\alpha + \kappa\Delta^*u_\alpha - \rho\Delta v_\alpha \quad (2.25)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} v_\alpha = -(1 - \rho^*)(h^* - V_{im})v_\alpha - \kappa^\dagger(h^\dagger - V_{im})u_\alpha - (1 - \rho^*)\Delta^\dagger u_\alpha + \kappa^\dagger\Delta^t v_\alpha, \quad (2.26)$$

L'évolution est alors unitaire. Cette formule peut ensuite être simplifiée, si on utilise l'équation TDHFB,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h - \rho V_{im} & -\Delta - \kappa V_{im} \\ -\Delta^* + \kappa^* V_{im} & -h^* + (1 - \rho^*) V_{im} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

qui diffère de manière significative avec (2.23). Cette formule reste assez lourde numériquement puisqu'il faut multiplier les matrices densités qui ne sont pas diagonales avec le potentiel imaginaire. Le nombre d'opérations est donc important. Afin de simplifier l'application du potentiel imaginaire, on peut supposer que les densités des ondes évaporées sont très faibles en bord de boîte (c'est-à-dire, $\rho V_{im} \simeq 0$ et $\kappa V_{im} \simeq 0$), ce qui conduit à :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h & -\Delta \\ -\Delta^* & -h^* + V_{im} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

La fig. 2.7 compare les résultats obtenus avec les deux dernières formules dans un petit réseau, avec le cas d'une évolution dans un réseau plus grand. Cette comparaison montre (i) que

l'ajout d'un potentiel imaginaire qui conserve l'unitarité permet de s'affranchir du problème des particules réfléchies en bord de boîte (ii) que l'utilisation de la formule approchée (2.28) dans le cas considéré donne de très bons résultats et permettra donc d'alléger l'implémentation numérique.

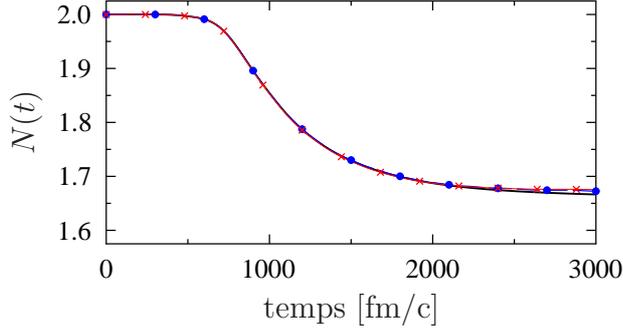


FIG. 2.7 – Évolution du nombre de particules à l'intérieur de la boîte avec un espace très grand (ligne continue noire), avec un potentiel imaginaire appliqué selon la formule (2.27) (croix rouges) et avec la formule (2.28) (points bleus).

2.3.2 Équations TDHF+BCS pour le modèle à un corps

Pour la théorie TDHF+BCS, on peut utiliser directement les équations (1.65) à (1.67) du fait que les équations du mouvement BCS supposent déjà une symétrie en spin. Les équations s'écrivent dans le cas présent comme :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_\alpha(t)}{\partial t} = (h(t) - \epsilon_\alpha(t))\varphi_\alpha(t), \quad (2.29)$$

$$i\hbar \frac{\partial n_\alpha(t)}{\partial t} = \kappa_\alpha(t)\Delta_\alpha^*(t) - \kappa_\alpha^*(t)\Delta_\alpha(t), \quad (2.30)$$

$$i\hbar \frac{\partial \kappa_\alpha(t)}{\partial t} = \kappa_\alpha(t)(\epsilon_\alpha(t) + \eta_{\bar{\alpha}}(t)) + \Delta_\alpha(t)(2n_\alpha(t) - 1). \quad (2.31)$$

Contrairement à la théorie HFB, dans l'approximation BCS, l'hamiltonien de champ moyen est diagonal dans la même base que la densité, c'est-à-dire :

$$h = \sum_{k \geq 0} |\varphi_\alpha\rangle \epsilon_\alpha \langle \varphi_\alpha|, \quad (2.32)$$

$$\rho = \sum_{k \geq 0} |\varphi_\alpha\rangle n_\alpha \langle \varphi_\alpha| \quad \text{avec} \quad 0 \leq n_\alpha \leq 1. \quad (2.33)$$

L'évolution est donc séparée en deux parties, l'évolution des fonctions d'ondes qui tient compte du champ moyen, et l'évolution des nombres d'occupation qui tient compte de l'appariement. Ces deux équations étant couplées par le fait que les n_α dont l'évolution est due à l'appariement entrent dans le calcul de h et les ϵ_α entre dans celle de κ_α .

2.4 Solution exacte pour deux particules

L'un des intérêts de l'utilisation du modèle en une dimension est la possibilité d'accéder facilement à la solution exacte de l'hamiltonien (2.1) pour deux particules. En effet, dans ce cas, la fonction d'onde à 2 corps s'écrit, dans le canal $S=0$:

$$\varphi(x_1, \sigma_1, x_2, \sigma_2, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\delta_{\sigma_1\uparrow}\delta_{\sigma_2\downarrow} - \delta_{\sigma_1\downarrow}\delta_{\sigma_2\uparrow}) \varphi(x_1, x_2, t). \quad (2.34)$$

Et l'équation d'évolution s'écrit :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi(x_1, x_2, t) = \left[\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + v_{ext}(x_1) + v_{ext}(x_2) + V_{int}(x_1 - x_2) \right] \varphi(x_1, x_2, t), \quad (2.35)$$

qui n'est autre qu'une équation de Schrödinger à deux dimensions. Ainsi, il est possible de traiter exactement les corrélations. Toutefois, la résolution numérique est plus lourde puisqu'il faut considérer un espace de dimension M^2 (M étant le nombre de pas dans le réseau).

La fonction d'onde donne directement la matrice densité à deux corps, et la matrice densité à un corps est déduite de celle-ci :

$$\rho^{(2)}(x, x', t) = |\varphi(x, x', t)|^2, \quad (2.36)$$

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} (\rho^{(2)}(x, x', t) + \rho^{(2)}(x', x, t)) dx'. \quad (2.37)$$

La matrice densité à un corps en x dépend donc de la fonction d'onde totale en (x, x') avec x' allant de $-\infty$ à $+\infty$. Si un potentiel imaginaire est utilisé aux bords de l'espace à deux dimensions alors la densité à un corps sur l'ensemble de l'espace est modifiée. Il est intéressant de noter qu'il n'est donc pas possible d'utiliser un potentiel imaginaire pour cette théorie et le calcul doit être effectué dans une boîte très grande ($L=200$ fm).

À partir de la densité locale, on accédera de la même manière au nombre de particules évaporées en calculant,

$$N_{\mathcal{B}}(t) = \int_{-X_{box}}^{X_{box}} \rho(x, t) dx. \quad (2.38)$$

2.5 Composante non physique de l'évolution TDHF+BCS

Pour déterminer la source des oscillations non physique rencontrées sur la figure 2.2, on cherche tout d'abord à savoir si ces oscillations sont présentes avec les autres théories. L'émission de particules d'un système confiné a été systématiquement étudiée dans le cas de deux particules en utilisant (i) la solution exacte, (ii) la solution TDHFB (iii) la solution TDHF+BCS. La figure 2.8 présente les résultats du modèle d'évaporation pour deux particules. Les évolutions exacte et TDHFB ont des comportements asymptotiques semblables bien que TDHFB surestime l'évaporation. Quand à l'évolution TDHF+BCS, elle possède une oscillation non physique du nombre de particules. Ce comportement non physique est donc propre à la théorie TDHF+BCS.

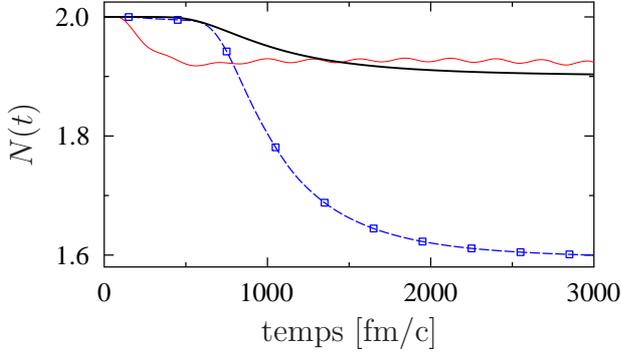


FIG. 2.8 – Nombre de particules à l'intérieur de la boîte au cours du temps. La solution exacte (ligne noire continue) est comparée à la théorie TDHFB (carrés bleus) et à la solution obtenue avec TDHF+BCS (ligne fine rouge).

2.5.1 Oscillation du nombre de particules

Pour mieux comprendre l'origine de ces oscillations, on peut exprimer le nombre de particules $N(t)$ dans la base canonique dénotée par $\{\varphi_i\}$:

$$N(t) = 2 \sum_i n_i(t) P_i(t) \quad \text{avec} \quad P_i(t) = \int_{-X_{box}}^{X_{box}} |\varphi_i(x)|^2 dx. \quad (2.39)$$

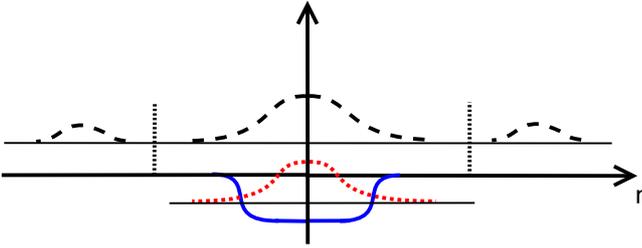


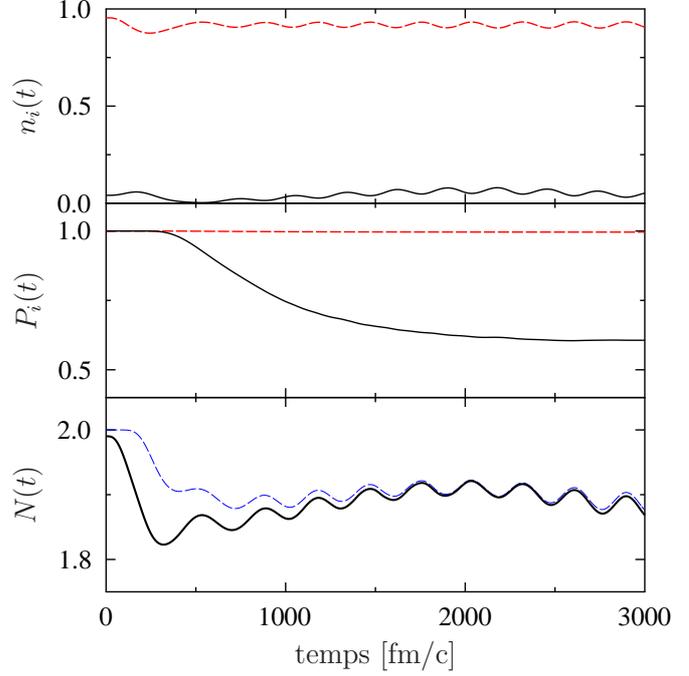
FIG. 2.9 – illustration du modèle simple de TDHF+BCS avec deux états. Le niveau le plus lié est en pointillés rouges et le niveau situé partiellement dans le continuum en tirets noirs.

Supposons pour simplifier que la densité à un corps est décrite essentiellement par deux états représentés sur la figure 2.9. Dans ce cas, on a

$$N(t) = 2(n_1(t)P_1(t) + n_2(t)P_2(t)). \quad (2.40)$$

L'évolution des occupations des deux états de plus basse énergie et des probabilités d'émission associées obtenue en TDHF+BCS est présentée sur la figure 2.10. On voit sur cette figure que l'approximation de deux niveaux participant est relativement bonne pour le cas présenté en figure 2.8. Sur cette figure, on voit que (i) le niveau le plus lié ne contribue pas, (ii) P_2 ne comporte pas d'oscillation, (iii) les nombres d'occupation oscillent au cours du temps. Les oscillations de $N(t)$ ont pour origine l'oscillation des nombres d'occupation. Cette oscillation des nombres d'occupation est attendue pour les théories allant au delà du champ moyen. C'est-à-dire que même dans le cas exacte ou TDHFB, les états de la base canonique ont des nombres d'occupation qui dépendent du temps et peuvent osciller. Mais la raison pour laquelle les oscillations de $N(t)$ ne sont présentes que pour TDHF+BCS est que cette théorie ne respecte pas l'équation de continuité contrairement aux autres approches présentées ici.

FIG. 2.10 – En haut : nombres d'occupation en fonction du temps. Au centre : Probabilités de présence dans la boîte. Les résultats pour $i = 1$ sont présentés avec des pointillés rouges et pour $i = 2$ avec un ligne continue. En bas : Nombre de particules calculé comme $N(t) = 2(n_1P_1 + n_2P_2)$ en ligne continue noire et $N(t)$ calculé avec tous les états en tirets bleus.



2.5.2 Équation de continuité

L'équation de continuité pour la densité à un corps s'écrit,

$$\frac{d\rho(x, t)}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(x, t), \quad (2.41)$$

où $j(t)$ est le courant de particules. Cette équation permet de mieux caractériser le caractère non physique de ces oscillations. Cette propriété est respectée avec l'évolution exacte et avec TDHFB, en effet, pour l'exacte,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d|\varphi(x_1, x_2, t)|^2}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi^*(x_1, x_2, t) \left[\left(\frac{d^2}{dx_1^2} + \frac{d^2}{dx_2^2} \right) \varphi(x_1, x_2, t) \right] \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{d^2}{dx_1^2} + \frac{d^2}{dx_2^2} \right) \varphi^*(x_1, x_2, t) \right] \varphi(x_1, x_2, t). \end{aligned} \quad (2.42)$$

La densité à un corps évolue donc comme,

$$\begin{aligned} \frac{d\rho(x_1)}{dt} &= \frac{-\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x_1, x_2, t) \left[\frac{d^2}{dx_1^2} \varphi(x_1, x_2, t) \right] \\ &+ \left[\frac{d^2}{dx_1^2} \varphi^*(x_1, x_2, t) \right] \varphi(x_1, x_2, t) dx_2. \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$(2.44)$$

Avec la définition générale du courant pour un système à N corps,

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}_1) = \frac{\hbar}{2mi} \int \Psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) \nabla_{\mathbf{r}_1} \Psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) - (\nabla_{\mathbf{r}_1} \Psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N)) \Psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N, \quad (2.45)$$

l'équation de continuité (2.41) est respectée. De même avec TDHFB,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(x, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} (\rho(x', x) - \rho(x, x')) \Big|_{x'=x} + \int \kappa(x, x') \Delta^*(x', x) - \Delta(x, x') \kappa^*(x', x) dx'. \quad (2.46)$$

Le deuxième terme s'annulant, on retrouve bien l'équation de continuité (2.41).

Il est important de conserver cette propriété pour les théories de transport lorsqu'on coupe un système à N corps en deux parties. En effet, à partir de cette équation, on peut exprimer l'évolution du nombre de particules dans la boîte :

$$\frac{dN(t)}{dt} = - \int_{-X_{box}}^{X_{box}} -\frac{\partial j(x, t)}{\partial x} dx = j(X_{box}, t) - j(-X_{box}, t). \quad (2.47)$$

L'évolution de $N(t)$ ne dépend donc que du courant de particules aux bords de la boîte. Dans le cas TDHF+BCS, en utilisant le fait que $\rho(x, t) = \varphi_\alpha(x, t) n_\alpha(t) \varphi_\alpha(x, t)$ et en reportant les équations (2.29) et (2.30), on obtient :

$$\frac{d\rho(x, t)}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(x, t) + 2 \sum_i |\varphi_i(x, t)|^2 \frac{dn_i(t)}{dt}. \quad (2.48)$$

L'équation reliant la densité et le courant contient donc un terme additionnel proportionnel à l'évolution des nombres d'occupation. L'évolution de $N(t)$ est modifiée par ce terme supplémentaire :

$$\frac{dN(t)}{dt} = j(X_{box}, t) - j(-X_{box}, t) + 2P_i(t) \frac{dn_i(t)}{dt}. \quad (2.49)$$

qui est à l'origine des oscillations non physiques de $N(t)$.

2.5.3 Approximation des nombres d'occupation constants

Pour corriger les pathologies de TDHF+BCS, une solution simple consiste à figer les nombres d'occupation au cours du temps. L'équation (2.41) étant alors respectée. L'évolution du système n'est alors gouvernée que par l'évolution des ondes avec le champ moyen. Cette théorie sera appelée FOA pour *frozen occupation approximation*. Même si les nombres d'occupation et les coefficients κ_α sont constants au cours du temps, les corrélations évoluent puisque la matrice densité à deux corps dépend des fonctions d'ondes individuelles. Il faut noter que cette approximation a déjà été utilisée pour étudier les résonances géantes dipolaires [55].

Dans la suite de ce mémoire, une telle approximation sera utilisée uniquement dans le cas où il sera nécessaire de couper un système superfluide en deux sous-parties. Ce sera le cas, par exemple, dans le chapitre 5, où nous nous intéresserons au transfert de particules. Lorsqu'un système unique sera étudié, par exemple les résonances géantes au chapitre 4, l'évolution complète TDHF+BCS sera effectuée.

2.6 Comparaison des différentes théories

Pour comparer les différentes théories avec deux particules, les paramètres présentés dans la table 2.6 ont été utilisés. Trois jeux de paramètres différents sont présentés, qui correspondent à des interactions attractives à deux corps respectivement faible, moyenne et forte. Pour chaque interaction, la valeur du potentiel en Woods-Saxon est ajustée pour obtenir la même énergie de liaison du noyau : -5,7 MeV.

Constantes numériques		Potentiel extérieur	
pas du réseau	0,4 fm	λ	0,1 MeV/fm ²
pas en temps	0,2 fm/c	V_0	-7; -5; -2 MeV
taille du réseau	400 fm	a	0,8 fm
R_{box}	40 fm	r_0	1,8 fm

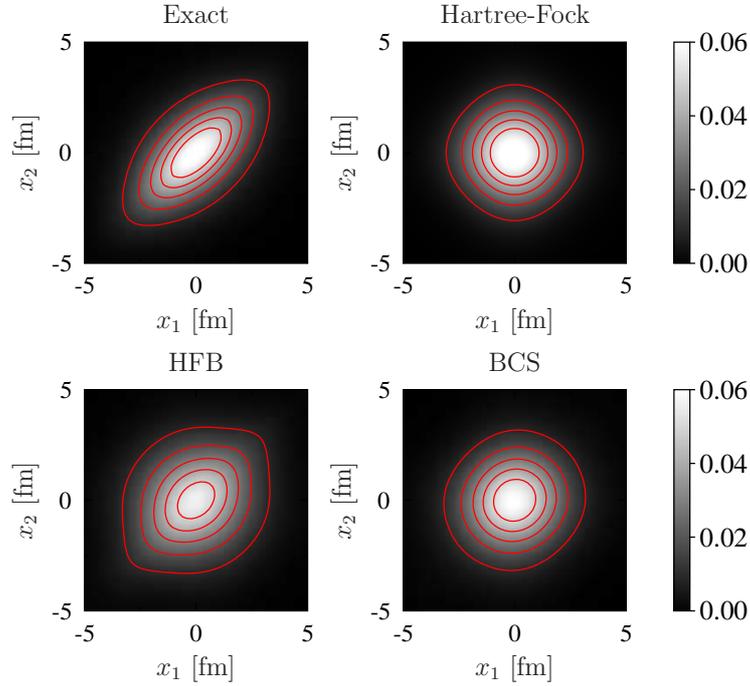
Potentiel imaginaire		Interactions à deux corps	
V_{im}	-2 MeV	V_{02}	-2,84;-8,67;-16,28 MeV
r_{im}	15 fm	σ_0	2 fm

TAB. 2.1 – Valeurs utilisées pour les calculs avec deux particules.

2.6.1 Résultats statiques

Il est intéressant de comparer les résultats statiques des différentes théories. La figure 2.11 présente les corrélations entre les deux particules avec une interaction forte. La figure présente la probabilité pour la particule 2 d'être en x_2 sachant que la particule 1 est en x_1 .

On voit que pour Hartree-Fock, il n'y a pas de corrélations. À l'inverse, pour BCS et HFB, l'interaction attractive déforme la densité le long de l'axe $x_1=x_2$. Néanmoins les corrélations obtenues avec l'appariement ne sont pas aussi fortes que dans la solution exacte, puisque l'espace variationnel exact est plus grand.


 FIG. 2.11 – Densité à deux corps $\rho^{(2)}(x_1 \uparrow, x_2 \uparrow)$

2.6.2 Résultats dynamiques

Les différentes théories dynamiques sont testées avec deux particules sur la figure 2.12. Il faut noter que pour l'interaction faible et moyenne, il n'y a pas d'appariement avec BCS et HFB. En effet, lorsque l'interaction est en dessous d'un certain seuil, appelé seuil d'appariement, la minimisation de l'énergie HFB ou BCS mène à un déterminant de Slater. Cet effet de seuil étant plus important dans ce modèle en une dimension, où les états individuels sont espacés en énergie de façon importante. Dans ce cas, la dynamique est identique à TDHF puisque la brisure de symétrie associée au nombre de particules qui est à l'origine de l'appariement n'a pas eu lieu au départ et ne peut pas apparaître spontanément durant la dynamique. En effet, si à l'instant t , $\kappa=0$ alors à l'instant $t + dt$, $\kappa=0$.

La figure 2.12 montre que pour une interaction faible le champ moyen reproduit très bien l'évolution exacte. Cela montre que, dans ce cas, l'évaporation est dominée par l'évaporation individuelle de particules. Lorsque l'interaction augmente, l'évolution TDHF sous-estime le nombre de particules évaporées. Cette sous-estimation provient de deux sources, (i) à $t=0$, les corrélations initiales induisent une dispersion des nombres d'occupations autour de l'énergie de Fermi. Ainsi, des états moins liés peuvent être occupés, ces états pouvant plus facilement émettre des particules, (ii) l'effet des corrélations au cours du temps. La FOA prend en compte (i) tandis que pour TDHFB et la solution exacte, (i) et (ii) influence l'émission.

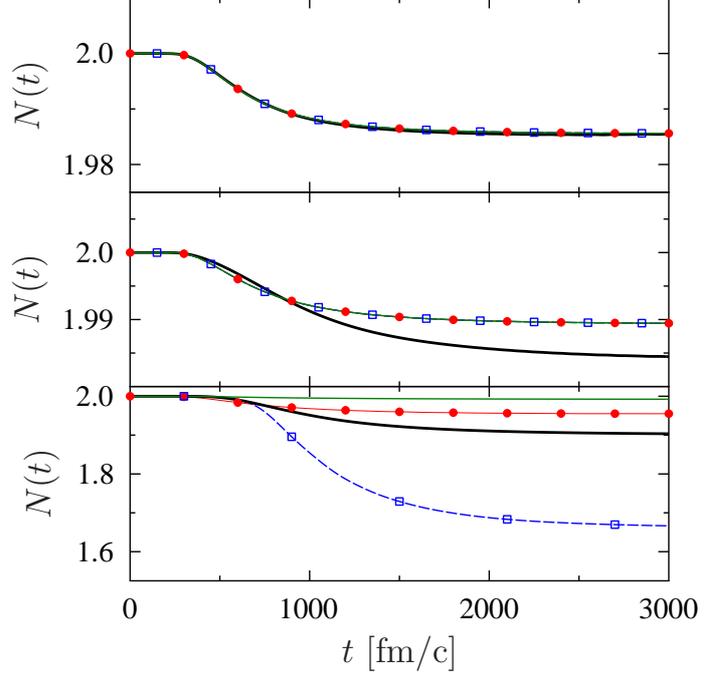


FIG. 2.12 – Nombre de particules à l'intérieur de la boîte au cours du temps avec les interactions faible, moyenne et forte (respectivement figure du haut, du milieu et du bas). La solution exacte (ligne noire épaisse) est comparée aux résultats de TDHFB (carrés bleus), FOA (points rouges) et de TDHF (ligne verte).

Il est intéressant de noter que la dynamique avec les nombres d'occupation constants semble donner de bon résultats. En effet, même si pour des temps courts l'évolution TDHFB est plus correcte, la valeur asymptotique de $N(t)$ avec la FOA est assez proche de la valeur exacte alors que TDHFB donne lieu à une évaporation beaucoup trop importante. Une explication possible de cette surestimation est la brisure de symétrie $U(1)$ inhérente aux théories HFB. Pour vérifier cela, il est possible de restaurer cette symétrie durant l'évolution en utilisant les techniques de projection.

2.7 Restauration de la symétrie associée au nombre de particules durant l'évolution

La brisure de symétrie est un outil puissant qui permet à faible coût de prendre en compte certaines corrélations [21]. Cependant cette technique peut conduire parfois à des difficultés dans l'interprétation des résultats. Par exemple, l'erreur sur le nombre de particules peut entraîner une erreur assez importante sur l'énergie de liaison, notamment si l'interaction est à longue portée dans le cas modèle considéré ici (voir la figure 2.13). Dans ce cas, la théorie Hartree-Fock est plus proche de la solution exacte que BCS ou HFB.

Le fait que l'énergie dans les théories HFB et BCS est inférieure à l'énergie exacte peut paraître en contradiction avec le principe variationnel. Cependant l'espace des états BCS ou

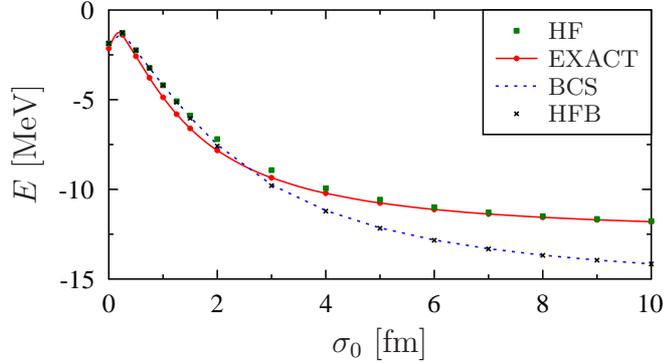


FIG. 2.13 – Comparaison de l'énergie de liaison d'un système de deux particules en interaction et confinées dans un potentiel harmonique. L'énergie pour les différentes théories est tracée en fonction de la portée de la force σ_0 . Les autres paramètres restant constants.

HFB n'est pas contenu dans l'espace des états possibles physiquement. Dans ce cas, il est possible de montrer que c'est l'incertitude sur le nombre de particules dans le système qui permet de trouver un état fondamental de plus basse énergie que le véritable état fondamental.

2.7.1 Effet de la brisure de symétrie associée au nombre de particules dans la dynamique des noyaux superfluides.

Lorsqu'un système est décrit par la théorie BCS ou HFB dans la phase superfluide, le nombre de particules moyen est bien conservé $\langle \hat{N} \rangle = N$. Cependant les fluctuations du nombre de particules $\Delta N = \langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2$ évoluent au cours du temps. Ceci est illustré sur la figure 2.14 pour TDHFB.

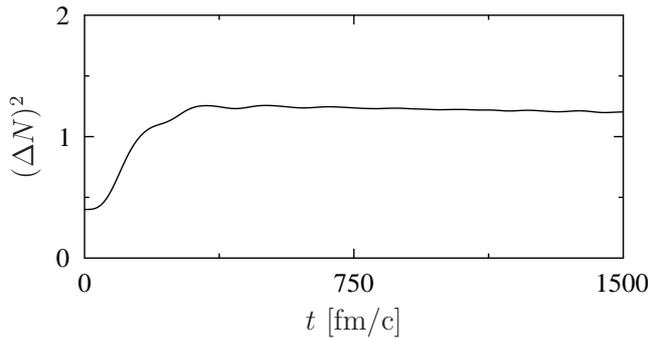


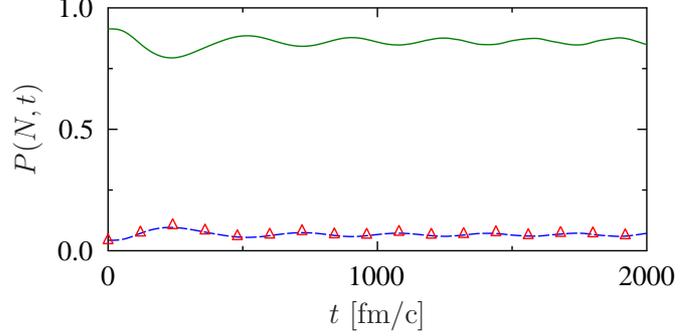
FIG. 2.14 – Fluctuations du nombre de particules total en fonction du temps au cours du phénomène d'évaporation (évolution TDHFB avec une interaction forte).

Cette évolution montre que le système en question correspond à un mélange de configurations ayant des nombres de particules différents. C'est-à-dire, $|\Psi(t)\rangle = \sum_N c_N(t) |\Psi_N(t)\rangle$ avec $\hat{N} |\Psi_N(t)\rangle = N |\Psi_N(t)\rangle$.

Il est possible de déterminer les contributions de chaque composante en utilisant les techniques de projection sur le bon nombre de particules (voir annexe A) :

$$|c_N(t)|^2 = \langle \Psi(t) | \hat{P}(N) | \Psi(t) \rangle. \quad (2.50)$$

FIG. 2.15 – Composante à N particules en fonction du temps, pour $N=0$ (triangles rouges), $N=2$ (ligne continue verte) et $N=4$ (tirets bleus).



Il est à noter que les composantes avec N impair sont toujours nulles, puisque un vide de quasi-particules n'est composé que d'opérateurs de création de paires de particules. Les évolutions de $P(N)=|c_N|^2$ pour $N=0, 2$ et 4 sont tracées sur la figure 2.15 en fonction du temps pour la théorie TDHF+BCS. On voit ainsi, que non seulement la composante physique $N=2$ est présente, mais aussi que les composantes $N=4$ et $N=6$ contribuent de manière non négligeable. Cet aspect devra être traité dans les réactions de manière fine afin de ne pas mélanger les phénomènes physiques avec des phénomènes spurieux.

2.7.2 Projection après variation dans les méthodes dépendantes du temps et émission de particules

Pour calculer le nombre de particules dans une boîte \mathcal{B} sur l'état projeté sur le bon nombre de particules défini par,

$$N_{\mathcal{B}}^{(N)} = \langle \Psi | \hat{P}(N) \hat{N}_{\mathcal{B}} \hat{P}(N) | \Psi \rangle \quad \text{avec} \quad \hat{N}_{\mathcal{B}} = \int_{-X_{\text{box}}}^{X_{\text{box}}} \hat{\rho}(x) dx, \quad (2.51)$$

on utilise les équations (A.12) et (A.13). Avec cette méthode, on peut à chaque instant t , calculer le nombre de particules dans la boîte pour l'état projeté sur un nombre de particules donné N dans l'espace total. À noter que cette méthode n'est pas compatible avec le potentiel imaginaire puisque l'ensemble de la fonction d'onde à N corps doit être considéré. Donc seuls les résultats dans une boîte très grande seront présentés. Le résultat pour deux particules est présenté sur la fig. 2.16. La projection a pour effet de réduire la surestimation de l'évaporation. Cela peut s'expliquer par les composantes de 4 et 6 particules présentes dans la fonction d'onde HFB et qui donnent lieu à une évaporation non physique très importante.

Il reste une erreur systématique entre la dynamique exacte et la dynamique TDHFB projetée. Cet écart peut s'expliquer par le caractère non auto-consistant de la dynamique TDHFB projetée. En effet, le champ moyen et le champ d'appariement sont calculés avec la fonction d'onde non projetée. Afin de lever cette difficulté, il serait nécessaire de considérer un technique de variation après la projection (VAP) qui consisterait à effectuer l'évolution auto-consistante

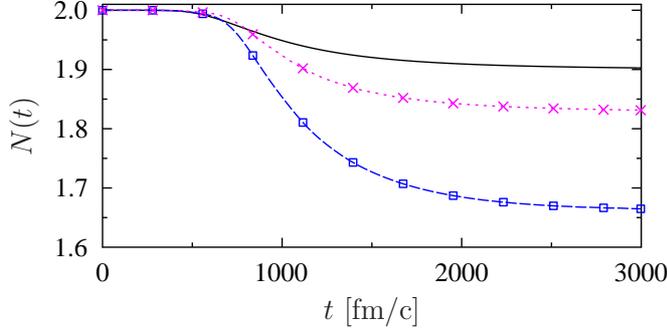


FIG. 2.16 – Nombre de particules dans la boîte au cours du temps. La dynamique exacte (ligne noire continue) est comparée à TDHFB (carrés bleus) et à TDHFB projetée sur le bon nombre de particules (croix violettes).

d'un vide de quasi-particules projeté sur le bon nombre de particules. Cependant cette théorie serait extrêmement difficile à mettre en œuvre pour des raisons de coût numérique.

Néanmoins, on s'attend à ce que l'effet de la non exacte conservation du nombre de particules soit plus faible à mesure que le nombre de particules augmente. Il est donc probable que pour des systèmes comportant quelques dizaines de particules, l'erreur sur le nombre de particules soit moins importante pour les phénomènes dynamiques. Néanmoins, nous verrons dans le chapitre 5 que cette erreur peut toujours avoir des conséquences sur les observables étudiées.

Il faut aussi noter que l'erreur sur le nombre de particules est aussi présente dans la théorie FOA et que lorsqu'on utilise la même technique de projection, l'évaporation est alors sous-estimée.

2.8 Conclusion

Une étude comparative des théories TDHFB et TDHF+BCS a été faite dans un cas à une dimension. Cette étude a permis une première description des aspects pratiques : comparaison des différentes équations résolvant TDHFB, des aspects numériques ainsi que de la possibilité de mettre un potentiel imaginaire dans l'évolution. Cette étude a permis de quantifier dans un cas simple le pouvoir prédictif de ces théories et de mettre en évidence certaines difficultés qui peuvent apparaître lorsqu'on décrit un système superfluide en brisant explicitement le nombre de particules.

Pour TDHFB, le mélange de configuration entre états possédant des nombres de particules différents donne lieu à une surestimation de l'évaporation. Pour palier ce problème, on projette, à posteriori, l'état de quasi-particules sur le bon nombre de particules. Pour TDHF+BCS, la fragmentation des nombres d'occupation reproduit assez bien le nombre moyen de particules évaporées, mais cette théorie ne respectant pas l'équation de continuité, une oscillation du nombre de particules apparaît au cours du temps. Une théorie avec des nombres d'occupation constants au cours du temps a donc été utilisée.

Dans la suite de ce travail, nous utiliserons la théorie TDHF+BCS qui permet de traiter

l'appariement sans pour autant augmenter de manière rédhibitoire le travail numérique à fournir. Celle-ci sera utilisée soit complètement soit en FOA si on a besoin de couper le système en deux.

Chapitre 3

La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité

De façon à obtenir des résultats réalistes avec les théories de champ moyen, il est nécessaire d'utiliser des interactions effectives. Il existe plusieurs types d'interactions effectives. On note en particulier, les interactions de portée finie de type Gogny [56] et les interactions de portée nulle de type Skyrme [57]. Bien qu'on commence à voir des calculs dynamiques avec ces premières [25], seules les interactions de portée nulle permettent à l'heure actuelle de simuler les réactions nucléaires. Ici, nous allons présenter la théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité (EDF) basée sur l'interaction effective de Skyrme. Le but affiché de nos travaux est de développer un équivalent dynamique du code EV8 publié en 2005 [12]. Celui-ci permet de décrire la théorie HF+BCS en imposant des symétries spécifiques. La majeure partie du travail a été d'étendre le code TDHF3D en incluant l'appariement de manière cohérente avec EV8. Le code EV8 sera présenté, ainsi que des applications aux cas statiques. Le code TDHF3D permettant de traiter la dynamique des noyaux sera présenté ainsi que des aspects spécifiques liés à l'appariement. Ces deux codes, EV8 et TDHF3D seront ensuite utilisés pour les applications aux cas réalistes des deux prochains chapitres.

3.1 La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité

Lorsque la théorie Hartree-Fock est appliquée à un ensemble de particules en interaction, l'énergie obtenue est systématiquement plus élevée que l'énergie obtenue en résolvant exactement le problème. On peut comprendre simplement ce phénomène à partir du principe variationnel, l'espace variationnel des déterminants de Slater étant contenu dans l'espace variationnel de toutes les fonctions d'onde possibles, le minimum d'énergie obtenue avec la théorie HF sera systématiquement plus élevé que celui tenant compte de tout l'espace variationnel. En physique nucléaire, HF peut donc être appliqué directement avec les interactions nues, mais donne des

résultats loin de la réalité.

En parallèle, beaucoup de propriétés nucléaires peuvent être expliquées en supposant que le noyau est formé de particules interagissant à travers un champ moyen effectif. Face à ce dilemme, la théorie EDF a été proposée. Cette théorie est très proche de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) en matière condensée [58]. Toutefois, la physique nucléaire a ceci de spécifique que les théories EDF sont le plus souvent introduites en utilisant le concept d'interaction effective.

Le but de ces théories est d'écrire l'énergie en fonction de la densité à un corps et de la densité anormale si l'appariement est inclus dans la description. Les paramètres entrants dans l'énergie sont ensuite ajustés directement sur les données expérimentales.

La manière habituelle est, en partant des interactions effectives dans différents canaux, d'obtenir la fonctionnelle en se basant sur une technique ressemblant à HF. Si on suppose que l'interaction n'est qu'à deux corps, on obtient,

$$\mathcal{E}[\rho^{(1)}] = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}^{\rho\rho} \rho_{li} \rho_{kj} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}^{\kappa\kappa} \kappa_{li}^* \kappa_{kj}, \quad (3.1)$$

avec des interactions effectives dans le canal particule-trou ($\bar{v}_{ijkl}^{\rho\rho}$) et particule-particule ($\bar{v}_{ijkl}^{\kappa\kappa}$) qui dépendent de la densité à un corps. Il faut noter la différence entre cette approche et la théorie HF, (i) l'interaction à deux corps dépend de la densité (ii) les interactions $\bar{v}_{ijkl}^{\rho\rho}$ et $\bar{v}_{ijkl}^{\kappa\kappa} \kappa_{li}^* \kappa_{kj}$ sont le plus souvent différentes (iii) le terme d'échange de l'interaction Coulombienne est aussi souvent approximé. Ces approximations donnent lieu actuellement à de nombreuses discussions [59, 60, 61, 62, 63].

3.1.1 La fonctionnelle de Skyrme

Il existe deux types d'interactions effectives, celles de portée finie : par exemple les interactions de Gogny [56] et celles de portée nulle : les interactions de Skyrme. Les deuxièmes étant moins coûteuses numériquement, ce sont celles-ci qui seront utilisées dans nos calculs. La paramétrisation de l'interaction de Skyrme utilisée ici est la suivante [64] :

$$\begin{aligned} v^{\rho\rho} = & t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{t_1}{2}(1 + x_1 P_\sigma) [\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] \\ & + t_2(1 + x_2 P_\sigma) \mathbf{k}' \cdot \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k} + \frac{t_3}{6}(1 + x_3 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \\ & + iW_0(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \mathbf{k}' \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

avec l'opérateur d'échange de spin P_σ . Cette interaction est composée d'un terme de contact, de termes dépendant des impulsions, d'un terme dépendant en densité et d'un terme d'interaction spin-orbite. L'opérateur $\mathbf{k}' = -\frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)$ agit sur la gauche et l'opérateur $\mathbf{k} = -\frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 + \vec{\nabla}_2)$ agit sur la droite.

3.1. La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité

À partir de cette interaction à deux corps, on obtient une expression de l'énergie fonctionnelle de la densité [65]¹,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\rho] = \int d\mathbf{r} & \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \tau + B_1 \rho^2 + B_2 (\rho_n^2 + \rho_p^2) + B_3 (\rho \tau - \mathbf{j}^2) + B_4 (\rho_n \tau_n - \mathbf{j}_n^2 + \rho_p \tau_p - \mathbf{j}_p^2) \right. \\ & + B_5 \rho \Delta \rho + B_6 (\rho_n \Delta \rho_n + \rho_p \Delta \rho_p) + B_7 \rho^{2+\alpha} + B_8 \rho^\alpha (\rho_n^2 + \rho_p^2) \\ & + B_9 (\rho \nabla \cdot \mathbf{J} + \mathbf{j} \cdot \nabla \times \mathbf{s}) + B_{9q} (\rho_n \nabla \cdot \mathbf{J}_n + \mathbf{j}_n \cdot \nabla \times \mathbf{s}_n + \rho_p \nabla \cdot \mathbf{J}_p + \mathbf{j}_p \cdot \nabla \times \mathbf{s}_p) \\ & \left. + B_{10} \mathbf{s}^2 + B_{11} (\mathbf{s}_n^2 + \mathbf{s}_p^2) + B_{12} \rho^\alpha \mathbf{s}^2 + B_{13} \rho^\alpha (\mathbf{s}_n^2 + \mathbf{s}_p^2) \right). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Avec les densités et les courants définis comme,

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\varphi(\mathbf{r}, \sigma)|^2, \quad (3.4)$$

$$\tau(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\nabla \varphi(\mathbf{r}, \sigma)|^2 \quad (3.5)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} \sum_{i,\sigma} [\varphi^*(\mathbf{r}, \sigma) \nabla \varphi(\mathbf{r}, \sigma) - \varphi(\mathbf{r}, \sigma) \nabla \varphi^*(\mathbf{r}, \sigma)], \quad (3.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = -i \sum_{i,\sigma\sigma'} [\nabla \varphi^*(\mathbf{r}, \sigma) \times \nabla \varphi(\mathbf{r}, \sigma')] \cdot \langle \sigma | \sigma' \rangle, \quad (3.7)$$

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma,\sigma'} \varphi^*(\mathbf{r}, \sigma, \sigma') \varphi(\mathbf{r}, \sigma') \langle \sigma | \sigma' \rangle. \quad (3.8)$$

Les coefficients B_x sont définis à partir des paramètres de Skyrme :

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{1}{2} t_0 \left(1 + \frac{1}{2} x_0 \right), & B_2 &= -\frac{1}{2} t_0 \left(x_0 + \frac{1}{2} \right), \\ B_3 &= \frac{1}{4} \left[t_1 \left(1 + \frac{1}{2} x_1 \right) + t_2 \left(1 + \frac{1}{2} x_2 \right) \right], & B_4 &= -\frac{1}{4} \left[t_1 \left(x_1 + \frac{1}{2} \right) - t_2 \left(x_2 + \frac{1}{2} \right) \right], \\ B_5 &= \frac{1}{16} \left[3t_1 \left(1 + \frac{1}{2} x_1 \right) - t_2 \left(1 + \frac{1}{2} x_2 \right) \right], & B_6 &= -\frac{1}{16} \left[3t_1 \left(x_1 + \frac{1}{2} \right) + t_2 \left(x_2 + \frac{1}{2} \right) \right], \\ B_7 &= \frac{1}{12} t_3 \left(1 + \frac{1}{2} x_3 \right), & B_8 &= -\frac{1}{12} t_3 \left(x_3 + \frac{1}{2} \right), \\ B_9 &= -\frac{1}{2} W_0, & B_{9q} &= -\frac{1}{2} W_{0q}, \\ B_{10} &= \frac{1}{4} t_0 x_0, & B_{11} &= -\frac{1}{4} t_0, \\ B_{12} &= \frac{1}{24} t_3 x_3, & B_{13} &= -\frac{1}{24} t_3. \end{aligned}$$

¹Il faut noter la différence de définition du signe de B_5 et B_6

Il faut noter que tous les termes B_{10} , B_{11} , B_{12} et B_{13} ne sont utilisés que pour les calculs dynamiques puisque la symétrie par renversement du temps doit être respectée pour les systèmes pairs. L'hamiltonien de champ moyen obtenu à partir du principe variationnel (voir par exemple [22]) s'écrit,

$$h^{HF} \varphi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{\sigma'} \left[-\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m_\tau^*(\mathbf{r})} \nabla \delta_{\sigma\sigma'} + U_\tau(\mathbf{r}) \delta_{\sigma\sigma'} + \mathbf{V}_\tau(\mathbf{r}) \cdot \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \right. \\ \left. + i\mathbf{C}_\tau(\mathbf{r}) \cdot \nabla \delta_{\sigma\sigma'} + i\mathbf{W}_\tau(\mathbf{r}) \cdot (\langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \times \nabla) \right] \varphi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma'), \quad (3.9)$$

avec

$$\frac{\hbar^2}{2m_\tau^*} = \frac{\hbar^2}{2m_\tau} + B_3\rho + B_4\rho_\tau, \quad (3.10)$$

$$U_\tau = 2B_1\rho + 2B_2\rho_\tau + B_3(\tau + i\nabla \cdot \mathbf{j}) + B_4(\tau_\tau + i\nabla \cdot \mathbf{j}_\tau) - 2B_5 \Delta \rho - 2B_6 \Delta \rho_\tau \\ + B_7(2 + \alpha)\rho^{1+\alpha} + B_8[\alpha\rho^{\alpha-1}(\rho_\tau^2 + \rho_p^2) + 2\rho^\alpha \rho_\tau^2] + B_9 \nabla \cdot \mathbf{J} + B_{9q} \nabla \cdot \mathbf{J}_\tau \\ + \alpha\rho^{\alpha-1}[B_{12}\mathbf{s}^2 + B_{13}(\mathbf{s}_\tau^2 + \mathbf{s}_p^2)], \quad (3.11)$$

$$\mathbf{V}_\tau = B_9 \nabla \times \mathbf{j} + B_{9q} \nabla \times \mathbf{j}_\tau + 2B_{10}\mathbf{s} + 2B_{11}\mathbf{s}_\tau + 2\rho^\alpha(B_{12}\mathbf{s} + B_{13}\mathbf{s}_\tau), \quad (3.12)$$

$$\mathbf{C}_\tau = 2B_3\mathbf{j} + 2B_4\mathbf{j}_\tau - B_9 \nabla \times \mathbf{s} - B_{9q} \nabla \times \mathbf{s}_\tau, \quad (3.13)$$

$$\mathbf{W}_\tau = -B_9 \nabla \rho - B_{9q} \nabla \rho_\tau. \quad (3.14)$$

On remarque ainsi l'apparition d'une masse effective m_τ^* due aux termes t_1 et t_2 . Il faut aussi tenir compte de l'interaction coulombienne pour les protons,

$$V_C(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' - e^2 \left(\frac{3\rho_p(\mathbf{r})}{\pi} \right)^{1/3}, \quad (3.15)$$

qui se décompose en un terme direct et en un terme d'échange traité de manière approchée dans l'approximation de Slater. Enfin une correction du centre de masse est prise en compte le plus souvent de façon simple, en remplaçant le facteur $\frac{\hbar^2}{2m}$ par $\frac{\hbar^2}{2m}(1 - \frac{1}{A})$ dans le calcul de l'énergie cinétique.

Dans cette thèse, nous utiliserons trois jeux de paramètres différents (voir tableau 3.1). L'interaction SLy4d a été obtenue sans tenir compte de la correction du centre de masse. En effet, pour les études de réactions, lorsque deux noyaux sont présents, il n'est pas possible d'utiliser la correction simple. Il est donc préférable d'utiliser une fonctionnelle obtenue sans la correction du centre de masse.

3.1.2 Inclusion de l'appariement

Dans les théories HF+BCS ou HFB, l'interaction $\bar{v}_{ijkl}^{\kappa\kappa}$ devrait être identique à celle utilisée pour le champ moyen, néanmoins pour la théorie EDF, une interaction différente dans chacun

3.1. La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité

	SkM* [66]	SLy4 [67]	SLy4d [68]
t_0 (MeV·fm ³)	-2645,0	-2488,913	-2479,662
t_1 (MeV·fm ⁵)	410,0	486,818	473,216
t_2 (MeV·fm ⁵)	-135,0	-546,395	-333,654
t_3 (MeV·fm ^{3(1+α)})	15595,0	13777,0	13487
x_0	0,09	0,8340	0,8122
x_1	0,0	-0,3438	-0,7228
x_2	0,0	-1,0	-1,0
x_3	0,0	1,3540	1,3980
α	1/6	1/6	1/6
W_0 (MeV·fm ⁵)	130	123	128

TAB. 3.1 – Paramètres des différentes fonctionnelles de Skyrme utilisées dans ce mémoire.

des canaux est quasiment toujours utilisée. Une forme standard d'interaction d'appariement est donnée par

$$V_\tau(\mathbf{r}, \sigma; \mathbf{r}', \sigma') = V_0^{\tau\tau} \left(1 - \eta \frac{\rho(\frac{[\mathbf{r}+\mathbf{r}']}{2})}{\rho_0} \right) \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} [1 - P_{\sigma\sigma'}], \quad (3.16)$$

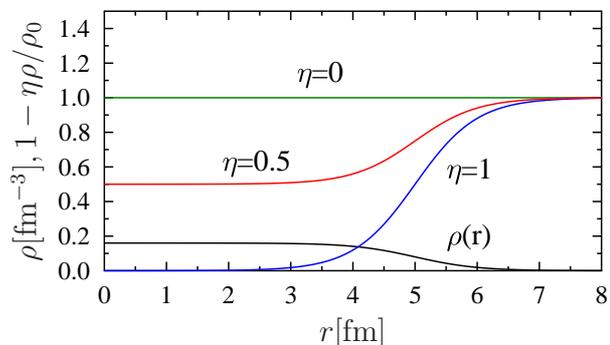
avec $\rho_0 = 0,16 \text{ fm}^{-3}$. Cette interaction a été ajustée aux gaps à trois points expérimentaux (voir section 3.2.3) avec l'approximation BCS, trois jeux de paramètres sont utilisés dans ce travail [69] et sont présentés dans le tableau 3.2. Il faut noter que d'autres méthodes peuvent être utilisées pour ajuster l'interaction, notamment l'énergie de séparation S_{2n} [70]. Il est à noter que seule l'interaction entre particules de même isospin est prise en compte, par conséquent l'interaction d'appariement neutron-proton est négligée.

interaction	η	V_0^{nn} [MeV·fm ³]	V_0^{pp} [MeV·fm ³]
volume	0	-465	-490
mixte	0,5	-700	-755
surface	1	-1300	-1462

TAB. 3.2 – Paramètres des interactions d'appariement neutron-neutron et proton-proton utilisées dans cette thèse [69].

Ces trois jeux de paramètres correspondent à des dépendances en densité différentes. Comme on peut le voir sur la figure 3.1, l'interaction dit de volume suppose qu'il n'y a pas de dépendance en densité et l'interaction de surface va agir en périphérie du noyau là où la densité est plus faible

FIG. 3.1 – Profil radial des trois interactions d'appariement en supposant une forme de Thomas-Fermi.



que la densité de saturation. Une interaction intermédiaire entre les deux est aussi considérée (interaction mixte).

Il faut noter qu'une fonction de coupure a été ajoutée à l'interaction afin d'éviter les problèmes de formation d'un gaz de particules [71] et d'une divergence ultraviolette². Cette fonction de coupure possède la forme suivante,

$$f_\alpha = \frac{1}{1 + e^{\frac{\epsilon_\alpha - \lambda - 5}{0.5}}} \frac{1}{1 + e^{\frac{-\epsilon_\alpha + \lambda - 5}{0.5}}} \theta(-\epsilon_\alpha), \quad (3.17)$$

λ étant l'énergie de Fermi. La fonction de Heaviside $\theta(x)$ ($\theta(x) = 0$ si $x < 0$ et $\theta(x) = 1$ si $x > 0$) est introduite en particulier pour éviter le couplage aux états du continuum et la formation d'un gaz. Cette fonction de coupure est prise en compte dans le calcul du gap de la façon suivante,

$$\Delta_\alpha(t) = - \sum_{\beta > 0} \bar{v}_{\alpha\bar{\alpha}\beta\bar{\beta}} \kappa_\beta(t) f_\beta f_\alpha. \quad (3.18)$$

3.1.3 Le code EV8

Le code EV8[12] a été conçu de façon à résoudre les équations HF+BCS avec une interaction de Skyrme sur un réseau cartésien discrétisé. De façon à réduire le temps de calcul, certaines symétries sont supposées. Notamment trois plans de symétrie tels que :

$$\rho(x, y, z) = \rho(-x, y, z), \quad \rho(x, y, z) = \rho(x, -y, z) \quad \text{et} \quad \rho(x, y, z) = \rho(x, y, -z). \quad (3.19)$$

Ainsi seulement 1/8 de l'espace est considéré. Le calcul est donc effectué sur un réseau de taille finie de volume $L_x \times L_y \times L_z$. En contrepartie certaines déformations ne peuvent être considérées, par exemple, le noyau obtenu ne peut être déformé octupolairement. Seules les brisures de la symétrie sphérique avec des multipolarités paires peuvent être considérées (déformation quadrupolaire, hexadécupolaire, etc...). Dans ce code, aucune symétrie en spin n'est supposée, chaque

²NB : avec HFB le problème du gaz disparaît mais pas la divergence ultraviolette

fonction d'onde individuelle s'écrit donc,

$$|\alpha\rangle = \int \varphi_{\alpha\uparrow}(\mathbf{r})|\mathbf{r}, \uparrow\rangle + \varphi_{\alpha\downarrow}(\mathbf{r})|\mathbf{r}, \downarrow\rangle d\mathbf{r}. \quad (3.20)$$

À noter que les fonctions d'onde dans l'espace totale $\varphi_{\alpha\sigma}(\mathbf{r})$ sont déduites à l'aide des symétries avec les conventions suivantes,

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha\uparrow}(-x, y, z) &= +\varphi_{\alpha\uparrow}^*(x, y, z), & \varphi_{\alpha\uparrow}(x, -y, z) &= +\varphi_{\alpha\uparrow}^*(x, y, z), & \varphi_{\alpha\uparrow}(x, y, -z) &= +\pi_z \varphi_{\alpha\uparrow}(x, y, z), \\ \varphi_{\alpha\downarrow}(-x, y, z) &= -\varphi_{\alpha\downarrow}^*(x, y, z), & \varphi_{\alpha\downarrow}(x, -y, z) &= +\varphi_{\alpha\downarrow}^*(x, y, z), & \varphi_{\alpha\downarrow}(x, y, -z) &= -\pi_z \varphi_{\alpha\downarrow}(x, y, z), \end{aligned} \quad (3.21)$$

avec $\pi_z=1$ ou -1 la parité sur l'axe \vec{z} . Pour diviser par deux le nombre d'orbitales utilisées, on utilise la symétrie par renversement du temps. L'orbitale symétrique par renversement du temps de $|\alpha\rangle$ s'écrit,

$$|\bar{\alpha}\rangle = \int \varphi_{\alpha\downarrow}^*(\mathbf{r})|\mathbf{r}, \uparrow\rangle - \varphi_{\alpha\uparrow}^*(\mathbf{r})|\mathbf{r}, \downarrow\rangle d\mathbf{r}, \quad (3.22)$$

avec une parité π_z opposée.

Plusieurs modifications ont été apportées au code statique de façon à améliorer la convergence. Dans la mesure où le code EV8 original est décrit en détail dans la référence [12], seules les améliorations sont données ci-dessous :

Hermiticité de l'hamiltonien

Tous les termes de l'Hamiltonien obtenus avec la fonctionnelle de Skyrme sont hermitiens. Cependant, la discrétisation des dérivés peut briser cette hermité, c'est notamment le cas pour le terme de spin orbite $i\mathbf{W}_\tau(\mathbf{r}) \cdot (\langle\sigma|\boldsymbol{\sigma}|\sigma'\rangle) \times \nabla$. Par exemple, un terme en $i\vec{V}(\mathbf{r}) \cdot \vec{\nabla}$ lorsqu'il est discrétisé n'est plus hermitien. Pour mieux comprendre cet effet, prenons un cas en une dimension avec un réseau de trois positions. Dans ce cas, $V(x)$ et $\frac{\partial}{\partial x}$ (discrétisé à l'ordre 1) s'écrivent,

$$V = \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 \\ 0 & V_2 & 0 \\ 0 & 0 & V_3 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Le terme ainsi obtenu après discrétisation n'est plus hermitien,

$$iV(x)\frac{\partial}{\partial x} = i\frac{1}{2\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & V_1 & 0 \\ -V_2 & 0 & V_2 \\ 0 & -V_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Cette non-hermité empêche les fonctions d'ondes d'être vecteur propre de l'hamiltonien. Lors de l'évolution en temps réel, cette non-hermité devient critique car elle induit une évolution non unitaire. Dans ce cas, le nombre de particules moyen n'est pas conservé. Concrètement, l'ordre de grandeur de la non-hermité est de 10^{-5} , mais cette erreur s'accumule au cours du temps.

Pour résoudre ce problème, une solution simple a été proposée, il s'agit d'appliquer la moyenne entre le terme $iV \frac{\partial}{\partial x}$ et son complexe conjugué $i \frac{\partial}{\partial x} V$,

$$\frac{1}{2} \left(iV(x) \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial x} V(x) \right) = i \frac{1}{4\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & V_1 + V_2 & 0 \\ -V_2 - V_1 & 0 & V_2 + V_3 \\ 0 & -V_3 - V_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Dans ce cas, l'hamiltonien est hermitien à 10^{-15} près c'est-à-dire aux erreurs d'arrondi près. Ainsi, la convergence est de bien meilleure qualité et le nombre de particules est beaucoup mieux conservé au cours du temps.

3.1.4 Amélioration de la stabilité numérique de EV8

Afin d'effectuer une évolution dynamique après EV8, il s'est avéré nécessaire d'améliorer la convergence de EV8. En effet, la convergence standard du code EV8 publié [12] conduit parfois à des oscillations légères dans l'évolution dynamique. Deux améliorations ont été effectuées, (i) la convergence en temps imaginaire (ii) une diagonalisation intermédiaire de l'hamiltonien.

Pour la convergence en temps imaginaire, lors de l'application du champ moyen,

$$|\varphi'_\alpha\rangle = e^{-\frac{\Delta t}{\hbar} \hat{h}} |\varphi_\alpha\rangle, \quad (3.26)$$

la fonction exponentielle est calculée au premier ordre avec le code original. De façon à accélérer encore la convergence et à être cohérent avec la partie dynamique où l'évolution est effectuée avec l'algorithme Runge-Kutta à l'ordre 4, le calcul de l'exponentiel a été effectué jusqu'à l'ordre 4.

En plus des itérations en temps imaginaire, une diagonalisation directe de l'hamiltonien de champ moyen dans l'espace des N' états de plus basse énergie a été effectuée. N' étant de l'ordre du double du nombre de particules. Cette diagonalisation directe permet d'obtenir directement les vecteurs propres de l'hamiltonien mais ne permet pas de résoudre les équations auto-cohérentes. Elle est néanmoins utile pour accélérer la convergence, puisque la méthode de temps imaginaire possède parfois certaines difficultés pour les états dégénérés.

Toutes ces améliorations ont permis d'augmenter grandement la stabilité de la solution statique. Cette stabilité est indispensable pour l'étude des résonances géantes (voir chapitre 4). En effet, lorsque le noyau n'est pas exactement dans son état fondamental, il peut osciller légèrement dans l'évolution dynamique et donc perturber la fonction de réponse.

3.2 Propriétés statiques du noyau avec les fonctionnelles de Skyrme

L'étude systématique des résonances géantes présentée dans le chapitre suivant nous a amenés à considérer de manière systématique l'évolution de la forme des noyaux le long de la carte des noyaux. Cette étude a permis en particulier de révéler des effets intéressants sur l'influence de la déformation sur la diffusivité dans les noyaux. Cette section présente un résumé des propriétés globales des noyaux lorsque ceux-ci se déforment.

L'étude systématique a été effectuée pour tous les noyaux pair-pair possédant une masse A entre 16 et 276 pour lesquels la masse a été mesurée expérimentalement. On obtient ainsi un jeu de 749 noyaux. Le pas de réseau de 0,8 fm, et un espace total de $2L_x = 2L_y = 2L_z = 28,8$ fm ont été utilisés. La possible déformation quadrupolaire a été caractérisée en fonction des paramètres de déformation β et γ définis comme,

$$\beta = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{4\pi}{3R^2A} \sqrt{\langle Q_{20} \rangle^2 + 3\langle Q_{22} \rangle^2}, \quad \cos(\gamma) = \frac{3\langle Q_{20} \rangle}{4A\langle r^2 \rangle}, \quad \text{et} \quad \sin(\gamma) = \frac{3\sqrt{3}\langle Q_{22} \rangle}{4A\langle r^2 \rangle}, \quad (3.27)$$

avec $R = 1.2A^{1/3}$, les moments quadrupolaires,

$$\langle Q_{20} \rangle = \langle \Psi | \sum_{i=1}^A (2z_i^2 - y_i^2 - x_i^2) | \Psi \rangle \quad \text{et} \quad \langle Q_{22} \rangle = \langle \Psi | \sum_{i=1}^A (\hat{x}_i^2 - \hat{y}_i^2) | \Psi \rangle, \quad (3.28)$$

et le rayon carré moyen,

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{A} \langle \Psi | \sum_{i=1}^A \hat{r}_i^2 | \Psi \rangle. \quad (3.29)$$

Le paramètre β permet ici une estimation de la déformation, en effet cette formule mélange les effets dus à la diffusivité et aux déformations d'ordres supérieurs. Par conséquent, dans la suite, il sera défini d'autres paramètres de déformation moins ambigus.

Afin de classifier les formes des noyaux, quatre possibilités ont été retenues : (i) les noyaux sphériques, c'est-à-dire possédant un paramètre $|\beta|$ inférieur à 0,02, (ii) les noyaux prolates : $\beta > 0,02$ et $|\gamma| < 1^\circ$, (iii) les noyaux oblates : $\beta < -0,02$ et $|\gamma| < 1^\circ$ et (iv) les noyaux triaxiaux (les autres).

Pour éviter les convergences dans un minimum local, pour chaque noyau quatre calculs ont été effectués avec conditions initiales différentes avant les itérations en temps imaginaire. Ces conditions initiales correspondent à un noyau sphérique, prolate, oblate et triaxiale. L'état fondamental étant choisi comme le minimum absolu obtenu pour ces différentes conditions initiales. Les formes ainsi obtenues sont présentées sur la carte des noyaux (figure 3.2) pour les interactions SLy4 et SkM*. L'interaction d'appariement utilisée dans les deux calculs est de type surfacique avec les paramètres du tableau 3.2.

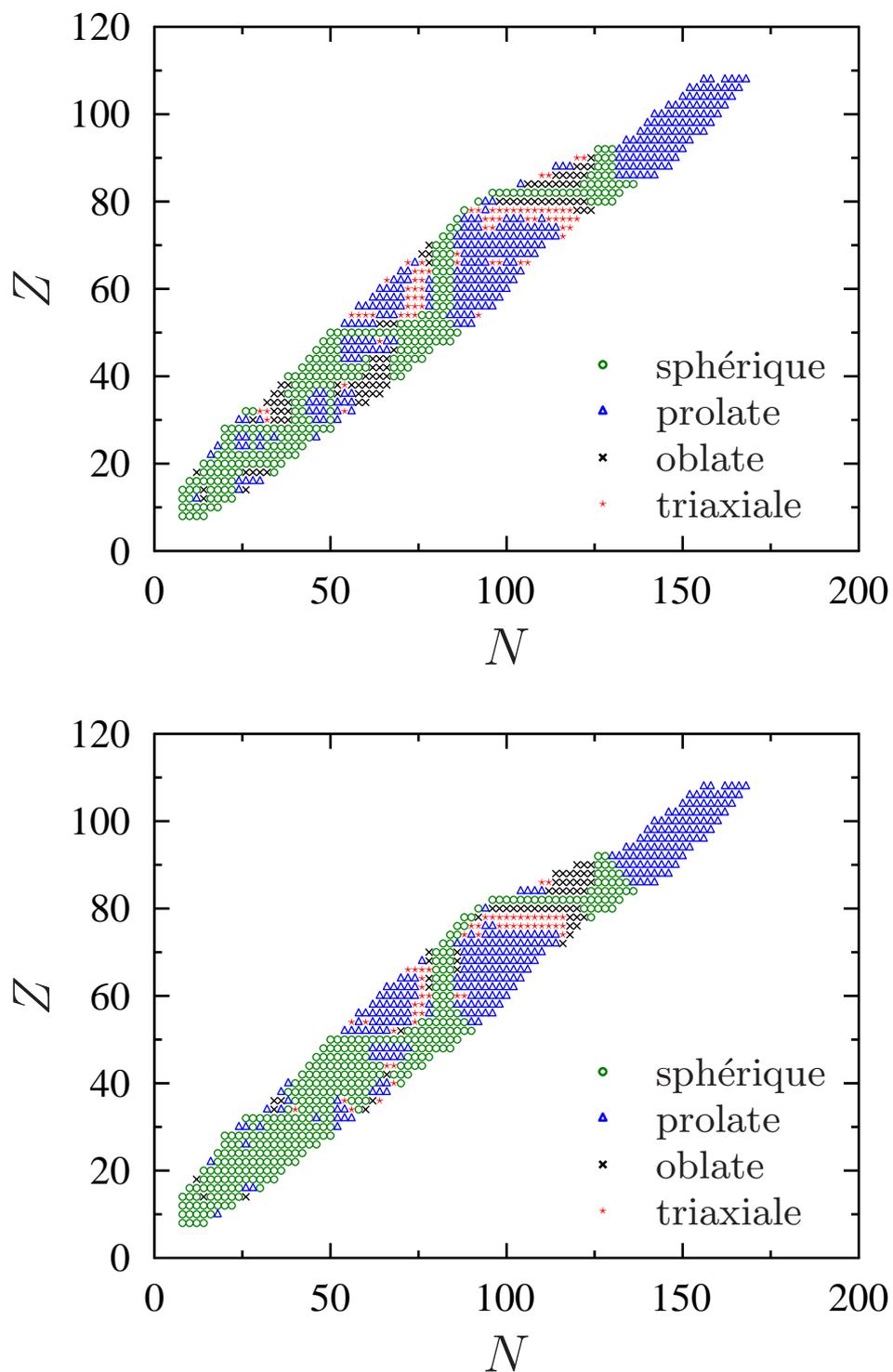


FIG. 3.2 – Carte des noyaux retenus dans cette thèse et leur déformation pour la fonctionnelle SLy4 (figure du haut) et SkM* (figure du bas).

On voit sur la figure 3.2 que les deux forces de Skyrme sont en accord global. Toutefois, une analyse montre des différences localement. En effet, sur le tableau 3.3, des nombres différents de noyaux sphériques et déformés sont obtenus pour les deux fonctionnelles. Ainsi, une connaissance parfaite des déformations le long de la carte des noyaux devrait permettre d'étudier le pouvoir prédictif des théories EDF et de sélectionner les paramétrisations les plus valides [72].

	SkM*	SLy4
Sphérique	346	281
Prolate	290	310
Oblate	59	88
Triaxiale	54	70

TAB. 3.3 – Nombres de noyaux obtenus pour chaque déformation pour les deux fonctionnelles.

3.2.1 Détermination de la forme des noyaux

Afin d'analyser systématiquement la forme des noyaux, une forme de Thomas-Fermi,

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left[\frac{|\mathbf{r}| - R(\theta, \varphi)}{a(\theta, \varphi)}\right]}, \quad (3.30)$$

a été ajustée sur la densité de tous les noyaux obtenus avec le code EV8. La fonction $R(\theta, \varphi)$ décrit la forme de la surface. Cette fonction peut être développée en fonction des harmoniques sphériques [73],

$$R(\theta, \varphi) = R_0 \left\{ 1 + \sum_{\lambda\nu} a_{\lambda\nu} Y_{\lambda\nu}(\theta, \varphi) \right\}. \quad (3.31)$$

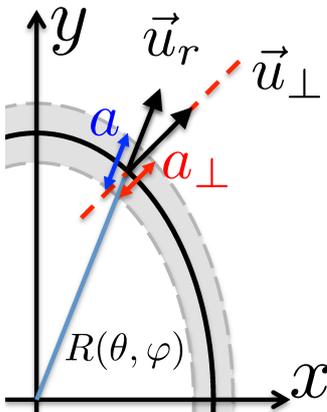


FIG. 3.3 – Illustration de la différence entre la diffusivité le long de l'axe radial (a) et le long de l'axe perpendiculaire à la surface (a_{\perp}).

Cette somme se limitera ici aux premiers ordres en déformation ($\lambda \leq 6$), et en supposant que l'axe \vec{z} est un axe de symétrie,

$$R(\theta, \varphi) = R_0 \{1 + \beta_2 Y_{20}(\theta, \varphi) + \beta_4 Y_{40}(\theta, \varphi) + \beta_6 Y_{60}(\theta, \varphi)\}. \quad (3.32)$$

La diffusivité $a(\theta, \varphi)$ est plus complexe à paramétriser, notamment en raison d'un mélange d'effets géométrique et physique (voir schéma 3.3). En effet, la diffusivité est un paramètre qui représente l'épaisseur de la surface, par conséquent il doit être défini perpendiculairement à la surface. On définit donc une diffusivité $a_\perp(\theta, \varphi)$ définie sur l'axe perpendiculaire à la surface $R(\theta, \varphi)$. Cette diffusivité peut être reliée à la diffusivité définie radialement,

$$a(\theta, \varphi) = a_\perp(\theta, \varphi) \sqrt{1 + \left| \vec{\nabla} R(\theta, \varphi) \Big|_{r=R(\theta, \varphi)} \right|^2}. \quad (3.33)$$

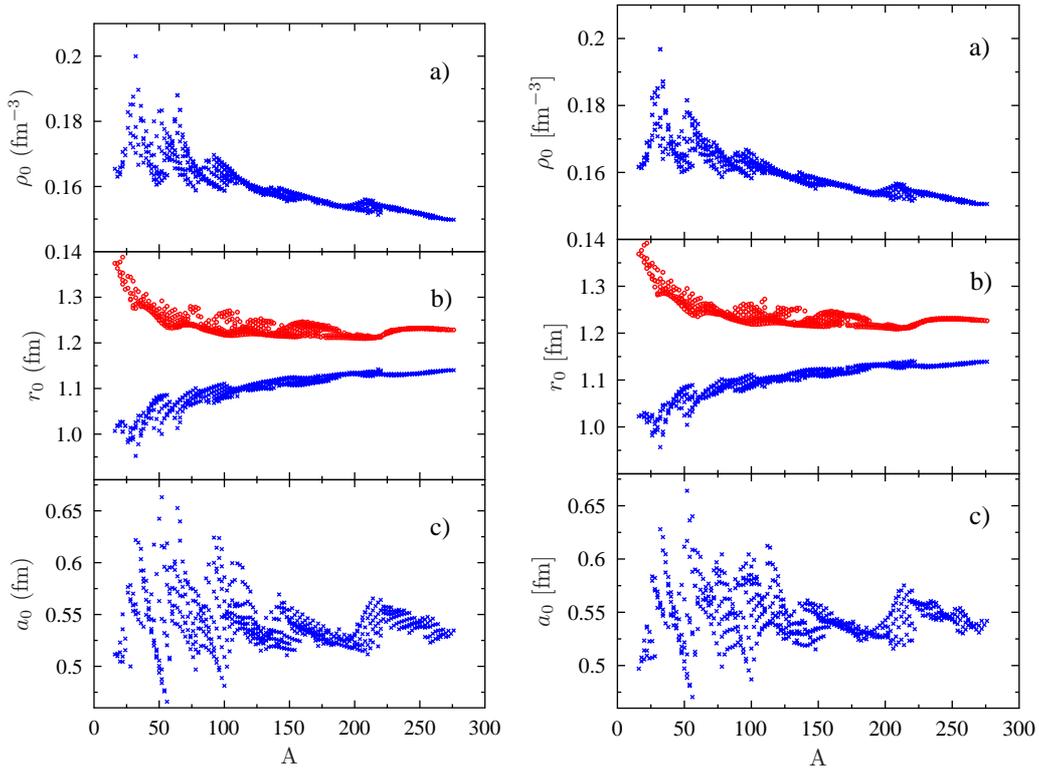


FIG. 3.4 – Densité centrale (a), rayon réduit $r_0 = R_0/A^{1/3}$ (b) et diffusivité a_0 (c) en fonction de la masse pour l'ensemble des noyaux considérés dans cette étude. Sur la figure (b), le rayon calculé comme $r_0 = \sqrt{5/3 \langle r^2 \rangle} / A^{1/3}$ est aussi tracé avec des cercles rouges.

De la même manière que pour le rayon, on paramétrise la diffusivité comme,

$$a_\perp(\theta, \varphi) = a_0 \left(1 + \tilde{\beta}_2 Y_{20}(\theta) + \tilde{\beta}_4 Y_{40}(\theta) \right). \quad (3.34)$$

Il faut noter qu'une paramétrisation similaire a déjà été proposée [74].

La fonction (3.30) a été ajustée à la densité $\rho(\mathbf{r})$ des noyaux déformés axialement en modifiant les paramètres ρ_0 , R_0 , a_0 , β_2 , β_4 , β_6 , $\tilde{\beta}_2$, and $\tilde{\beta}_4$. Les résultats pour la densité centrale ρ_0 , le rayon R_0 , et la diffusivité a_0 sont présentés sur la figure 3.4. Sur cette figure, on remarque que les résultats sont très semblables entre les deux fonctionnelles. La valeur de la densité centrale diminue de façon assez importante avec la masse. On peut comprendre assez facilement ce phénomène. Lorsque la masse augmente, en suivant la vallée de stabilité, le ratio N/Z augmente, ce qui diminue la densité de saturation. On remarque aussi des effets de couche importants pour les noyaux de masse inférieure à 100. Il faut noter que la paramétrisation (3.30) suppose une densité constante à l'intérieur du noyau, ce qui n'est pas toujours le cas surtout pour les faibles masses. Notamment, le remplissage des couches $s_{1/2}$ augmente la densité au centre du noyau.

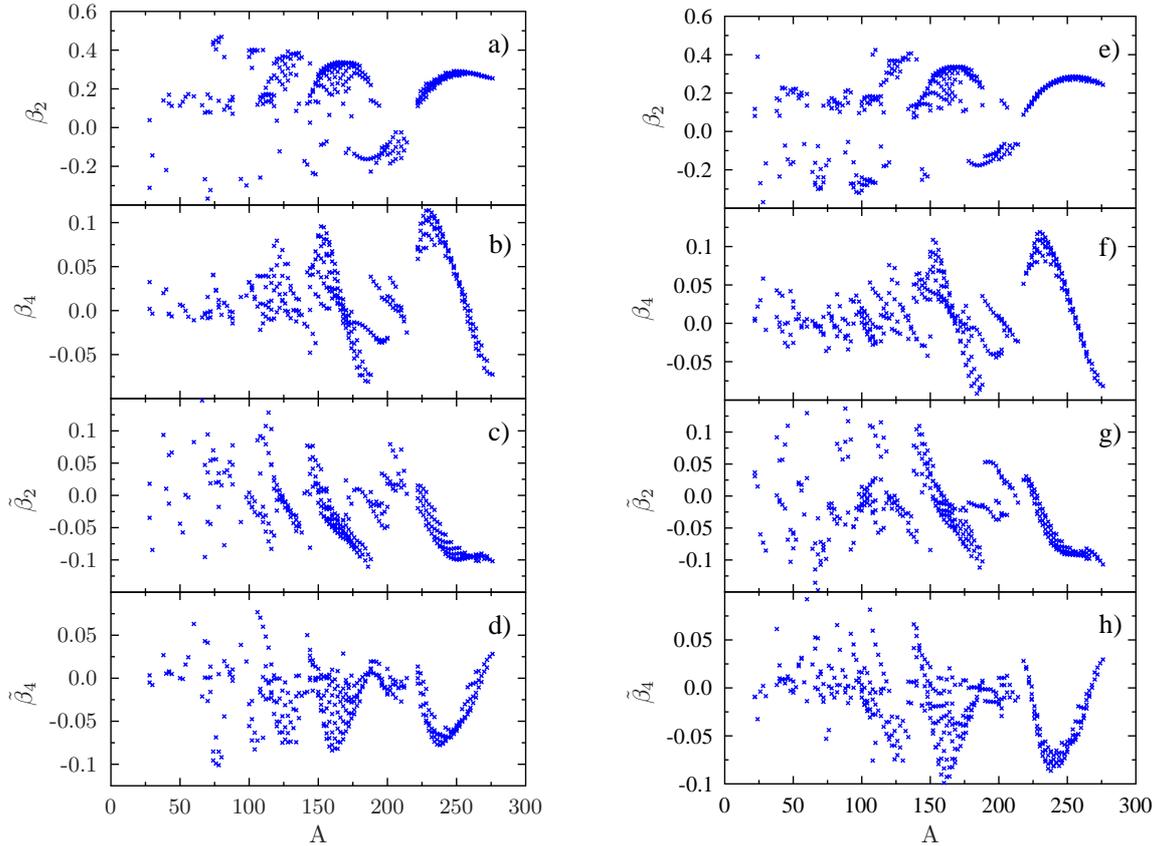


FIG. 3.5 – Paramètres de déformation en fonction de la masse obtenus avec les interactions SkM* (figure de gauche) et SLy4 (figure de droite). Seuls les noyaux déformés de façon prolate ou oblate sont présentés ici.

Il existe une assez grande différence entre les deux méthodes pour calculer les rayons sur la figure 3.4(b). La première méthode (points rouges) suppose que le noyau est une sphère

uniforme. Dans ce cas, le rayon carré moyen peut être relié au rayon effectif R_0 de la sphère,

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{5} R_0^2. \quad (3.35)$$

La deuxième méthode, avec la procédure d'ajustement, est plus directe (points bleus). L'écart entre les deux correspond à la contribution de la diffusivité dans la valeur moyenne du rayon carré moyen. La diffusivité est l'observable qui varie le plus avec les effets de couche, en effet, elle est directement reliée à la barrière centrifuge qui dépend du moment angulaire des orbitales des états proches de l'énergie de fermi.

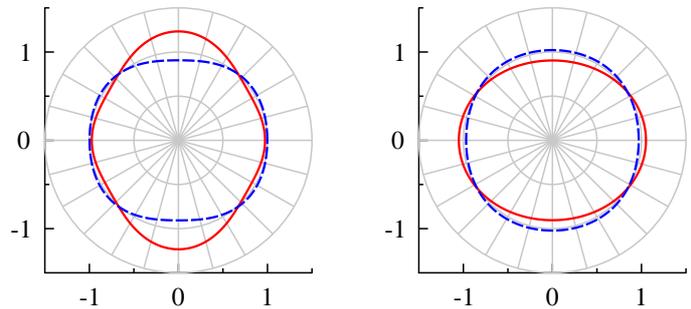
Les différents paramètres de déformation sont présentés sur la figure 3.5, on remarque encore une fois que les deux fonctionnelles donnent des résultats assez similaires. Sur cette figure, les déformations au delà de la déformation quadrupolaire sont mises en évidence. La déformation hétérohexadécupolaire est notamment de l'ordre de grandeur de la déformation quadrupolaire. Comme nous le verrons au chapitre suivant, cela aura un rôle non négligeable sur les résonances géantes dans les noyaux déformés.

3.2.2 Déformation et polarisation de la surface des noyaux

Un phénomène intéressant a été étudié ici, il s'agit de la polarisation de la surface. En effet, des valeurs non nulles de $\tilde{\beta}_2$ et $\tilde{\beta}_4$ montrent que le caractère diffus de la surface n'est pas le même selon la position sur la surface du noyau et l'orientation de la déformation. Cet effet est illustré sur la figure 3.6 pour deux noyaux l'un déformé de façon prolate et l'autre de façon oblate.

$$\begin{array}{ll} {}^{228}\text{U}, \beta_2=0.208, \beta_4=0.121 & {}^{210}\text{Th}, \beta_2=-0.157, \beta_4=0.004 \\ \tilde{\beta}_2 = -0.06, \tilde{\beta}_4 = -0.066 & \tilde{\beta}_2 = 0.071, \tilde{\beta}_4 = -0.027 \end{array}$$

FIG. 3.6 – Déformation de la surface $R(\theta)/R_0$ (courbes rouges) et polarisation de la diffusivité $a(\theta)/a_0$ (tirets bleus). L'axe de symétrie \vec{z} correspond à l'axe vertical.



Pour mieux décrire ce phénomène, la différence relative entre la diffusivité selon l'axe long et l'axe court est tracée en fonction de l'écart relatif entre ces deux axes sur la figure 3.7 pour les noyaux de masse $A > 120$. En effet, pour les noyaux de masse inférieures les résultats sont dominés par des effets de structure. Sur cette figure, on remarque une anticorrélation entre

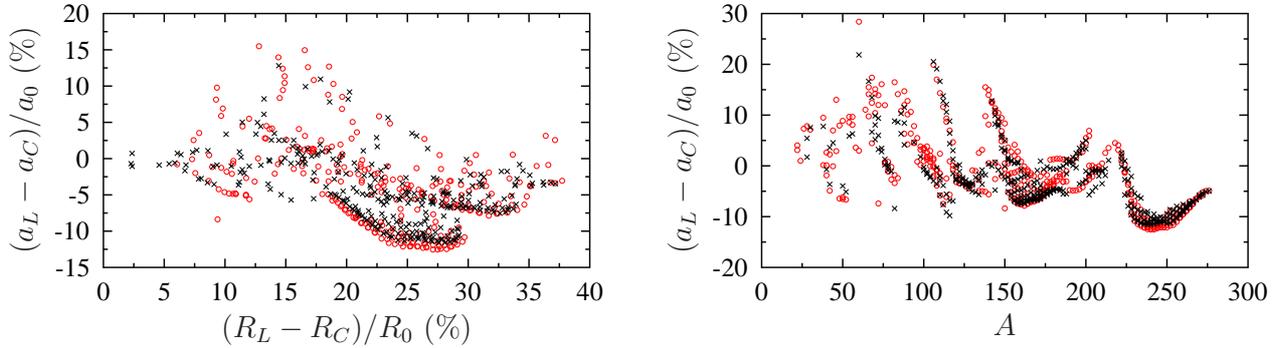


FIG. 3.7 – Figure de gauche : $(a_L - a_C)/a_0$ en fonction de $(R_L - R_C)/R_0$ pour les masses $A > 120$. Figure de droite : $(a_L - a_C)/a_0$ en fonction de la masse A . Les croix noires et les cercles rouges correspondent respectivement aux résultats obtenus avec les fonctionnelles SkM* et SLy4.

la déformation de la surface $(R_L - R_C)/R_0$ et la polarisation de la diffusivité de la surface $(a_L - a_C)/a_0$. La diffusivité est donc systématiquement plus faible sur l'axe de déformation pour les noyaux prolates et plus importante pour les noyaux oblates.

Cette étude a montré l'intérêt de la théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité, en minimisant l'énergie par rapport à la densité avec le principe variationnel, il est possible de caractériser les différentes formes des noyaux. Ici, un nouveau phénomène a été mis en évidence : la polarisation de la diffusivité de la surface. Il a été montré que cet effet n'est pas négligeable et peut avoir des répercussions à basse énergie sur les résonances géantes dipolaires [75] ou sur les hauteurs de barrière de fusion [76].

Pour illustrer cet effet, nous avons étudié le cas de la réaction $^{40}\text{Ca} + ^{238}\text{U}$. La dépendance de la diffusivité le long de la surface est tracée sur la figure 3.8 pour le noyau d'uranium 238. Pour voir l'effet du changement de diffusivité sur la barrière, un modèle simple est utilisé basé sur le "double folding" des densités [76]. Ce modèle suppose que les deux noyaux ont une forme de Thomas-Fermi déformée quadrupolairement et hexaséculairement. On remarque tout d'abord un effet de la déformation de la surface qui modifie la barrière selon l'orientation relative de l'uranium avec l'axe de réaction. Pour voir l'effet de la polarisation de la diffusivité, trois paramètres différents ont été utilisés correspondant aux valeurs maximale, minimale et moyenne de la diffusivité radiale de la figure de gauche. De cette figure, on remarque que le changement de la diffusivité peut induire une modification de la barrière de fusion de quelques MeV et donc changer la section efficace de fusion. Cette étude montre donc qu'il est important de tenir compte de la polarisation éventuelle de la diffusivité dans les modèles de fusion.

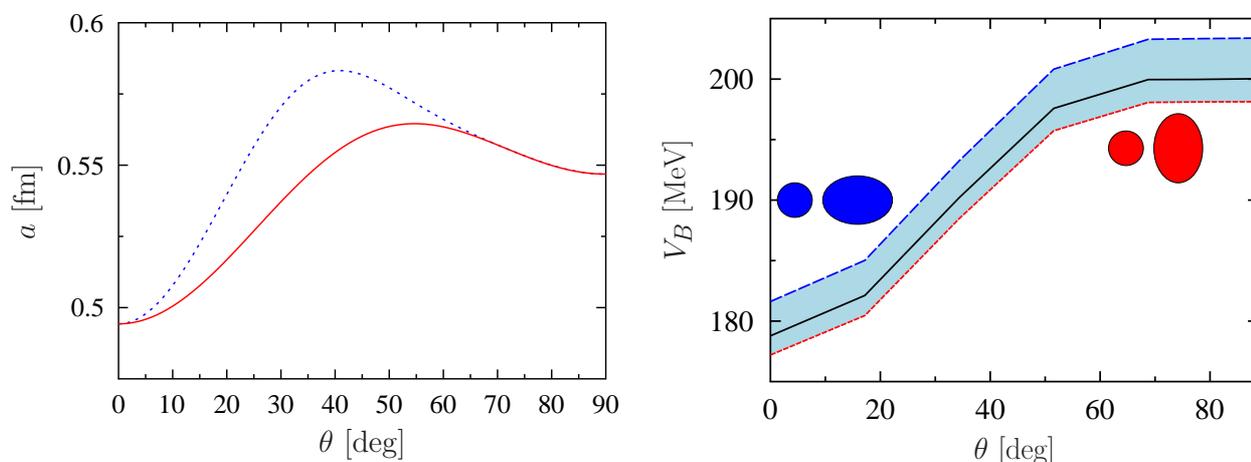


FIG. 3.8 – Figure de gauche : Diffusivité radiale (pointillés bleus) et perpendiculaire (ligne continue rouge) en fonction de l’angle θ . Figure de droite : hauteur de la barrière coulombienne en fonction de l’angle d’orientation de l’uranium avec le faisceau à paramètre d’impact nul. Le calcul est effectué pour trois paramètres de diffusivité différents $a=0,494$ (tirets bleus), $0,550$ (ligne continue noire) et $0,583$ fm (pointillés rouges) et pour des paramètres de déformation $\beta_2=0,244$ et $\beta_4=0,094$. Les trois paramètres correspondant aux valeurs minimale, moyenne et maximale de a_\perp sur la figure de gauche.

3.2.3 Effets de l’appariement sur les propriétés statiques du noyau

On s’intéresse ici à l’influence statique de l’appariement. Même si ces propriétés ont déjà fait l’objet de nombreuses études, on les rappelle ici. Nous verrons dans les chapitres suivants que plusieurs effets dynamiques de l’appariement sont en réalité causés par l’influence de l’appariement sur les propriétés statiques.

Effets pair-impair

Une preuve expérimentale de l’appariement dans les noyaux est la différence d’énergie entre les noyaux pair-pair et les noyaux pair-impair. Cette différence d’énergie appelée gap correspond à la perte de l’énergie de corrélation due à la brisure d’une paire. Un gap moyen peut être défini de manière générale comme,

$$\bar{\Delta} = \frac{2E_{cor}}{\sum_{\alpha} \sqrt{n_{\alpha}(1 - n_{\alpha})}}, \quad (3.36)$$

avec E_{cor} l’énergie de corrélation.

Il est possible de définir un gap expérimentalement, pour cela on utilise le fait que la différence d’énergie sur une chaîne isotopique entre un noyau possédant N neutrons et $N - 1$

neutrons, avec N paire, peut s'exprimer comme,

$$E(N) - E(N - 1) = E_{HF}(N) - E_{HF}(N - 1) + \bar{\Delta}, \quad (3.37)$$

où l'on sépare l'énergie totale en une énergie de champ moyen $E_{HF}(N)$ et une énergie de corrélation. En supposant que l'énergie de champ moyen varie linéairement avec N , on obtient [77],

$$\bar{\Delta}(N) = \frac{1}{2}(E(N + 1) - 2E(N) + E(N - 1)) \equiv \Delta^{(3)}(N). \quad (3.38)$$

Néanmoins, il est parfois nécessaire de tenir compte de la non linéarité de $E_{HF}(N)$, en le développant au second ordre, on en déduit une formule plus précise du gap [77],

$$\bar{\Delta}(N) \approx \Delta^{(5)} = -\frac{1}{8}(6E(N) - 4E(N + 1) - 4E(N - 1) + E(N + 2) + E(N - 2)). \quad (3.39)$$

À partir des masses déterminées expérimentalement, et de la formule (3.39), il est possible d'obtenir une valeur expérimentale du gap pour toute la carte des noyaux. Ce gap expérimental est présenté sur la figure 3.9 en fonction de la masse.

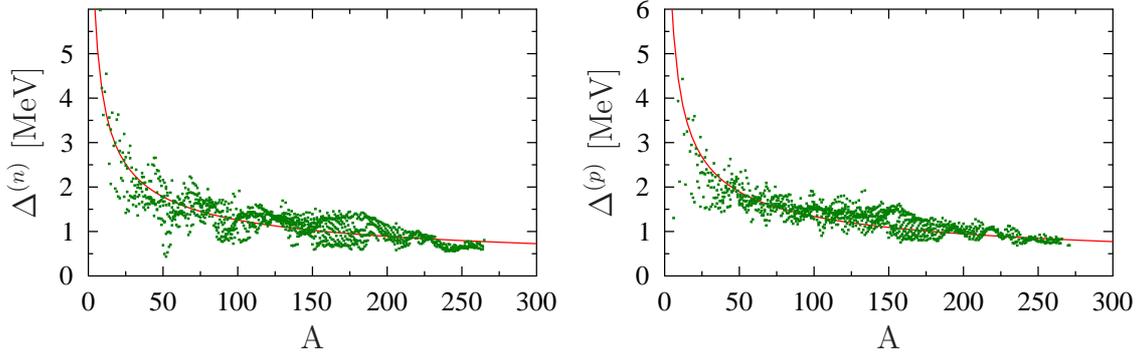


FIG. 3.9 – Gaps expérimentaux calculés avec la formule à 5 points en fonction de la masse. La ligne rouge représente la dépendance moyenne en énergie ajustée sur les points expérimentaux (équation (3.40)).

Pour caractériser la dépendance moyenne, on ajuste la fonction,

$$\Delta = a_0 A^{-1/2}, \quad (3.40)$$

aux données expérimentales. Les paramètres ainsi obtenus sont $a_0 = 12,58$ MeV pour le gap neutron et $a_0 = 13,38$ MeV pour le gap proton. On remarque néanmoins une déviation assez importante autour de la courbe moyenne. Sur la figure 3.10 la valeur de $\Delta A^{1/2}$ est tracée sur toute la carte. On voit ainsi une dépendance en asymétrie du gap. Cette dépendance pouvant être comprise en ajoutant une dépendance isovecteur à la force d'appariement [78]. Il faut noter que ce sont ces observables, et notamment les gaps à 3 points obtenus sur l'ensemble de la charte des noyaux qui servent à ajuster la force d'appariement dans la référence [69].

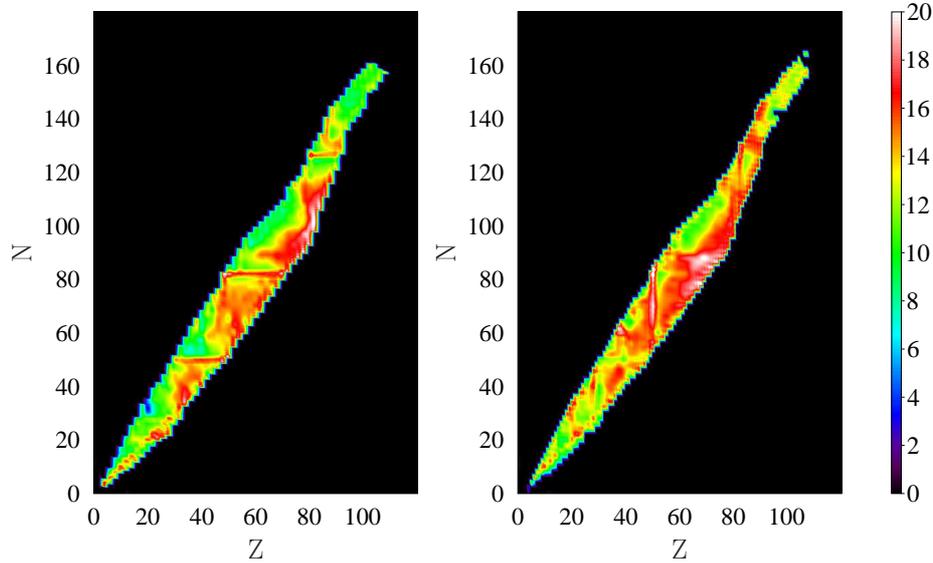
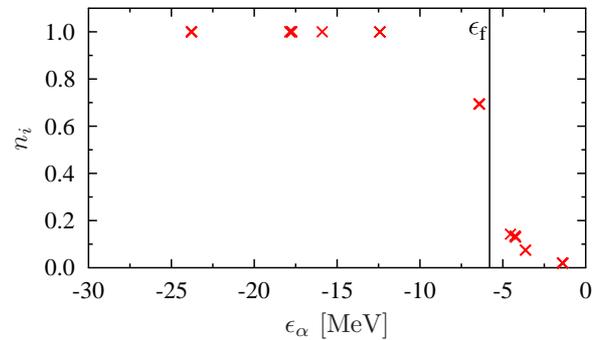


FIG. 3.10 – Valeur de $\Delta A^{1/2}$ le long de la charte des noyaux pour le gap neutron à gauche et le gap proton à droite. Avec Δ calculé avec la formule à 5 points (3.39).

Fragmentation des nombres d'occupations

Le principal effet de l'appariement sur la densité à un corps est la fragmentation des nombres d'occupation autour de l'énergie de Fermi. Avec la théorie HF, les nombres d'occupation sont égaux à 0 (au dessus de l'énergie de Fermi) ou à 1 (en dessous de l'énergie de Fermi). La prise en compte des corrélations d'appariement conduit à une fragmentation des nombres d'occupation illustrée sur la figure 3.11 pour le ^{96}Zr .

FIG. 3.11 – Nombres d'occupation des niveaux individuels neutron en fonction de leur énergie de champ moyen pour le noyau ^{96}Zr . La ligne verticale correspond à l'énergie de Fermi.



Il sera montré dans la suite de cette thèse que la population de ces niveaux individuels moins liés aura une influence notamment sur les réactions de transfert.

Influence de l'appariement sur les déformations

Un deuxième effet important de l'appariement est sur la forme des noyaux. En effet, la force d'appariement tend systématiquement à stabiliser les noyaux de façon sphérique. De façon à vérifier ce phénomène et à tester l'effet de l'appariement sur la polarisation de la surface, on a modifié la valeur de l'interaction d'appariement surfacique de $V_0^{nn} = 0$ à 2200 MeV fm^3 avec une interaction proton-proton proportionnelle $V_0^{pp} = 1.125V_0^{nn}$. La dépendance des β_n et β_p obtenus en fonction de la somme des gaps est montrée sur la figure 3.12.

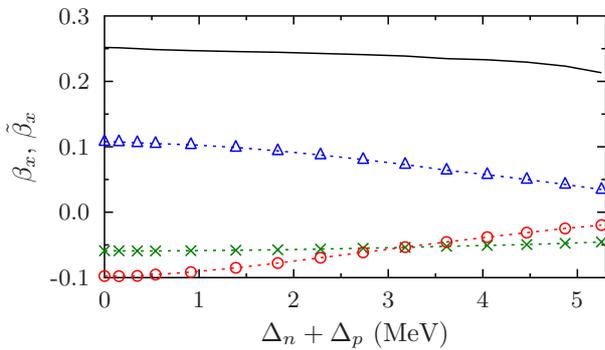


FIG. 3.12 – Paramètres de déformation du noyau d' ^{238}U en fonction de la somme des gaps neutron et proton. Les paramètres β_2 (ligne continue noire), β_4 (triangles bleus), $\tilde{\beta}_2$ (croix vertes) et $\tilde{\beta}_4$ (cercles rouges) sont présentés.

Lorsque la force d'appariement augmente, les gaps proton et neutron augmentent. La figure 3.12 montre le comportement systématique de la déformation qui diminue à mesure que l'appariement augmente. Comme attendu, la déformation du noyau diminue mais aussi la polarisation de la surface. Ceci montre la corrélation entre la déformation du noyau et la polarisation de la surface. Il faut noter que les résultats présentés sur la figure 3.12 sont quasiment indépendants du type de force utilisé (surface, mixte ou volume).

3.3 La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité dépendante du temps

La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité est valable de la même manière pour les calculs dynamiques. La seule différence concerne les termes de la fonctionnelle qui brisent la symétrie par renversement du temps. Ce sont les termes qui dépendent des paramètres B_{10} , B_{11} , B_{12} et B_{13} (voir équation (3.3)).

3.3.1 Le code TDHF3D

Le code TDHF3D est basé sur le code EV8 où l'évolution en temps imaginaire est remplacée par l'évolution en temps réel. De façon à étudier les réactions, des symétries ont été relâchées. Un seul plan de symétrie est conservé : $\rho(x, y, z) = \rho(x, y, -z)$ comme décrit sur le schéma 3.13.

De plus, la symétrie par renversement du temps n'a plus lieu d'être, chaque fonction d'onde $|\alpha\rangle$ et $|\bar{\alpha}\rangle$ a donc une fonction d'onde propre.

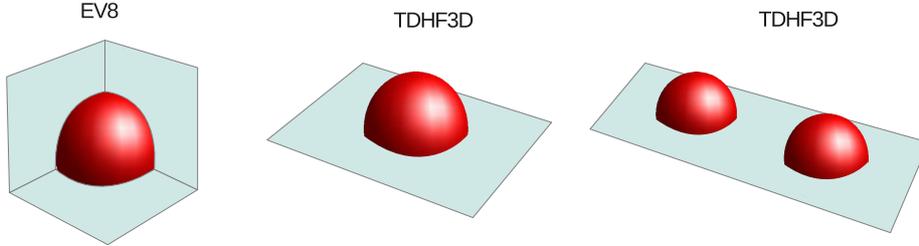


FIG. 3.13 – Plan de symétrie utilisé lors de l'initialisation EV8 ou la dynamique TDHF3D. À gauche, les symétries utilisées dans EV8. Au milieu, le cas TDHF3D avec un noyau. À droite le cas TDHF3D avec deux noyaux.

De façon à limiter les erreurs numériques, un algorithme de Runge-Kutta à l'ordre 4 est utilisé. À chaque pas en temps, les équations différentielles TDHF et BCS dépendantes du temps (équations (1.65) à (1.67)) sont simultanément résolues par l'algorithme présenté par le schéma 3.15. Le pas en temps lors de l'évolution est de $0,015 \times 10^{-22}$ s et le même pas du réseau que pour l'initialisation est utilisé (0,8 fm). De manière générale, toutes les approximations numériques utilisées pour l'initialisation sont utilisées pour la dynamique.

De façon à simplifier l'évolution des équations BCS, une relation matricielle est utilisée,

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_\alpha(t) = A_\alpha(t) g_\alpha(t), \quad (3.41)$$

pour $\alpha > 0$, avec

$$g_\alpha(t) = \begin{pmatrix} n_\alpha(t) - 1/2 \\ \kappa_\alpha^{Re}(t) \\ \kappa_\alpha^{Im}(t) \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

$$A_\alpha(t) = \begin{pmatrix} 0 & -2\Delta_\alpha^{Im}(t) & 2\Delta_\alpha^{Re}(t) \\ 2\Delta_\alpha^{Im}(t) & 0 & \epsilon_k(t) + \epsilon_{\bar{\alpha}}(t) - 2\lambda \\ -2\Delta_\alpha^{Re}(t) & \epsilon_k(t) + \epsilon_{\bar{\alpha}}(t) - 2\lambda & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Les nombres d'occupations des états $\bar{\alpha}$ sont ensuite déterminés comme, $n_{\bar{\alpha}}(t) = n_\alpha(t)$ avec le gap calculé comme (3.18) et la fonction de coupure (3.17).

L'utilisation de l'algorithme RK4 et de l'astuce numérique présentée dans la partie 3.1.3 a permis d'obtenir une très bonne conservation des propriétés d'orthonormalisation des fonctions d'ondes. Typiquement lors d'une collision, l'erreur maximale sur la normalisation est de l'ordre de 10^{-6} . Ainsi on peut voir sur la figure 3.14 que le nombre de particules totale est bien conservé. Il faut noter que cette précision sur la normalisation est très importante pour les calculs des probabilités de transfert.

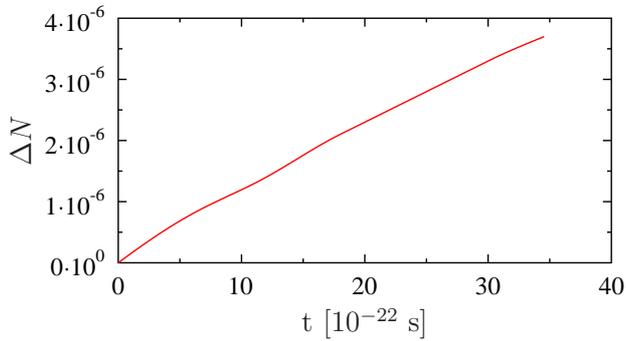


FIG. 3.14 – Erreur numérique sur le nombre de particules au cours du temps $\Delta N = |N(t) - N(0)|$ pour la simulation d’une collision $^{18}\text{O} + ^{218}\text{Pb}$.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, la fonctionnelle de Skyrme a été présentée, elle permet de faire des calculs réalistes avec le formalisme des théories de champ moyen. Des applications statiques ont été présentées, notamment concernant la forme des noyaux. La déformation de la diffusivité de la surface a été étudiée systématiquement sur toute la charte des noyaux. Il a ainsi été montré que la diffusivité diminue sur l’axe de déformation lorsque le noyau devient prolate. Les principaux effets statiques de l’appariement ont ensuite été rappelés.

Nous allons maintenant utiliser le code TDHF3D présenté ici, pour l’étude des résonances géantes (chapitre 4) et les réactions de transfert (chapitre 5).

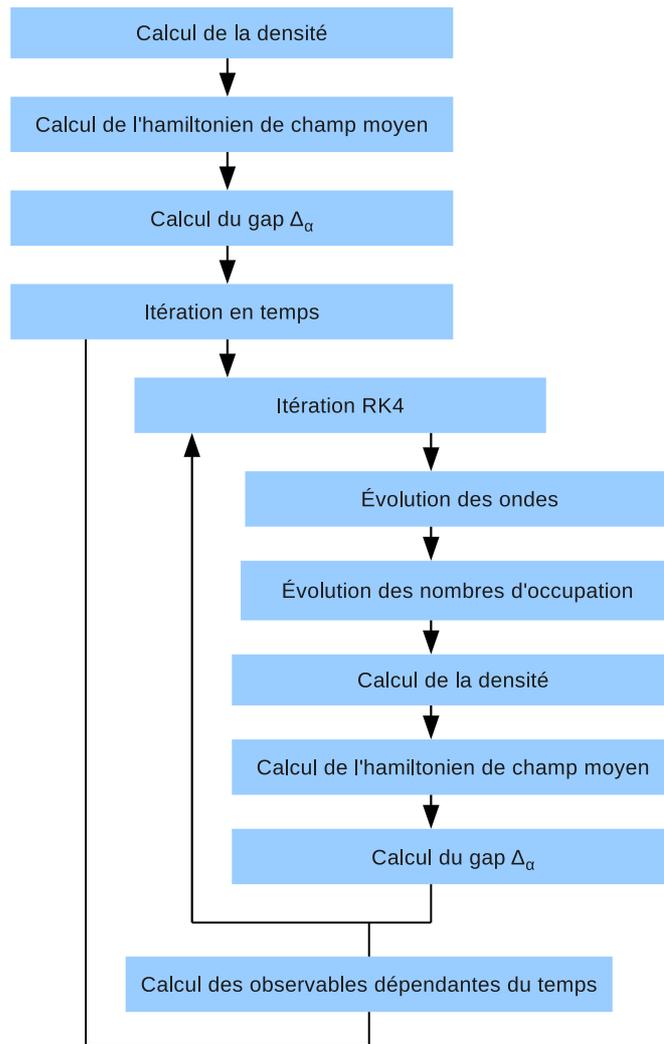


FIG. 3.15 – Algorithme principale du code TDHF3D avec appariement.

Chapitre 4

Étude systématique des résonances géantes

Les résonances géantes correspondent à un mouvement collectif des nucléons dans le noyau conduisant en général à une oscillation de sa surface, de spin ou d'isospin. Elles représentent un laboratoire particulier pour comprendre la dynamique du noyau et en déduire certaines propriétés du noyau. Expérimentalement différentes techniques peuvent être utilisées pour obtenir le spectre de la résonance géante, notamment la diffusion de particules chargées légères ou d'ions lourds. On peut caractériser une résonance géante par sa multipolarité, son isospin et son spin. Une illustration des différents types de résonances géantes isoscalaires et isovecteurs est montrée sur la figure 4.1.

L'étude des résonances géantes possède plusieurs motivations :

- l'intérêt astrophysique, par exemple le processus rapide (R-process) [79],
- contraindre les propriétés globales des noyaux, par exemple, l'incompressibilité de la matière nucléaire [80], l'énergie de symétrie [81], la peau de neutron ...
- contraindre les interactions effectives.

Leur étude est aussi un challenge théorique pour la résolution du problème à N corps. En effet, la description des résonances géantes nécessite une description simultanée des effets de structure, d'appariement et de déformation qui sont des effets liés aux propriétés à un corps. Conjointement, le temps de vie fournit des informations sur la dissipation dans le noyau qui est plutôt liée aux effets à deux corps et plus [80, 82]. Plus d'informations peuvent être obtenues dans les livres et articles suivants [20, 80, 83, 84].

Dans ce chapitre, nous allons tout d'abord étudier l'effet de l'appariement sur les résonances géantes dipolaires et quadrupolaires. L'effet de la restauration du nombre de particules sera aussi quantifiée. Puis une étude globale des résonances quadrupolaires isoscalaires et isovecteurs sera effectuée pour tous les noyaux sphériques et déformés présentés dans le chapitre 3.

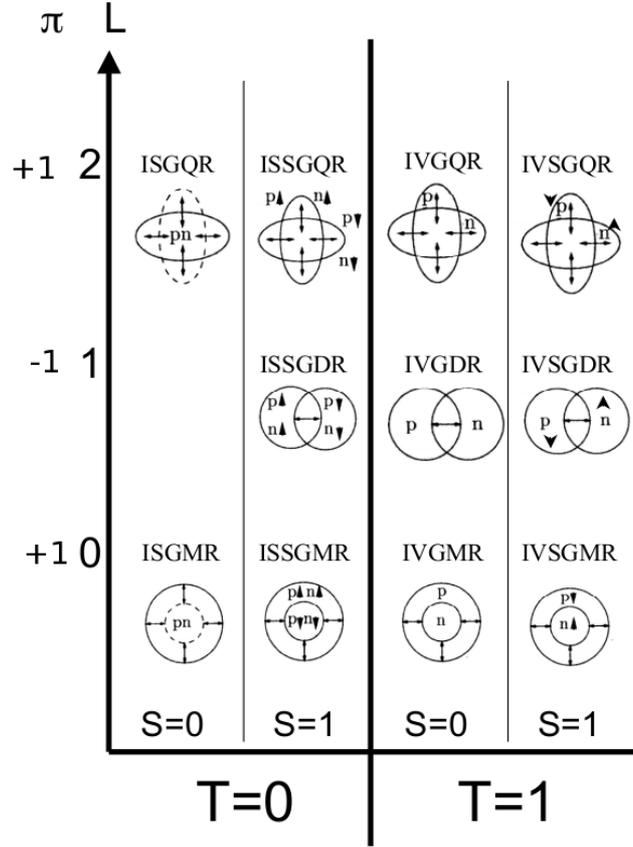


FIG. 4.1 – Classification des différentes résonances géantes. Les résonances sont définies par leur multipolarité L et leur parité π . De plus, celles où les protons et neutrons oscillent en phase sont dites isoscalaires ($T=0$) et celles où ils oscillent en opposition de phase sont dites isovecteurs ($T=1$). Les résonances avec une multipolarité $L=0$ sont appelées monopolaires, $L=1$: dipolaires et $L=2$ quadrupolaires.

4.1 Calcul de réponse linéaire

Lors d'une collision périphérique, les mouvements collectifs peuvent par exemple être excités du fait des champs coulombiens entre les partenaires de la collision. Théoriquement, cela peut-être vu comme un potentiel perturbateur externe associé à un opérateur \hat{Q} . La réponse du noyau est alors étudiée en calculant la fonction de réponse,

$$S(Q; E) = \sum_{\nu} |\langle \Psi_0 | \hat{Q} | \Psi_{\nu} \rangle|^2 \delta(E - \tilde{E}_{\nu}). \quad (4.1)$$

4.1. Calcul de réponse linéaire

Où $|\Psi_\nu\rangle$ dénote les états propres de l'hamiltonien nucléaire $H|\Psi_\nu\rangle = (\tilde{E}_n + E_0)|\Psi_\nu\rangle$. \hat{Q} est un opérateur qui définit le mode excité. Par exemple, pour une excitation dipolaire :

$$\hat{Q} = \sum_i^Z \frac{Ne}{A} \hat{x}_i - \sum_i^N \frac{Ze}{A} \hat{x}_i. \quad (4.2)$$

Afin d'étudier la fonction de réponse dans une approche dynamique, l'état fondamental du système est excité en appliquant un "boost" à l'instant $t=0$,

$$|\Psi(t=0)\rangle = e^{i\eta\hat{Q}}|\Psi_0\rangle, \quad (4.3)$$

où le paramètre η quantifie l'intensité de l'excitation, cette excitation devant être le plus petit possible de façon à rester dans le régime linéaire. Il est à noter que dans ce régime l'étude dynamique avec TDHF ou TDHFB est équivalente à résoudre les équations RPA ou QRPA respectivement [20]. L'excitation initiale revient à donner une impulsion aux particules à l'intérieur du noyau. Par exemple après l'excitation dipolaire (4.2),

$$\langle\Psi(t=0)|\hat{p}_x^p|\Psi(t=0)\rangle = \hbar\eta\frac{Ne}{A}x, \quad (4.4)$$

$$\langle\Psi(t=0)|\hat{p}_x^n|\Psi(t=0)\rangle = -\hbar\eta\frac{Ze}{A}x. \quad (4.5)$$

L'excitation dipolaire revient donc à donner une vitesse aux particules sur l'axe \vec{x} , cette vitesse étant positive pour les protons et négative pour les neutrons. Les facteurs $\frac{N}{A}$ et $\frac{Z}{A}$ étant choisis de façon à ce que la vitesse du centre de masse soit nulle.

Durant l'évolution, cette excitation va se traduire par des oscillations du moment dipolaire. Ces oscillations sont visibles sur la figure 4.2, où la quantité :

$$f(t) = \langle\Psi(t)|\hat{Q}|\Psi(t)\rangle, \quad (4.6)$$

est tracée en fonction du temps.

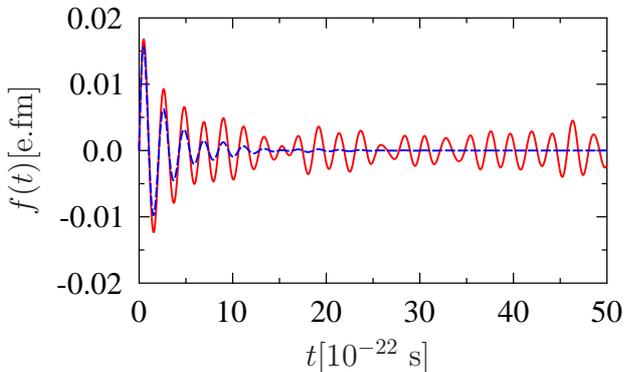


FIG. 4.2 – Exemple de réponse en temps du noyau ^{28}Mg après une excitation dipolaire avec $\eta=0,01$ (ligne continue rouge). La courbe en pointillé bleus représente la fonction amortie par le facteur $e^{-\Gamma_0/\hbar t}$, avec $\Gamma_0=2$ MeV.

On peut décomposer cette oscillation en fonction des états excités du système, au premier ordre en η [8, 11],

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\Psi(t=0)\rangle = e^{-\frac{iE_0t}{\hbar}} |\Psi_0\rangle + i\eta \sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | Q | \Psi_0 \rangle, \quad (4.7)$$

et

$$f(t) = \langle \Psi(t) | \hat{Q} | \Psi(t) \rangle = f(0) + i\eta \sum_n |\langle \Psi_n | \hat{Q} | \Psi_0 \rangle|^2 \left(e^{-i\frac{\tilde{E}_n t}{\hbar}} - e^{i\frac{\tilde{E}_n t}{\hbar}} \right). \quad (4.8)$$

La fonction de réponse en énergie est obtenue à l'aide d'une transformée de Fourier,

$$f(E) = \int_{t=0}^{t=\infty} e^{\frac{iEt}{\hbar}} (f(t) - f(0)) dt = i\pi\hbar\eta \sum_n |\langle \Psi_n | \hat{Q} | \Psi_0 \rangle|^2 \left[\delta(E + \tilde{E}_n) - \delta(E - \tilde{E}_n) \right]. \quad (4.9)$$

On voit ainsi que la transformée de Fourier du signal dépendant du temps donne accès à la fonction de réponse du système à travers la relation,

$$S(E) = \frac{1}{\pi\eta\hbar} \text{Im} f(E). \quad (4.10)$$

Il est à noter que cette équation n'est valable que si la transformée de Fourier est effectuée sur un temps infini. En pratique, la transformée de Fourier ne peut être calculée que jusqu'à un temps T et le résultat dépendra fortement de ce paramètre. De façon à réduire cet effet, un amortissement est ajouté au signal,

$$f(E) = \int_{t=0}^{t=\infty} e^{(\frac{iE}{\hbar} - \frac{\Gamma_0}{2\hbar})t} (f(t) - f(0)) dt. \quad (4.11)$$

L'effet de cet amortissement est présenté sur la figure 4.2. Dans ce cas, le fonction de réponse devient,

$$S(E) = \frac{1}{\pi\eta\hbar} \text{Im} f(E) = \frac{\Gamma_0}{2\pi} \sum_n \left(\frac{1}{(\frac{\Gamma_0}{2})^2 + (E - \tilde{E}_n)^2} - \frac{1}{(\frac{\Gamma_0}{2})^2 + (E + \tilde{E}_n)^2} \right) |\langle \Psi_n | \hat{Q} | \Psi_0 \rangle|^2. \quad (4.12)$$

Les distributions de Dirac ont donc été remplacées par des fonctions de Lorentz. La fonction de réponse correspondant à l'évolution de la figure 4.2 est tracée sur la figure 4.3. En particulier, l'effet de l'amortissement est d'adoucir le spectre. Il faut noter que ces résultats sont identiques si on multiplie par 10 ou par 0,1 le facteur η . Ce qui confirme le fait que η est suffisamment petit pour justifier l'approximation linéaire. Sur la figure 4.3, on voit très clairement un pic d'énergie 20 MeV qui correspond à la valeur attendue du mode collectif dipolaire pour ce noyau.

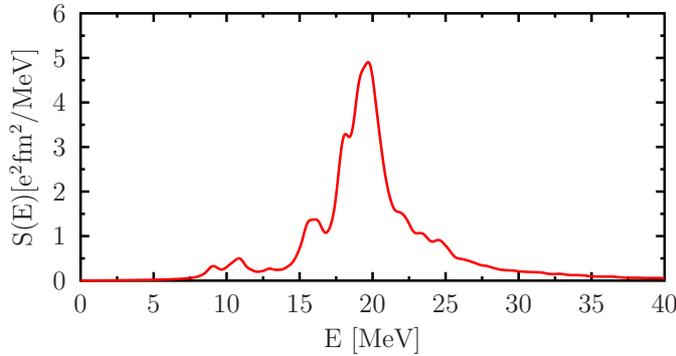


FIG. 4.3 – Fonction de réponse du noyau ^{28}Mg pour une excitation dipolaire avec un paramètre $\Gamma_0=2$ MeV.

4.2 Effet de l'appariement sur les résonances géantes

Pour tester l'effet de l'appariement, trois théories ont été utilisées, (i) TDHF où il n'y a pas d'appariement, (ii) la FOA où l'appariement n'influence que l'état initial et (iii) TDHF+BCS où l'appariement est pleinement pris en compte et les nombres d'occupation évoluent au cours du temps (voir chapitre 2). En utilisant ces trois théories, on peut dissocier les différents effets de l'appariement (i) l'effet de l'appariement sur l'état initial en comparant TDHF et la FOA (ii) l'effet dynamique de l'appariement en comparant la FOA et TDHF+BCS.

4.2.1 Effet de l'appariement sur les résonances géantes isovecteurs dipolaires

L'interaction utilisée ici est SkM* avec une force d'appariement mixte (voir le tableau 3.2). Les calculs dynamiques ont été effectués en utilisant le cadre numérique détaillé dans le chapitre 3.

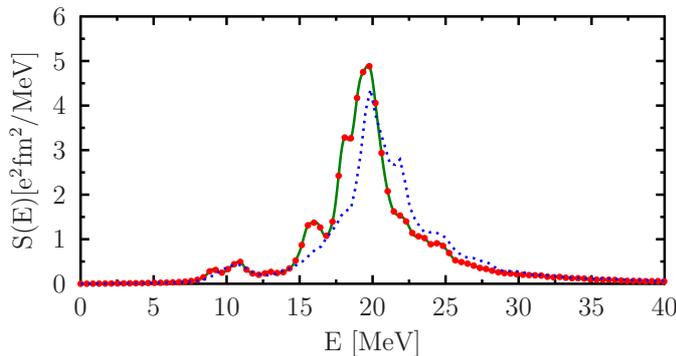


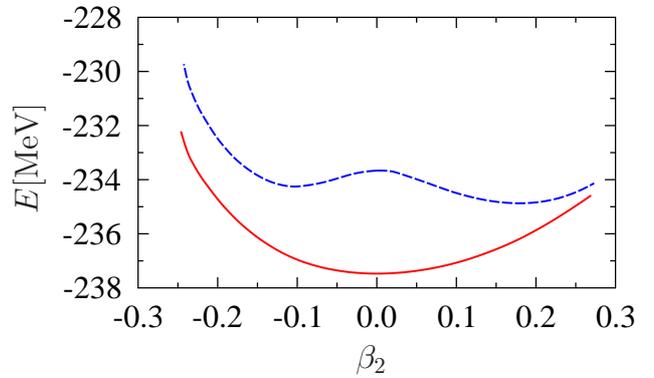
FIG. 4.4 – Comparaison des différentes théories avec et sans appariement, TDHF (pointillés bleus), FOA (ligne verte) et TDHF+BCS (points rouges) pour une excitation dipolaire sur le ^{28}Mg .

La figure 4.4 montre les différents effets de l'appariement pour une excitation dipolaire. Sur cette figure, on voit que la réponse obtenue avec TDHF donne une fréquence collective légèrement plus haute (20 MeV) que celle obtenue avec appariement. À l'inverse, la FOA et TDHF+BCS ne peuvent être distinguées. Ceci démontre que pour ce cas précis, il n'y a pas

d'effets d'appariement dynamiques.

La différence entre TDHF et TDHF+BCS provient exclusivement de la condition initiale qui est sphérique dans le second cas et déformée dans le premier. Ceci est un effet important de l'appariement qui en raison de la fragmentation des nombres d'occupation tend à favoriser la sphéricité (voir section 3.2.3). Il est à noter que l'inclusion de l'appariement est de ce fait essentielle pour effectuer des calculs réalistes. Afin d'illustrer cet effet, la figure 4.5 montre la surface de potentiel du ^{28}Mg en fonction de la déformation obtenue avec EV8 avec et sans appariement.

FIG. 4.5 – Énergie potentielle en fonction du paramètre de déformation β_2 . Le calcul est effectué avec la théorie HF (tirets bleus) et avec la théorie HF+BCS (ligne continue rouge).



De manière générale, le principal effet de l'appariement sur les résonances géantes proviendra de la déformation dans l'état initial, cette déformation étant essentielle pour décrire de manière réaliste la fonction de réponse.

4.2.2 Effet de l'appariement sur les résonances géantes isoscalaires quadrupolaires

Afin d'illustrer l'effet de l'appariement sur les résonances géantes quadrupolaires (GQR), on utilise ici les opérateurs $d_{z^2}^{K=0}$ et $d_{x^2-y^2}^{K=2}$ définis en annexe B. De même que pour les résonances dipolaires, les GQR sont influencées par l'appariement de par les propriétés de l'état initial. À l'inverse du cas précédent, la GQR présente le plus souvent des pics de basse énergie. Un exemple de fonction de réponse dans le noyau ^{34}Mg qui est déformé de façon prolata avec un paramètre de déformation $\beta_2=0,33$ est donné dans la figure 4.6.

Du fait de la déformation, les réponses pour $d_{z^2}^{K=0}$ et $d_{x^2-y^2}^{K=2}$ sont différentes. L'influence dynamique est montrée sur la figure 4.6 où les évolutions TDHF+BCS et FOA sont comparées. On voit que comme pour la résonance dipolaire, l'appariement n'a pas d'influence dynamique à l'exception de $K=0$ à basse énergie. Un pic supplémentaire avec une énergie de 2 MeV apparaît lorsque la théorie TDHF+BCS est utilisée. On peut donc en déduire que ce pic est directement lié aux corrélations d'appariement. Comme nous le verrons par la suite, les théories incluant

4.2. Effet de l'appariement sur les résonances géantes

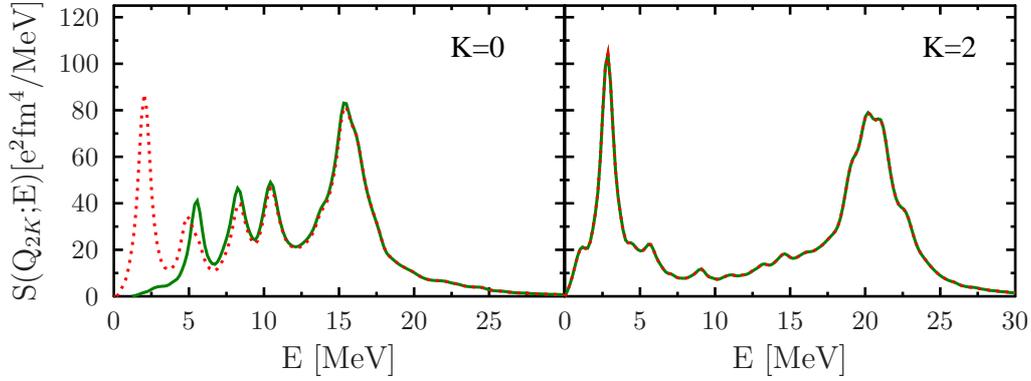


FIG. 4.6 – Spectre d'excitation isoscalaire quadrupolaire pour le ^{34}Mg , le calcul est effectué avec la théorie TDHF+BCS (pointillés rouges) et FOA (ligne verte). Il faut noter que pour $K=2$ les deux courbes sont identiques.

l'appariement de type TDHF+BCS ou TDHFB reproduisent relativement bien la position du premier pic de basse énergie mais sous-estiment sa hauteur.

Les effets dynamiques liés à l'appariement sont donc cruciaux à basse énergie ($E < 5$ MeV) et relativement marginal à haute énergie. Pour renforcer cette conclusion, il nous faut vérifier que des effets supplémentaires de l'appariement n'apparaissent pas lorsque l'appariement est traité de façon complète. C'est-à-dire, en utilisant la théorie TDHFB (ou la QRPA) sans l'approximation BCS.

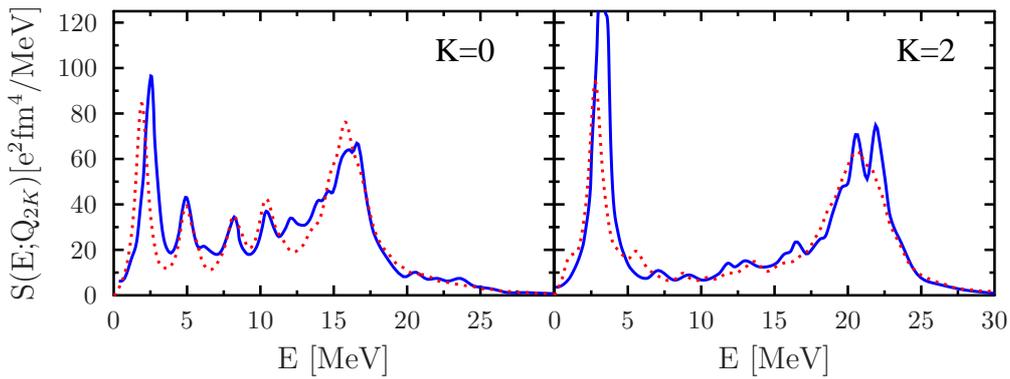


FIG. 4.7 – Spectre d'excitation isoscalaire quadrupolaire pour le ^{34}Mg , le calcul est effectué avec la théorie TDHF+BCS (pointillés rouges) et la QRPA (ligne bleue). La QRPA est extrait de la référence [85].

4.2.3 Influence de l'approximation BCS, comparaison avec la QRPA

Pour déterminer l'influence de l'approximation BCS, nous allons comparer nos résultats TDHF+BCS aux résultats QRPA [85]. Cette comparaison est effectuée sur la figure 4.7 où une très bonne correspondance est trouvée entre les résultats de la QRPA et TDHF+BCS. On note néanmoins une différence entre les théories qui peut s'expliquer par (i) des erreurs numériques, puisque les codes utilisés sont différents et utilisent des approximations numériques différentes (ii) les conditions initiales obtenues avec HF+BCS qui peuvent être différentes de celles obtenues avec HFB notamment pour les noyaux loin de la vallée de stabilité comme c'est le cas ici (iii) d'éventuelles différences intrinsèques entre les théories QRPA et TDHF+BCS.

Les différences entre les deux résultats sur la figure 4.7 étant faibles, on peut conclure que l'approximation BCS est ici assez bonne.

4.2.4 Effet de la restauration du nombre de particules

Comme il a été montré au chapitre 2, le mélange de configurations ayant des nombres de particules différents peut entraîner des erreurs importantes. Pour déterminer l'effet de ces erreurs, l'état BCS dépendant du temps peut être projeté sur le bon nombre de particules à chaque pas en temps,

$$Q^{N,Z}(t) = \frac{\langle \Psi(t) | \hat{P}_N(N) \hat{P}_Z(Z) \hat{Q} \hat{P}_N(N) \hat{P}_Z(Z) | \Psi(t) \rangle}{\langle \Psi(t) | \hat{P}_N(N) \hat{P}_Z(Z) | \Psi(t) \rangle}, \quad (4.13)$$

$\hat{P}_N(N)$ et $\hat{P}_Z(Z)$ étant les opérateurs qui projettent respectivement sur les nombres de neutrons N et protons Z . En pratique, la projection a été effectuée en utilisant la méthode décrite dans l'annexe A.1.2.

La fonction de réponse projetée,

$$S^{N,Z}(Q; E) = \sum_n |\langle \Psi_n | \hat{P}_N(N) \hat{P}_Z(Z) \hat{Q} | \Psi_0 \rangle|^2 \delta(E - \tilde{E}_n), \quad (4.14)$$

devient,

$$S^{N,Z}(Q; E) = \frac{|\mathcal{F}^{N,Z}(E)|^2}{S(Q; E)}, \quad (4.15)$$

avec $\mathcal{F}^{N,Z}(E) = \frac{1}{\pi\eta\hbar} f^{N,Z}(E)$ et où $f^{N,Z}(E)$ est la transformée de Fourier de $Q^{N,Z}(t)$.

Il faut noter que cette approche est limitée puisque la projection est effectuée après l'évolution, par conséquent seule la hauteur des pics est modifiée par la projection, l'énergie de la résonance restant inchangée. Pour aller plus loin, il faudrait adopter une technique de variation après projection (VAP [86]) dynamique.

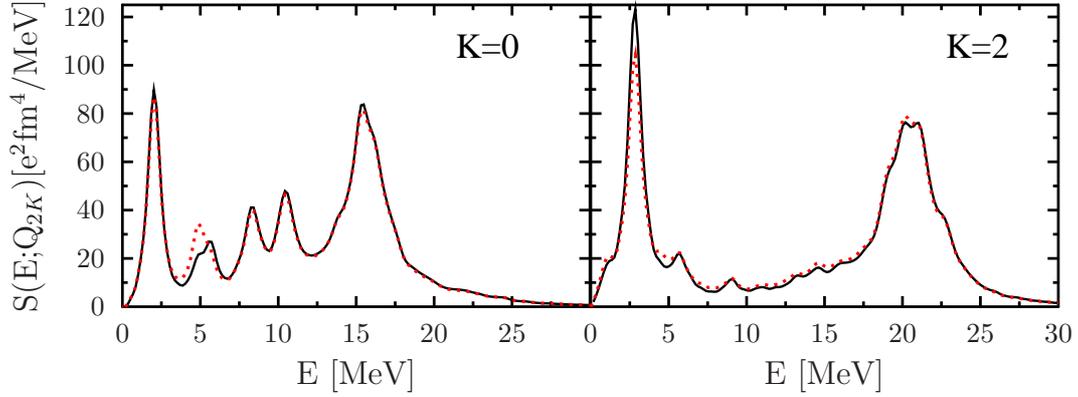


FIG. 4.8 – Spectre d’excitation isoscalaire quadrupolaire pour le ^{34}Mg , le calcul est effectué en restaurant la symétrie associée au nombre de particules (ligne noire) et sans la restauration du nombre de particules (pointillés rouges).

Le spectre projeté sur le bon nombre de particules est tracé sur la figure 4.8, où l’on voit que la restauration de la symétrie modifie faiblement le spectre. En conclusion, le mélange de configurations associée à la brisure de symétrie du nombre de particules ne modifie que faiblement le spectre des résonances géantes. À noter que cette conclusion est faite ici sur des excitations conservant le nombre de particules et la situation semble différente pour des excitations plus exotiques telles que les vibrations géantes de paires (GPV) impliquant la densité anormale [87]

4.3 Étude systématique des résonances géantes quadrupolaires pour les noyaux sphériques

Pour mieux comprendre et décrire les résonances géantes quadrupolaires, nous allons effectuer une étude globale de leurs propriétés sur toute la carte des noyaux. Tout d’abord, pour les noyaux sphériques puis sur les noyaux déformés.

Pour cette étude, deux forces de Skyrme ont été sélectionnées SkM* et SLy4. Les noyaux sphériques obtenus pour ces deux forces avec la méthode décrite dans la partie 3.2 sont présentés sur la figure 3.2. Il est à noter que la paramétrisation utilisée joue un rôle important dans la mesure où seulement 263 noyaux sont trouvés sphériques avec SLy4 et 324 avec SkM*. Pour chacun des noyaux, la fonction de réponse a été obtenue en appliquant l’opérateur $d_{z^2}^{K=0}$, la fonction de réponse étant dégénérée en K .

Le réseau choisi pour cette étude est de taille $2L_x = 2L_y = 2L_z = 22,4$ fm, le pas en temps est de $1,5 \times 10^{-24}$ s. L’évolution a été effectuée jusqu’à un temps de 50×10^{-22} s. La stabilité des résultats a été testée par rapport à l’augmentation de la taille.

4.3.1 Vérification des règles de somme

Un moyen simple de vérifier la convergence numérique des calculs est de tester si la règle de somme [21, 88],

$$m_1^Q = \int_0^\infty S(Q; E) E dE = \frac{1}{2} \langle \Psi_0 | [\hat{Q}, [\hat{H}, \hat{Q}]] | \Psi_0 \rangle, \quad (4.16)$$

est bien vérifiée. Cette propriété est une propriété fondamentale des spectres d'excitation. Elle est vraie pour tout opérateur d'excitation \hat{Q} et tout hamiltonien \hat{H} .

Des expressions des règles de somme en fonction des propriétés statiques des noyaux (rayon, moment quadrupolaire intrinsèque) peuvent être obtenues en calculant explicitement l'expression de droite de (4.16). En parallèle, une valeur numérique de m_1^Q peut être obtenue en intégrant directement la fonction de réponse. Un critère de convergence sera que ces deux méthodes l'une analytique et l'autre numérique donnent les mêmes résultats.

Les expressions des règles de somme isoscalaires et isovecteurs sont données en annexe B.2. Pour être plus précis, il faut prendre en compte le fait que les calculs de champ moyen statiques et dynamiques sont effectués avec une correction du centre de masse qui consiste à introduire un terme correctif dans l'expression du calcul de l'énergie cinétique,

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \hat{\mathbf{p}}_i^2 \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \left(1 - \frac{1}{A}\right) \sum_i \hat{\mathbf{p}}_i^2. \quad (4.17)$$

Ce même terme correctif $(1 - \frac{1}{A})$ doit être pris en compte dans le calcul théorique des règles de somme [89]. De façon à obtenir un bon accord entre la règle de somme calculée et la règle de somme théorique, le $\langle r^2 \rangle$ calculée avec le code EV8 sera pris en compte sans approximation.

Pour tester la convergence de nos calculs, nous avons calculé pour chaque noyau sphérique le rapport entre la règle de somme calculée et la règle de somme théorique,

$$\frac{(m_1^Q)_{\text{calc}}}{(m_1^Q)_{\text{theo}}} = \frac{\int_0^\infty S(Q; E) E dE}{\frac{1}{2} \langle \Psi_0 | [\hat{Q}, [\hat{H}, \hat{Q}]] | \Psi_0 \rangle}. \quad (4.18)$$

Ce rapport est tracé sur la figure 4.9 en fonction de la masse, on voit que ce rapport est proche de 1 et que l'erreur sur la règle de somme ne dépasse jamais 0,5%. Cette erreur minimale est due au pas de réseau de 0,8 fm, par exemple pour le ^{208}Pb avec SkM*, l'erreur est de 0,28% avec un pas de 0,8 fm et de 0,08% avec un pas de 0,6 fm. L'erreur commise avec un pas de réseau de 0,8 fm étant de l'ordre de grandeur de celle des codes de QRPA récents [89, 90, 91], nous avons décidé de garder ce pas de réseau pour le reste de l'étude.

4.3.2 Détermination des pics de basse énergie

La détermination des états excités de basse énergie est un objectif primordial des théories de champ moyen, le but est de décrire toute la spectroscopie de tous les noyaux à partir

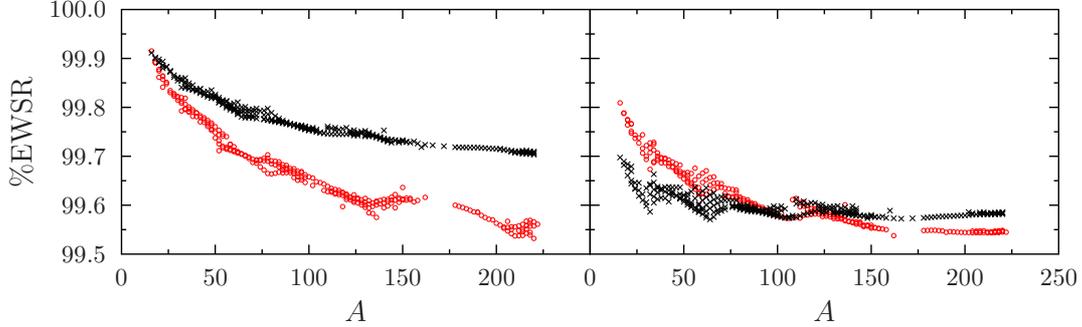


FIG. 4.9 – Pourcentage respecté de la règle de somme isoscalaire (figure de gauche) et isovecteur (figure de droite) pour chaque noyau sphérique en fonction de la masse. Le calcul est effectué avec les interactions SLy4 (cercles rouges) et SkM* (croix noires).

d'une fonctionnelle unique. De nombreuses mesures expérimentales ont été effectuées pour obtenir le premier état excité 2^+ [92]. Ces états donnent des informations précieuses sur les propriétés intrinsèques des noyaux. Ils sont par exemple, un moyen de désigner les fermetures de couche. De plus l'appariement et plus généralement les corrélations, jouent un rôle crucial dans la description du premier 2^+ (voir par exemple [93]). Les données expérimentales ont été systématiquement comparées avec les résultats de la théorie TDHF+BCS en suivant la méthodologie de l'article [94].

Deux quantités sont obtenues expérimentalement : l'énergie du premier état 2^+ E_{2^+} et le taux de transition $B(E2, \uparrow)$ associé. Le probabilité de transition $B(E2, \uparrow)$ est définie de la façon suivante [20],

$$B(E2, \uparrow) = \sum_{K=-2}^2 |\langle \Psi_1 | Q_{2K}^p | \Psi_0 \rangle|^2, \quad (4.19)$$

où l'opérateur Q_{2K}^p ne s'applique que sur les protons,

$$\hat{Q}_{2K}^p = e \sum_{i=1}^Z r_i^2 Y_{2K}(\Omega_i). \quad (4.20)$$

L'extraction de l'énergie E_{2^+} et du taux de transition $B(E2, \uparrow)$ est assez difficile avec la technique de réponse linéaire puisque contrairement à la QRPA où l'on obtient directement les pics, ici nous n'avons accès qu'à la fonction de réponse $S(Q; E)$ qui contient en particulier, une largeur non physique Γ_0 . En pratique, il est nécessaire de déconvoluer cette largeur du signal physique.

Afin d'extraire les différentes composantes physiques du spectre, on ajuste une somme de

Lorentzienne,

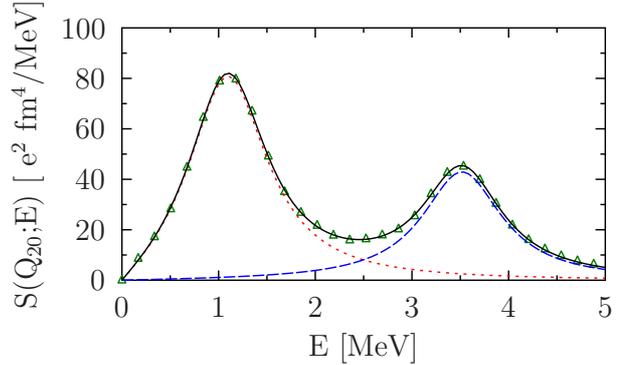
$$F(E) = \sum_{\nu} A_{\nu} \frac{\Gamma_0}{2\pi} \frac{1}{(E^2 - \tilde{E}_{\nu}^2)^2 + (\frac{\Gamma_0}{2})^2}, \quad (4.21)$$

sur le spectre de basse énergie (entre 0 et 7 MeV) obtenue avec TDHF+BCS. De cette façon, les énergies et hauteurs des pics sont reliées directement aux paramètres ajustés A_{ν} et E_{ν} . En particulier, on a $B(E2, \uparrow) = 5A_{\nu}$. En pratique cette méthode a été améliorée en tenant compte du fait que la dynamique est effectuée jusqu'à un certain temps T . Dans ce cas, après la transformée de Fourier de la fonction $f(t) - f(0)$, on obtient,

$$S(Q; E) = \frac{1}{\pi} \sum_{\nu} |\langle \Psi_{\nu} | \hat{Q} | \Psi_0 \rangle|^2 \left\{ \frac{-\frac{\Gamma_0}{2} \left(e^{-\frac{\Gamma_0 T}{2\hbar}} \cos\left(\frac{(E-E_{\nu})T}{\hbar}\right) - 1 \right) + (E - E_{\nu}) e^{-\frac{\Gamma_0 T}{2\hbar}} \sin\left(\frac{(E-E_{\nu})T}{\hbar}\right)}{(\frac{\Gamma_0}{2})^2 + (E - E_{\nu})^2} - \frac{-\frac{\Gamma_0}{2} \left(e^{-\frac{\Gamma_0 T}{2\hbar}} \cos\left(\frac{(E+E_{\nu})T}{2\hbar}\right) - 1 \right) + (E + E_{\nu}) e^{-\frac{\Gamma_0 T}{2\hbar}} \sin\left(\frac{(E+E_{\nu})T}{\hbar}\right)}{(\frac{\Gamma_0}{2})^2 + (E + E_{\nu})^2} \right\}. \quad (4.22)$$

C'est donc cette expression avec une somme de sept termes qui sera ajustée sur le spectre TDHF+BCS en faisant varier, pour chaque terme ν , l'énergie E_{ν} et la probabilité de transition $|\langle \Psi_{\nu} | \hat{Q} | \Psi_0 \rangle|^2$. Un exemple de cet ajustement est donné sur la figure 4.10.

FIG. 4.10 – Illustration de la qualité de l'ajustement des pics de basse énergie. La fonction de réponse pour une excitation des particules chargées est tracée en ligne continue et la fonction (4.22) ajustée sur cette courbe est tracée en triangles verts. Les deux premiers termes de la fonction (4.22) sont aussi tracés en pointillés rouges et tirets bleus.



Cette méthode possède néanmoins certaines difficultés :

1. La convergence de l'état initial doit être très bonne de façon à éviter qu'un pic non-physique d'énergie proche de zéro n'apparaisse (voir section 3.1.3).
2. Le réseau de forme cubique peut provoquer des petites déformations qui donnent une dépendance de la réponse avec l'orientation du noyau, alors que le noyau est quasiment sphérique.
3. Lorsque deux pics de taille différentes sont proches, il est alors difficile de les distinguer.

4.3. Étude systématique des résonances géantes quadrupolaires pour les noyaux sphériques

Pour réduire l'erreur due au deuxième point, seuls les noyaux sphériques très bien convergés sont pris en compte. C'est-à-dire, ceux possédant un paramètre de déformation $\beta_2 < 10^{-8}$. Ceci donne lieu à un ensemble de 112 noyaux avec la fonctionnelle SLy4. Les résultats pour cet échantillon sont comparés à ceux de la QRPA sur la figure 4.11.

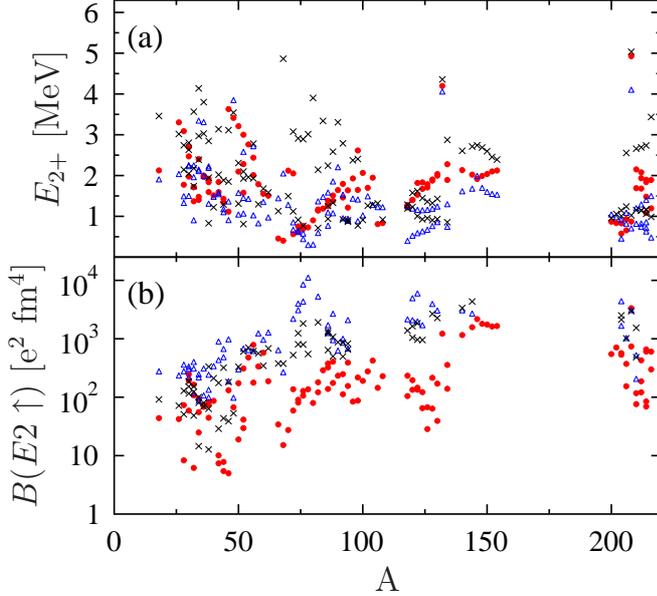


FIG. 4.11 – Comparaison systématique des propriétés du premier 2+ obtenue avec TDHF+BCS (avec la fonctionnelle SLy4) (points rouges), avec la QRPA [94] (croix noires) et expérimentalement (triangles bleus) en fonction de la masse. La comparaison est effectuée pour l'énergie sur la figure du haut et pour le taux de transition sur la figure du bas.

Pour quantifier l'accord théorie/expérience, l'écart type est calculé,

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_i^N (E_i^{calc} - E_i^{exp})^2}. \quad (4.23)$$

Pour la théorie TDHF+BCS, on obtient : $\sigma=0,77$ MeV et pour la QRPA : $\sigma=1,00$ MeV [94] avec le même échantillon. Il faut noter que l'interaction d'appariement utilisée pour la QRPA est légèrement différente. La théorie TDHF+BCS donne donc de meilleurs résultats pour l'énergie du premier état excité. Cependant pour la probabilité de transition, la figure 4.11 montre que TDHF+BCS sous-estime quasi-systématiquement le $B(E2, \uparrow)$ par un ordre de grandeur. Les résultats étant meilleurs pour la QRPA, mais il reste une sous-estimation systématique.

En conclusion, les théories de champ moyen avec appariement manquent de caractère prédictif sur l'intensité du signal bien que l'énergie soit globalement bien reproduite. On peut noter que la méthode des coordonnées génératrices [95] qui prend en compte certaines fluctuations quantiques négligées en TDHF ou TDHFB, reproduit mieux les résultats expérimentaux.

4.3.3 Énergie moyenne et largeur de la résonance principale

Nous allons, maintenant, nous intéresser aux pics principaux de haute énergie associés aux résonances géantes. Ceux-ci ont été largement étudiés expérimentalement et théoriquement

[80, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105], et permettent d'obtenir des informations sur la structure du noyau ainsi que certaines propriétés associées à l'équation d'état de la matière nucléaire.

À l'instar du pic de basse énergie, une procédure d'ajustement a été utilisée pour s'affranchir de l'effet de Γ_0 . Le pic principal de la résonance géante est caractérisé en ajustant une distribution de Lorentz unique autour de l'énergie collective,

$$L(E) = \frac{H_0 \Gamma_C}{2\pi} \frac{1}{(E - E_C)^2 + (\Gamma_C/2)^2}, \quad (4.24)$$

où les paramètres H_0 , Γ_C et E sont libres. Les résultats physiques ne devant pas dépendre du paramètre d'amortissement Γ_0 , on retranche à Γ_C la valeur de Γ_0 de façon à obtenir la largeur physique de la résonance $\Gamma = \Gamma_C - \Gamma_0$. Ainsi, la largeur Γ ne dépend pas de Γ_0 et dans la limite où l'évolution est effectuée sur un temps infini avec un paramètre d'amortissement tendant vers 0 : $\Gamma = \Gamma_C$.

Pour caractériser le pic principal, une autre méthode est souvent utilisée, elle consiste à calculer les différents moments de la distribution,

$$m_i = \int_a^b E^i S(E) dE. \quad (4.25)$$

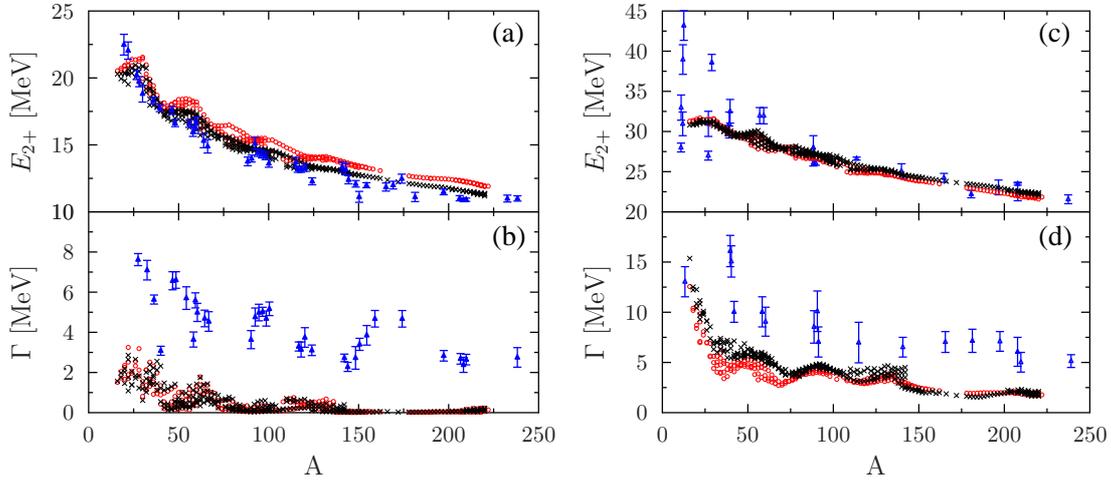


FIG. 4.12 – Énergie du pic principal isoscalaire (a) et isovecteur (c) et largeur associée au pic principal isoscalaire (b) et isovecteur (d) en fonction de la masse. Les résultats obtenus avec les fonctionnelles SkM* (croix noires) et SLy4 (cercles rouges) sont comparés aux données expérimentales (triangles bleus) des références [96, 103, 106].

Le pic principal est ainsi caractérisé par son énergie moyenne $\bar{E} = m_1/m_0$, et son écart type $\sigma = \sqrt{m_2/m_0 - (m_1/m_0)^2}$. Mais nous avons trouvé que cette méthode était trop dépendante

4.3. Étude systématique des résonances géantes quadrupolaires pour les noyaux sphériques

des bornes d'intégration des moments et ne permettait pas de s'affranchir complètement de l'influence de Γ_0 .

Les résultats de l'ajustement de la formule (4.24) sur tous les spectres des noyaux sphériques sont présentés sur la figure 4.12 et sont comparés aux données expérimentales. Cette figure montre que la théorie TDHF+BCS reproduit bien l'énergie moyenne et la dépendance en masse de la résonance isoscalaire et isovecteur. On remarque que l'énergie moyenne prédite par la fonctionnelle SkM* est plus proche des données expérimentales notamment pour la résonance isoscalaire où les résultats expérimentaux sont plus nombreux et plus précis. Il est donc possible de contraindre les interactions effectives avec les résonances géantes. Néanmoins, il faut prendre avec précaution la comparaison avec l'expérience puisque les techniques utilisées pour obtenir l'énergie moyenne peuvent différer de celles utilisées ici.

La figure 4.12 montre également que la théorie TDHF+BCS ne reproduit pas correctement la largeur des résonances quadrupolaires. Ceci n'est pas surprenant puisque, de la même façon, la QRPA possède aussi des largeurs trop petite. En effet, les largeurs des résonances dépendent directement des effets à deux corps. Notamment le couplage de la résonance à des degrés de liberté internes complexes comme le couplage aux états de deux particules deux trous induit par les collisions entre nucléons [45] et les couplages aux modes collectifs de basse énergie [107, 108, 109, 82]. De façon à décrire correctement la largeur des résonances géantes, il serait nécessaire d'aller au delà de TDHF+BCS et d'utiliser par exemple la théorie TDDM.

Il faut noter tout de même qu'une grande partie de la largeur de la résonance isovecteur est reproduite. Ce qui signifie que pour la résonance isovecteur quadrupolaire, approximativement la moitié de la largeur physique est due à la fragmentation intrinsèque de la résonance.

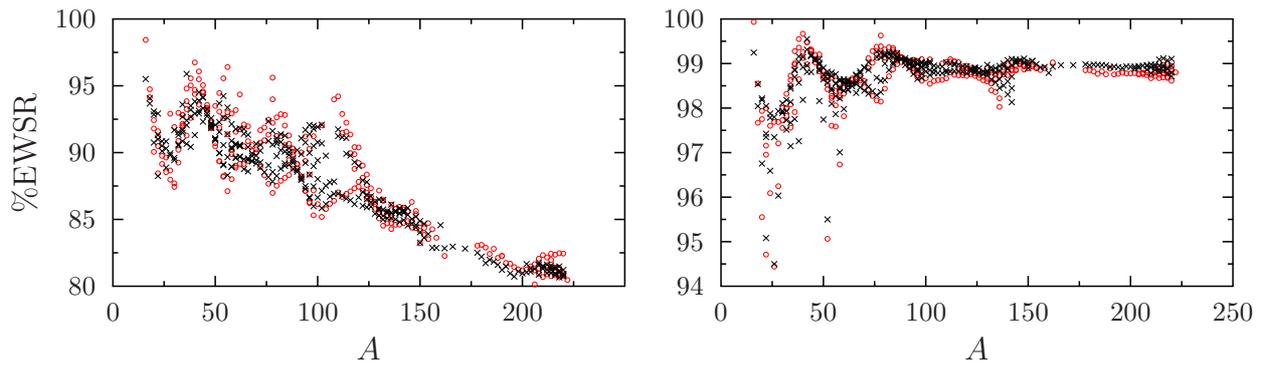


FIG. 4.13 – Pourcentage de la règle de somme pondérée par l'énergie de la réponse isoscalaire (figure de gauche) et isovecteur (figure de droite) au dessus de 7,5 MeV. Les calculs sont effectués avec SLy4 (cercles rouges) et SkM* (croix noires).

Il est intéressant de mentionner que la répartition de la règle de somme pondérée entre la partie basse énergie et haute énergie ($>7,5$ MeV) est différente pour la réponse isovecteur et pour la réponse isoscalaire. En effet, la figure 4.13 montre que (i) la répartition est indépendante

de la fonctionnelle utilisée (ii) la répartition est influencée par les effets de couche (pour $A < 150$) (iii) le pourcentage de la réponse isoscalaire à basse énergie augmente avec la masse alors qu'elle est constante pour la réponse isovecteur.

Évolution moyenne de l'énergie sur la carte des noyaux

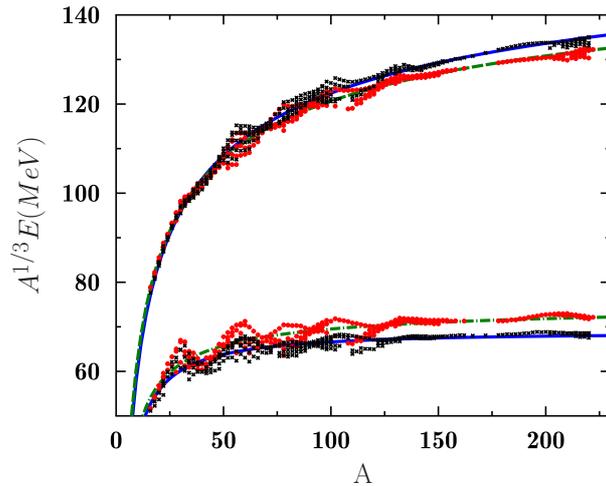
Dans la littérature, l'énergie du pic principal est supposée avoir un comportement en $A^{-1/3}$ [80] :

$$E_{2+}^{IS} \simeq 64A^{-1/3}, \quad (4.26)$$

$$E_{2+}^{IV} \simeq 130A^{-1/3}. \quad (4.27)$$

Ce comportement est prédit par les modèles macroscopique qui négligent les effets de surface. On peut voir sur la figure 4.14 que les pics principaux, due aux effets de surface ont un comportement plus complexe en fonction de la masse.

FIG. 4.14 – Évolution de la quantité $A^{1/3}E_{2+}$ en fonction de la masse pour les résonances isoscalaires (en bas) et isovecteurs (en haut). La fonction (4.28) ajustée sur les points obtenues avec SLy4 (cercles rouges) et SkM* (croix noires) est tracée respectivement avec des tirets verts et une ligne continue bleue.



Pour caractériser de façon plus précise le comportement du pic principal en fonction de la masse, une fonction polynomiale en $A^{-1/3}$:

$$\overline{E_{2+}}(A) = a_1A^{-1/3} + a_2A^{-2/3} + a_3A^{-1} + \dots \quad (4.28)$$

a été ajustée sur l'énergie moyenne isoscalaire et isovecteur. Le tableau 4.1 présente les paramètres obtenues pour la fonctionnelle SkM*, SLy4 et pour les points expérimentaux.

La déviation avec les formule simples (4.27) peut s'expliquer en partie par les effets de surface qui modifient la valeur du rayon carré moyen, comme on peut le voir sur la figure 3.4, le rayon moyen ne varie pas comme $r_0A^{1/3}$. En plus de cette déviation, on remarque une dispersion autour de la dépendance moyenne. Cette fluctuation locale est causée par les effets de couche.

4.3. Étude systématique des résonances géantes quadrupolaires pour les noyaux sphériques

	a_1 [MeV]	a_2 [MeV]	a_3 [MeV]
IS - SkM*	65,03	52,93	-211,67
IS - SLy4	75,50	3,13	-143,69
IS - exp	72,61	-37,45	0,002
IV - SkM*	177	-255,38	10,05
IV - SLy4	169,36	-223,16	-13,06
IV - exp	165,19	-182,09	-37,24

TAB. 4.1 – Paramètres déduits par l’ajustement de la fonction (4.28) sur les pics principaux isoscalaires et isovecteurs.

Effets de couche

Pour aller plus loin que le comportement moyen en fonction de la masse, on peut étudier les effets de structure et notamment de fermeture de couche. La figure 4.15 présente systématiquement la déviation entre la courbe moyenne (4.28) et les points obtenus avec TDHF+BCS en utilisant l’interaction SLy4. Cette déviation est définie comme $\Delta E = E_{2^+}(N, Z) - \bar{E}_{2^+}(A)$. On observe sur cette figure des oscillations d’une amplitude pouvant atteindre 1 MeV indépendamment de la fonctionnelle utilisée et du type de résonance (isoscalaire ou isovecteur). Comme on peut s’y attendre, on obtient des maximums pour les nombres magiques (N ou Z=28, 50 et 82) puisque les noyaux magiques ou semi-magiques possèdent un gap dans le spectre de leurs niveaux à un corps. Les résonances géantes étant construites avec des excitations particules-trous, il faut plus d’énergie pour exciter un noyau magique. En parallèle, on observe aussi des minimums qui correspondent systématiquement aux nombres magiques sans spin-orbite (N ou Z=20, 40 et 70).

On peut comprendre de façon simple cet effet, l’opérateur d’excitation quadrupolaire ayant une parité positive, les différentes excitations particule-trou doivent être effectuées entre états de même parité comme illustré sur la figure 4.16. Les états de basse énergie sont donc constitués d’excitations avec $\Delta N=0$ et le pic principal d’excitation avec $\Delta N=2$, N étant le nombre quantique principal associé à l’oscillateur harmonique.

Lorsqu’on termine de remplir un ensemble de couches de même parité, la couche de même parité d’énergie supérieure est alors au plus proche de l’énergie de Fermi. En revanche, lorsque l’on remplit une couche correspondant à un nombre magique, c’est-à-dire, avec un gap au dessus, l’énergie nécessaire pour atteindre la couche de même parité avec $\Delta N=2$ est plus importante. Cet effet explique donc les oscillations de la figure 4.15 entre les fermetures de couches correspondant à des nombres magiques avec spin-orbite et les fermetures de couches correspondant à des nombres magiques sans l’interaction spin-orbite.

Il faut noter que cette explication simple n’est strictement valable qu’avec un remplissage des

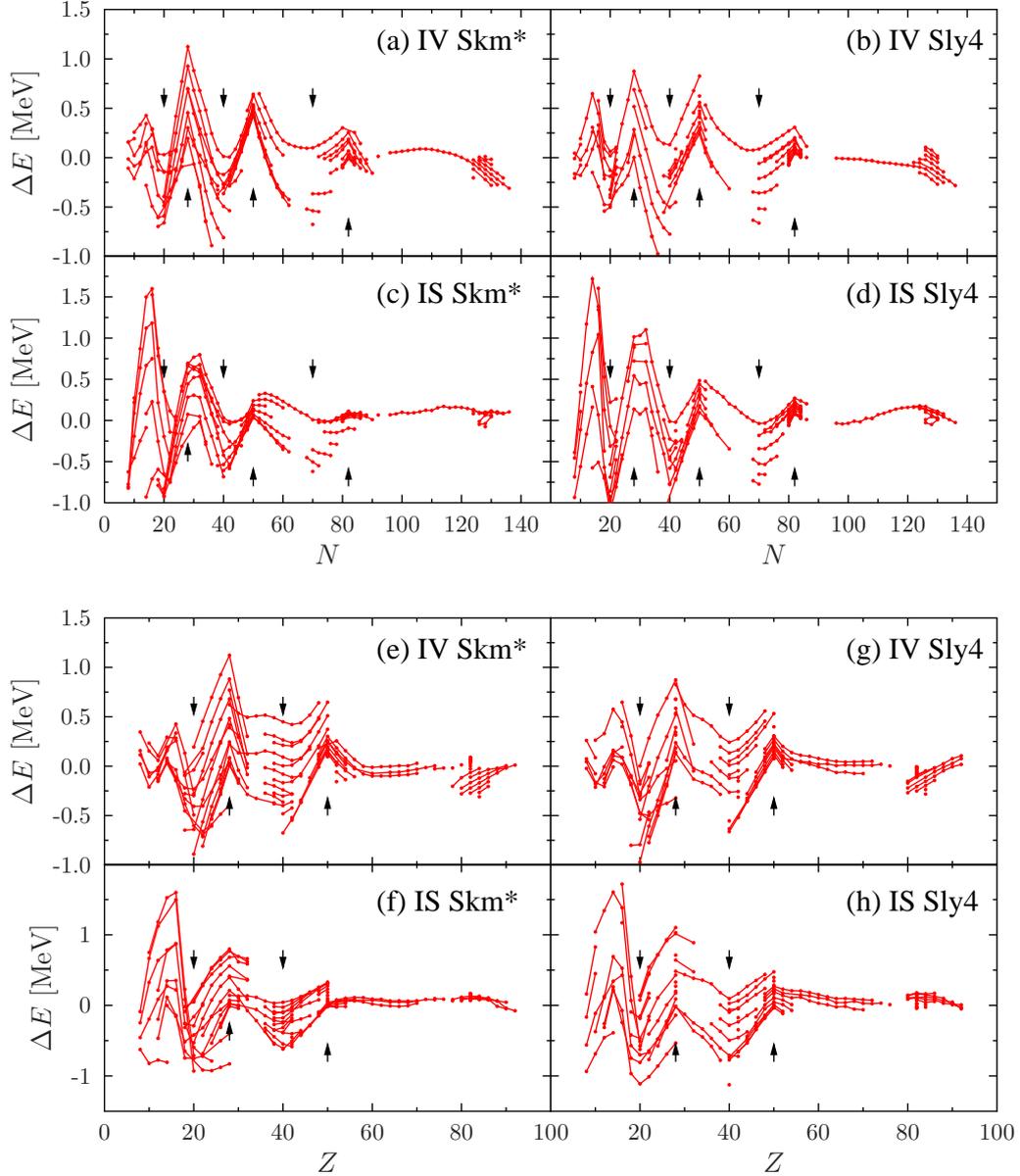


FIG. 4.15 – Fluctuation de l'énergie du pic principal ΔE pour les résonances géantes isoscalaires (figures (c) et (d)) et isovecteurs (figures (a) et (b)) en fonction du nombre de neutrons N . Les calculs sont effectués en utilisant la fonctionnelle Skm* (figures (a) et (c)) et Sly4 (figures (b) et (d)). Les flèches vers le haut indiquent les nombres magiques avec interaction spin-orbite ($N=28, 50, 82$) et les flèches vers le bas correspondent aux nombres magiques de l'oscillateur harmonique sans spin-orbite ($N=20, 40, 70$). Les figures (e) à (h) reprennent les mêmes résultats en fonction de la charge Z .

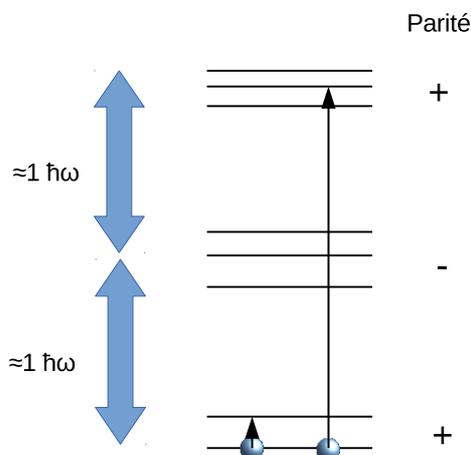


FIG. 4.16 – Illustration des effets de structure. Due à la parité de l'excitation quadrupolaire (+), les excitations ne peuvent s'effectuer qu'entre niveaux possédant la même parité et donc correspondent en première approximation à des énergies de $2\hbar\omega$ tandis que les résonances géantes dipolaires (de parité négative) ont des énergies de l'ordre de $\hbar\omega$. Il est à noter toutefois que c'est une approche très naïve, l'interaction résiduelle venant modifier cette vision schématique.

couches avec la théorie Hartree-Fock où les états sont soit occupés soit vides. Néanmoins, il semble qu'une signature résiduelle de la parité persiste dans un cas plus général. Nous allons donc maintenant regarder l'effet de l'appariement sur le pic principal.

Effet général de l'appariement

Nous avons vu au chapitre 2 que l'un des principaux effets de l'appariement est la fragmentation des nombres d'occupation autour de l'énergie de Fermi. C'est-à-dire, que les niveaux au dessus de l'énergie de Fermi sont partiellement occupés et les états en dessous de l'énergie de Fermi partiellement dépeuplés. De plus, l'appariement influence avant tout l'état initial, notamment la forme du noyau. En effet, lorsque les nombres d'occupation doivent être déterminés, dans un noyau à couches ouvertes, avec des niveaux dégénérés, un choix arbitraire d'orbitales occupées est effectué dans la couche la plus proche de l'énergie de Fermi. Ce remplissage de couche brise la symétrie sphérique et le noyau obtenu par ce processus est donc le plus souvent déformé.

De façon à imposer la symétrie sphérique dans ce cas, on utilise ici la théorie d'occupation moyenne qui consiste à répartir les occupations entre tous les états dégénérés. C'est-à-dire, pour répartir n nucléons sur un niveau dégénéré Ω fois, on fixe pour chaque niveau une occupation égale à n/Ω . Ainsi la convergence vers un noyau sphérique est possible. Puis l'évolution est effectuée de la même manière que TDHF en gardant ces nombres d'occupation constants. Une illustration schématique des différents modes de remplissage est présentée sur la figure 4.17.

La figure 4.18 compare les différentes théories avec et sans appariement pour une chaîne isotopique représentative. Pour les nombres magiques $N=50$ et 82 , il n'y a pas d'appariement et les trois théories donnent les mêmes résultats. En revanche pour les autres noyaux, l'appariement modifie les nombres d'occupation avec une fragmentation mesurée à l'aide de la quantité $\sum_i n_i(1 - n_i)$ qui suit une courbe en cloche entre les nombres magiques. Plus cette fragmen-

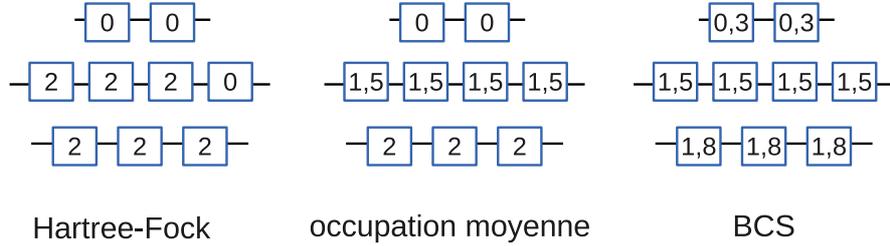
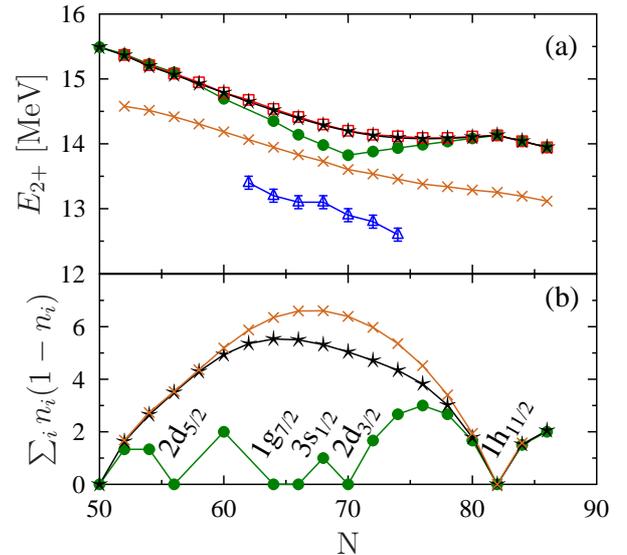


FIG. 4.17 – Illustration des différentes théories de remplissage des couches (voir texte). L'exemple donné ici est un remplissage de trois niveaux dégénérés 6, 8 et 4 fois par un ensemble de 12 particules (chaque case pouvant être occupée par deux particules ayant des spins différents).

tation augmente, plus l'écart entre la théorie sans appariement (occupation moyenne) et les théories avec appariement (TDHF+BCS et FOA) est important.

FIG. 4.18 – (a) Évolution de l'énergie du pic isoscalaire le long de la chaîne isotopique de l'étain. (b) Fragmentation des nombres d'occupation $\sum_i n_i(t=0)(1 - n_i(t=0))$. Ces quantités sont présentées pour les théories TDHF+BCS (carrés rouges), FOA (étoiles noires) et TDHF avec l'approximation d'occupation moyenne (cercles verts). Ces calculs étant effectué avec la théorie SLy4. Les résultats avec TDHF+BCS en utilisant la fonctionnelle SkM* sont aussi présentés avec des croix oranges. Sur la figure (a), les valeurs expérimentales [97] (triangles bleus) sont présentées.



On peut remarquer que l'effet de structure décrit précédemment est particulièrement prononcé pour la théorie sans appariement. En effet, il y a une transition très forte lors du passage du nombre $N=70$ qui correspond au changement de parité entre les états pairs (s,d,g) et l'état impair $1h_{11/2}$. Cet effet est fortement réduit avec les théories où l'état initial est un état BCS puisque la fragmentation autour de l'énergie de Fermi permet de lisser la transition entre les états individuels de parité positive et négative. Ce lissage des effets de couche est d'autant plus important avec la fonctionnelle SkM* puisque les nombres d'occupation sont plus fragmentés.

Expérimentalement, il est difficile de confirmer ces effets de structures. En effet, les incertitudes expérimentales sont de l'ordre de grandeur du phénomène étudié.

4.3.4 Détermination de l'énergie de symétrie

L'un des objectifs de l'étude des résonances géantes est de fournir des informations sur les propriétés globales des noyaux et de contraindre l'équation d'état de la matière nucléaire. Il a été montré récemment qu'à partir des énergies des résonances géantes isoscalaires et isovecteurs, il est possible d'accéder à des informations sur l'énergie de symétrie [81].

L'énergie de symétrie dans la matière nucléaire infinie est définie comme le facteur $S(\rho)$ de l'équation d'état de la matière nucléaire infinie selon la formule :

$$E(\rho_n, \rho_p) = E_0(\rho) + S(\rho) \left(\frac{\rho_n - \rho_p}{\rho} \right)^2 + \dots \quad (4.29)$$

où ρ_n , ρ_p et ρ correspondent respectivement à la densité de neutrons, proton et totale. Cette énergie de symétrie est peu connue, de nombreuses expériences diverses essaient d'accéder à sa dépendance en densité. Notamment la pente L à la densité de saturation définie par,

$$L = 3\rho \frac{\partial S(\rho)}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_0}. \quad (4.30)$$

Les différentes mesures expérimentales sont présentées sur la figure 4.19 [110].

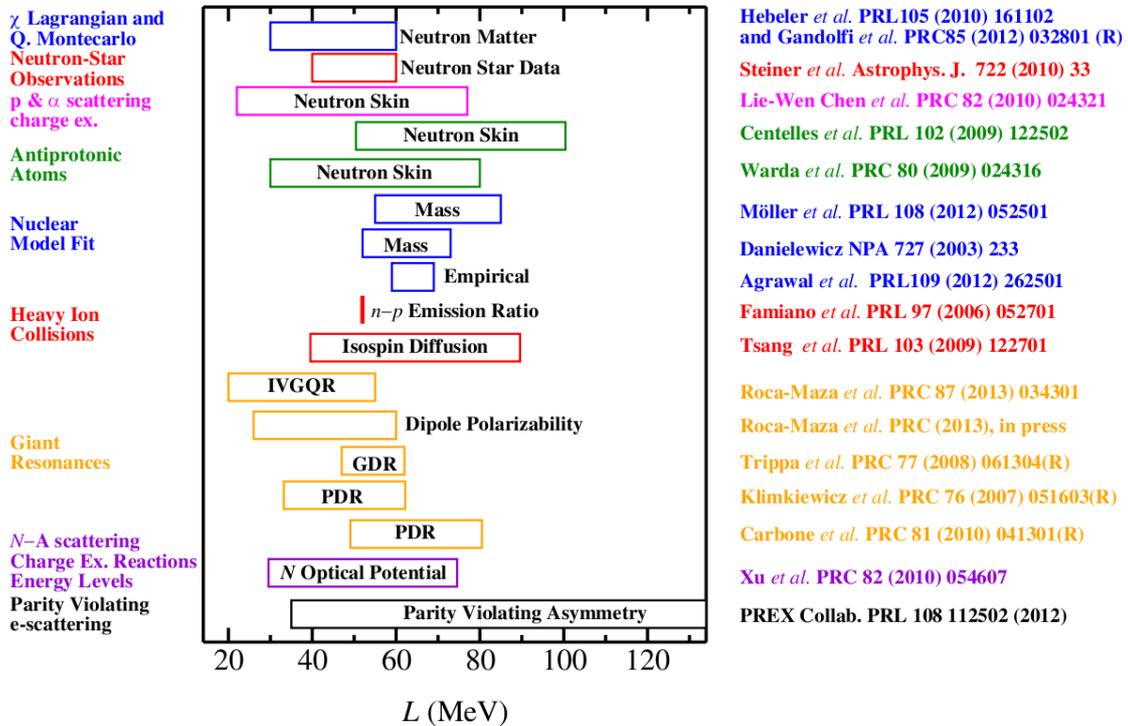


FIG. 4.19 – Mesures expérimentales du paramètre L . Extrait de [110].

Dans une vision simplifiée, l'énergie de symétrie peut être reliée aux énergies des pics principaux isoscalaires et isovecteurs à l'aide d'un modèle macroscopique [81],

$$S(A) \simeq \frac{\varepsilon_F^\infty}{3} \left\{ \frac{A^{2/3}}{8(\varepsilon_F^\infty)^2} [(E_{2^+}^{IV})^2 - 2(E_{2^+}^{IS})^2] + 1 \right\}, \quad (4.31)$$

avec ε_F^∞ l'énergie de Fermi de la matière nucléaire infinie à densité de saturation ($\simeq 37$ MeV).

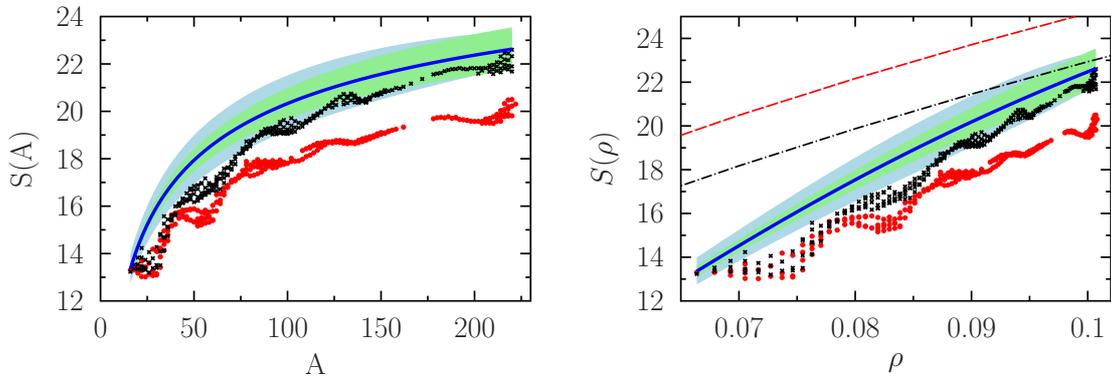


FIG. 4.20 – Figure de gauche : énergie de symétrie calculée à partir de la formule (4.31) en fonction de la masse pour la fonctionnelle SLy4 (points rouges), pour SkM* (croix noires) et à partir de la fonction (4.28) ajustée sur les points expérimentaux (ligne continue). La zone colorée en bleue correspond à l'incertitude en ne tenant compte que de l'incertitude sur la valeur du pic isovecteur et la zone en vert en réduisant les barres d'erreurs isovecteurs à une valeur de 0,5 MeV. Sur la figure de droite, les mêmes points sont tracés en fonction de la densité calculée avec la formule (4.32) et sont comparés à l'énergie de symétrie des fonctionnelles SLy4 (tirets rouges) et SkM* (pointillés noirs).

L'énergie de symétrie ainsi obtenue est tracée sur la figure 4.20 en fonction de la masse où l'on voit que la fonctionnelle SkM* est compatible avec les données expérimentales. Pour faire le lien entre nos calculs effectués pour des noyaux de taille finie, et la matière nucléaire infinie, il a été proposé d'assigner pour chaque noyau, une densité moyenne avec la formule [111] :

$$\rho = \rho_0 - \rho_0 / (1 + cA^{1/3}), \quad (4.32)$$

avec la densité de saturation $\rho_0 = 0,16 \text{ fm}^{-3}$ et la constante $c = 0,28$. Les points ainsi obtenus sont tracés sur la partie droite de la figure 4.20. Pour vérifier la validité de ces calculs, l'énergie de symétrie calculée dans la matière nucléaire infinie directement à partir des fonctionnelles SLy4

et SkM* est aussi tracée. Cette énergie de symétrie est calculée avec la formule [112] :

$$S(\rho) = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \rho^{2/3} - \frac{1}{8} t_0 (2x_0 + 1) \rho - \frac{1}{48} t_3 (2x_3 + 1) \rho^{\sigma+1} + \frac{1}{24} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} [-3t_1 x_1 + (4 + 5x_2) t_2] \rho^{5/3}. \quad (4.33)$$

L'énergie de symétrie extraite des résonances géantes quadrupolaires est systématiquement plus faible que celle calculée avec cette formule. De fortes différences apparaissent entre les deux façons de calculer l'énergie de symétrie ainsi qu'une forte dépendance dans l'interaction effective utilisée dans le champ moyen.

Cette étude de l'énergie de symétrie, bien que n'étant pas le sujet principal de ce chapitre, montre qu'une formule macroscopique bien que simple, ne permet pas une compréhension fine de $S(\rho)$. En particulier de nombreuses incertitudes existent sur l'attribution d'une densité ρ unique au noyau.

4.4 Effets de la déformation sur les résonances géantes quadrupolaires

Contrairement aux noyaux sphériques, pour les noyaux déformés, les fonctions de réponse quadrupolaires sont différentes selon le nombre quantique K . Les expressions des différents opérateurs quadrupolaires utilisés ici sont données en annexe B. Pour des raisons de simplicité, nous avons choisi d'utiliser les opérateurs d'excitation réels (équations (B.3) à (B.7)).

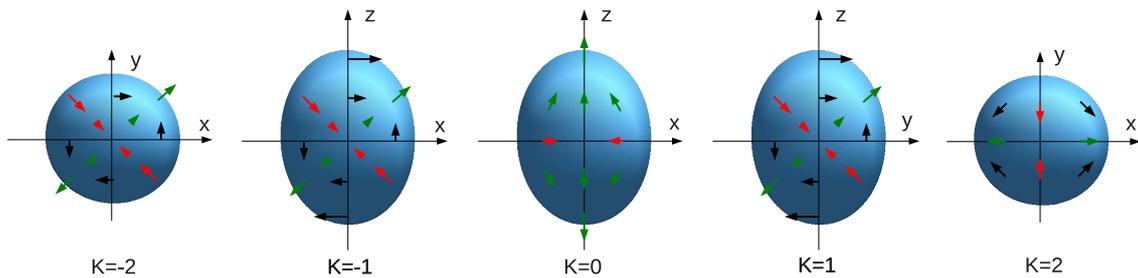


FIG. 4.21 – Illustration des différents effets des opérateurs d'excitation quadrupolaire. Les flèches de couleur rouge montrent les compressions vers l'intérieur du noyau, les flèches vertes montre les dilatations (vers l'extérieur du noyau) et les flèches noires les mouvements de rotation exercés par l'excitation initiale.

Il est possible de décrire de façon simple l'effet de l'excitation initiale. En effet, le boost

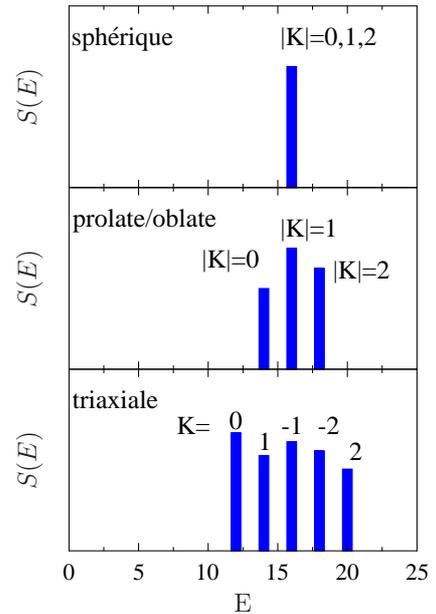
initial consiste à donner une impulsion aux particules. On montre de façon simple que,

$$\langle \Psi(t=0) | \hat{p} | \Psi(t=0) \rangle = \hbar \eta \vec{\nabla} Q(\mathbf{r}). \quad (4.34)$$

Le vecteur $\vec{\nabla} Q(\mathbf{r})$ est illustré sur la figure 4.21 pour tous les opérateurs d'excitation quadrupolaire. Le sens physique de la résonance quadrupolaire apparaît donc simplement : lors de l'évolution, la densité est compressée selon un axe et dilatée selon un autre. Il est possible de montrer que pour un noyau sphérique, les fonctions de réponse pour les différents K sont identiques. De même pour les noyaux possédant un axe de symétrie, ici, l'axe \vec{z} , les opérateurs possédant la même valeur de $|K|$ donneront des réponses identiques.

On peut comprendre ces symétries de façon simple, par exemple, pour un noyau déformé selon un axe de symétrie comme sur l'illustration 4.21, une rotation de $\pi/2$ selon l'axe \vec{z} laisse invariant le noyau et transforme l'opérateur $d_{yz}^{K=1}$ en $d_{xz}^{K=-1}$. De même une rotation de $\pi/4$ transforme l'opérateur $d_{x^2-y^2}^{K=2}$ en $d_{xy}^{K=-2}$. Si aucune symétrie n'existe alors chaque réponse est différente comme illustré sur la figure 4.22.

FIG. 4.22 – Fragmentation de la réponse quadrupolaire en fonction des symétries. Pour les noyaux sphériques chaque composante en K est dégénérée. Pour les déformations conservant un axe de symétrie, les composantes K et $-K$ restent dégénérées. En revanche, pour les noyaux ne possédant aucun axe de symétrie, chaque composante en K possède une énergie propre.



On peut remarquer sur la figure 4.21 que pour les noyaux déformés, l'excitation $|K|=1$ provoque un mouvement de rotation. Celui-ci n'est pas physique puisque le noyau doit être étudié dans son repère intrinsèque.

4.4.1 Correction de la rotation non physique pour $|K|=1$

Le problème de la rotation du mode $|K|=1$ a déjà été mis en évidence dans plusieurs articles [113, 114]. En effet, lorsque les opérateurs $d_{yz}^{K=1}$ ou $d_{xz}^{K=-1}$ sont appliqués à un noyau déformé,

il en résulte une rotation globale de celui-ci. Cette rotation provoque un mode non physique de basse énergie directement dépendant de la force de l'excitation. Une méthode simple pour les approches dynamiques est proposée ici de façon à supprimer ce mode non-physique.

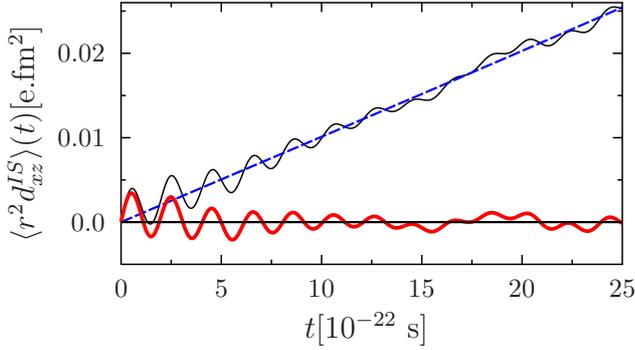


FIG. 4.23 – Évolution de la quantité $\langle r^2 d_{xz}^{I_S} \rangle$ pour le ^{24}Mg après une excitation avec l'opérateur $K=1$ (ligne fine noire). Le polynôme (4.35) ajusté sur cette courbe est tracé avec des tirets bleus et la ligne épaisse rouge correspond à la réponse corrigée de la rotation $[\langle r^2 d_{xz}^{I_S} \rangle - P(t)]$.

L'effet de la rotation sur la réponse en temps est présenté sur la figure 4.23. La rotation provoque une augmentation lente de la valeur moyenne $\langle r^2 d_{xz} \rangle$. Après la transformée de Fourier, cette augmentation induit un pic de basse énergie et de grande amplitude comme on peut le voir sur la figure 4.24.

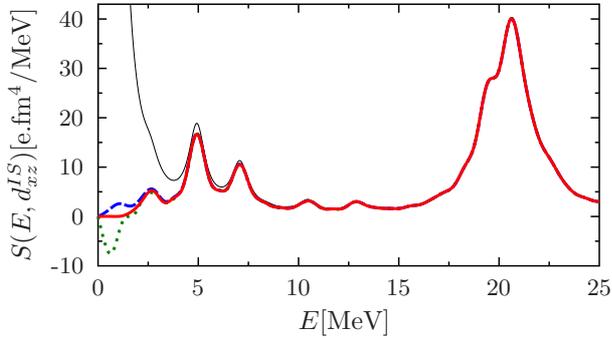


FIG. 4.24 – Fonction de réponse associée à l'excitation quadrupolaire $K=1$ sans correction (ligne fine noire) avec un correction en utilisant un polynôme d'ordre un (pointillés verts), d'ordre deux (tirets bleus) et d'ordre trois (ligne continue rouge). Il faut noter que pour obtenir un spectre convergé dans le cas sans la correction, l'évolution a été effectuée jusqu'à un temps de 900×10^{-22} s.

De façon à supprimer ce pic non-physique dans la fonction de réponse, on ajuste la fonction polynomiale suivante,

$$P(t) = a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + \dots \quad (4.35)$$

à la réponse en temps $\langle r^2 d_{xz} \rangle(t)$. Cette fonction est ensuite soustraite à la réponse en temps, puis la transformée de Fourier est effectuée. Cette méthode est équivalente à se placer au cours du temps dans le repère intrinsèque du noyau. Le résultat après correction est présenté sur la figure 4.24, où l'on voit que le pic non-physique a disparu. On voit toutefois qu'une correction n'est obtenue qu'à partir d'un polynôme d'ordre 3. Dans la suite de ce travail, c'est ce type de polynôme qui sera retenu. Il faut noter que cette correction doit aussi être effectuée pour les excitations avec $|K|=2$ dans le cas des noyaux triaxiaux. En revanche, elle n'est pas nécessaire

pour les résonances isovecteurs, puisque la rotation des neutrons est compensée exactement par la rotation des protons. La réponse totale ne possède donc pas de composantes rotationnelles.

4.4.2 Noyaux possédant un axe de symétrie

Pour les noyaux possédant un axe de symétrie, c'est-à-dire, les noyaux déformés de façon prolata ou oblate, il y a une levée de dégénérescence entre les différents pics possédant des valeurs différentes de $|K|$ (voir figure schématique 4.22). Cette décomposition du pic principal en trois est illustrée sur la figure 4.25 pour les résonances isoscalaires et isovecteurs. Il doit

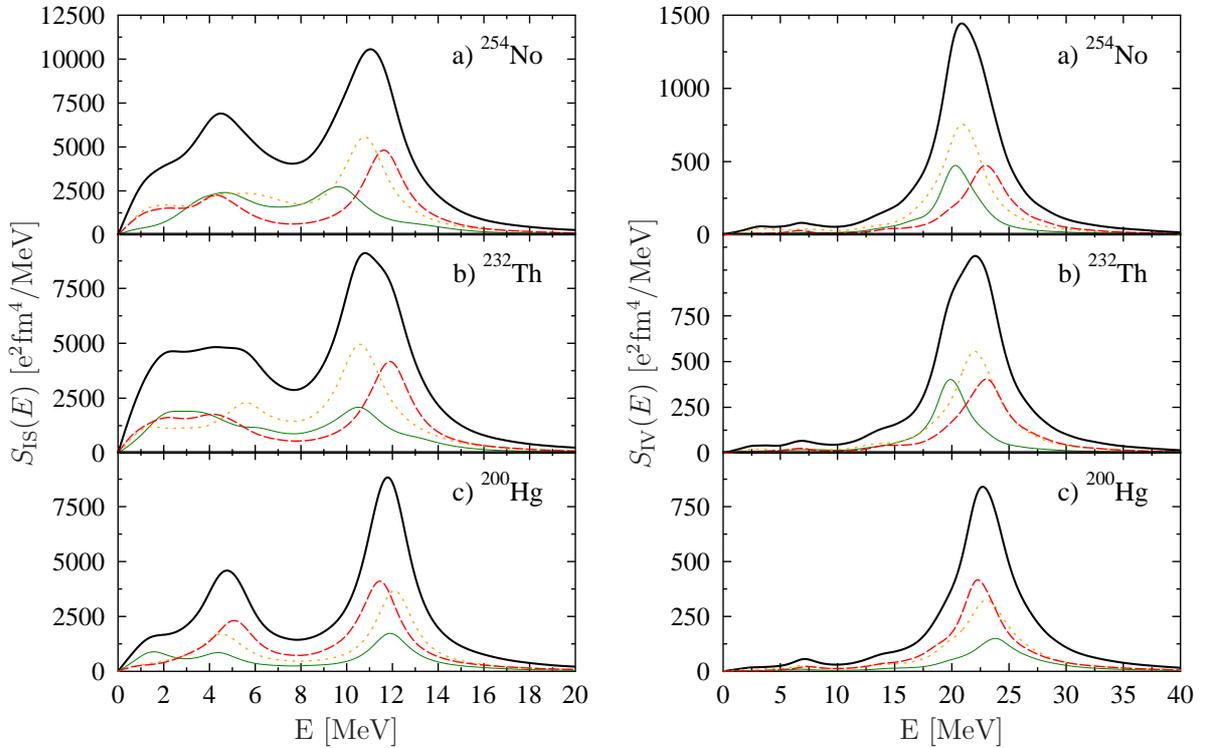


FIG. 4.25 – Illustration de la levée de dégénérescence des différents $|K|$ pour les fonctions de réponse isoscalaires (figures de gauche) et isovecteurs (figures de droite). Trois cas sont présentés, les noyaux prolates (a) ^{254}No et (b) ^{232}Th ainsi que le (c) ^{200}Hg déformé de façon oblate. Pour chacun des cas, les réponses pour $K=0$ (ligne fine verte), $|K|=1$ (pointillés jaunes) et $|K|=2$ (tirets rouges) sont présentées ainsi que la réponse totale $S(E) = \sum_{k=-2}^2 S_k(E)$ (ligne noire). Pour chacun des calculs, un facteur d'amortissement de 1 MeV a été utilisé.

être noté que la seule observable physique est la somme de toutes les contributions. En effet, les résultats de chacune des composantes K dépendent de l'orientation physique du noyau. Ici, nous avons choisi de prendre comme axe de symétrie du noyau l'axe \vec{z} .

De la même manière que pour le cas sphérique (figure 4.9), les règles de somme isoscalaires (équations (B.14) à (B.14)) et isovecteurs (équations (B.21) à (B.21)) sont respectées avec une erreur maximum de 0,5 %. Néanmoins pour obtenir cette précision, il est nécessaire d’avoir une très bonne convergence des équations auto-consistantes Hartree-Fock et BCS de l’état initial. Pour sept noyaux (^{50}Cr , ^{92}Kr , ^{120}P , ^{102}Ru , ^{218}U , ^{232}U , ^{238}Pu), il n’a pas été possible d’obtenir une convergence suffisante. Pour les noyaux ^{218}U , ^{232}U et ^{238}Pu , durant la convergence de EV8, un état individuel a oscillé autour de l’énergie de coupure à 0 MeV, ce qui a entraîné un problème de convergence. Pour les autres noyaux, plusieurs solutions des équations HF+BCS sont numériquement dégénérées ce qui crée des oscillations entre ces solutions. Ces noyaux ne seront donc pas pris en compte durant cette étude.

Propriétés moyennes le long de la carte des noyaux

De la même manière que dans le cas sphérique, pour chaque $|K|$, l’énergie collective a été déterminée par une procédure d’ajustement (voir section 4.3.3). Sur la figure 4.26, la valeur moyenne de l’énergie,

$$\overline{E_{2+}} = \frac{1}{5} \left(E[d_{z^2}^{K=0}] + E[d_{xy}^{|K|=2}] + E[d_{xz}^{|K|=1}] + E[d_{yz}^{|K|=1}] + E[d_{x^2-y^2}^{|K|=2}] \right), \quad (4.36)$$

est tracée en fonction de la masse. Cette figure montre que la déformation ne modifie pas les positions moyennes des pics isoscalaires et isovecteurs. En effet, tous les points sont sur les courbes moyennes qui ont été obtenues pour des noyaux sphériques. Les calculs étant plus long pour les noyaux déformés et la force SLy4 étant moins prédictive pour la GQR, nous avons décidé de ne tester qu’une seule fonctionnelle SkM*.

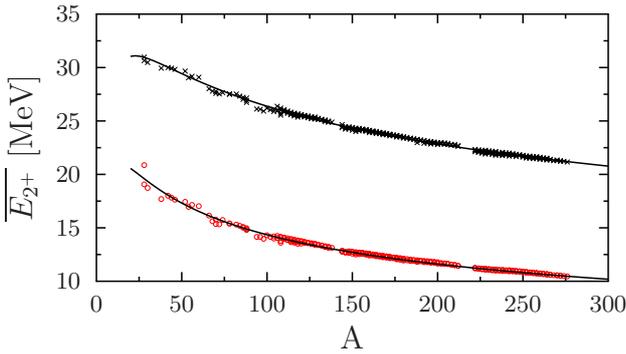


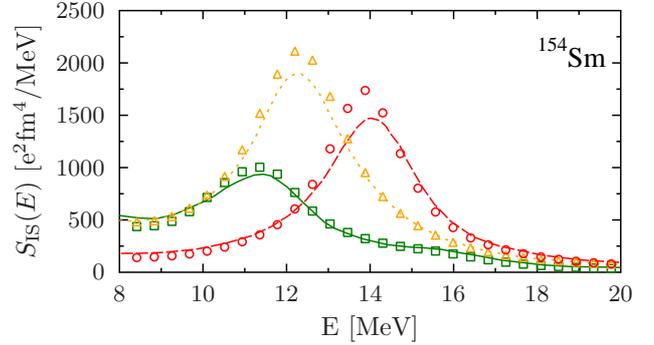
FIG. 4.26 – Valeur moyenne du pic principal isoscalaire (cercle rouges) et isovecteur (croix noires) en fonction de la masse A . Les deux lignes correspondent à la fonction (4.28) ajustée sur les noyaux sphériques.

De façon à valider notre méthode de correction du pic non physique due à la rotation, les résultats obtenus avec TDHF+BCS ont été comparés à ceux de la QRPA.

Comparaison avec la QRPA

Pour cette comparaison, nous avons choisi les résultats de QRPA, implémentés aux cas déformés, les plus récents [115]. Il est à noter que ces calculs sont effectués en utilisant une

FIG. 4.27 – Comparaison entre les calculs TDHF+BCS pour $|K|=0$ (carré verts), $|K|=1$ (triangles jaunes) et $|K|=2$ (cercles rouges) et la QRPA $|K|=0$ (ligne verte), $|K|=1$ (pointillés jaunes) et $|K|=2$ (tirets rouges). Les deux calculs sont présentés avec un facteur d'amortissement de 2 MeV. Les calculs de QRPA sont extraits de [115].



force de SkM* avec toutefois une interaction d'appariement différente de celle utilisée ici. La figure 4.27 compare les spectres TDHF+BCS avec les résultats de QRPA. Un très bon accord est obtenu entre les deux théories, en particulier, l'écart entre les différentes composantes en $|K|$ est bien reproduit. Il est à noter que les calculs de QRPA possèdent une largeur supérieure de 0,5 MeV comparée aux calculs TDHF+BCS. On peut voir sur la figure 4.28 que cela est systématiquement le cas pour les excitations isoscalaire. Cependant pour les excitations isovecteurs, les deux calculs donnent des résultats quasi-identiques.

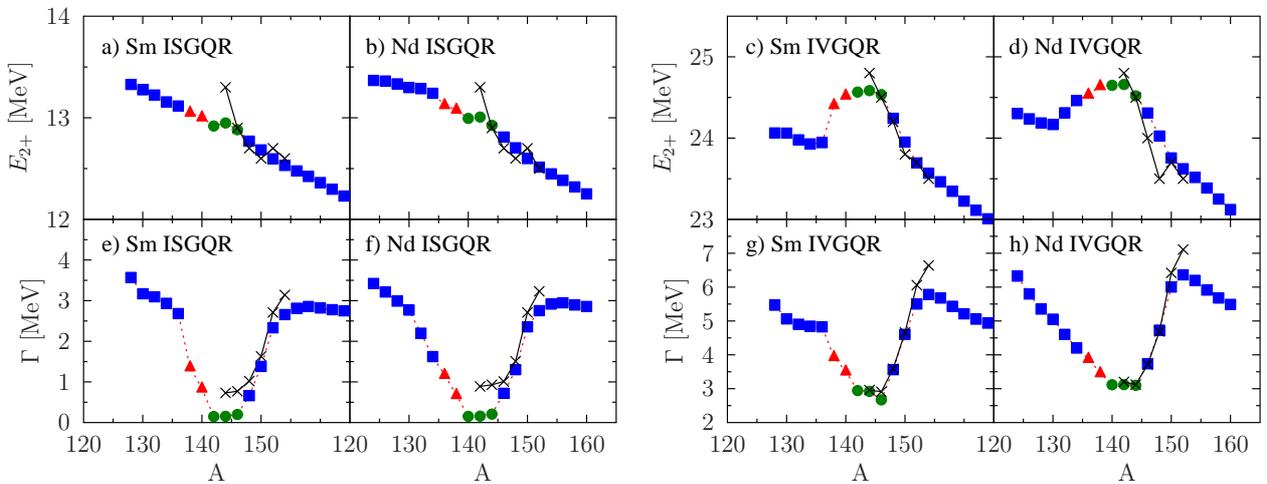


FIG. 4.28 – Figures du haut : Comparaison pour la chaîne isotopique de l'étain et du Néodyme entre les résultats TDHF+BCS (pointillés rouges) et les résultats de QRPA (croix noires) pour la position du pic principal. La géométrie de chaque noyau obtenue avec HF+BCS est indiquée par des symboles : carrés bleus pour les noyaux prolates, triangles rouges pour les triaxiaux et cercles verts pour les noyaux sphériques. Figures du bas : largeur moyenne des résonances isoscalaires et isovecteurs.

La figure 4.28 compare systématiquement les résultats de QRPA et TDHF+BCS pour les chaînes isotopiques de l'étain et du néodyme. Les valeurs de l'énergie et de la largeur ont ici

été obtenues en ajustant une fonction de Lorentz sur les pics principaux des résonances. Dans chacun des cas, un très bon accord est obtenu entre les deux théories pour la valeur de l'énergie moyenne et pour la largeur. On voit toutefois comme il a été mentionné ci-dessus qu'une légère différence systématique de 500 keV existe entre la QRPA et TDHF+BCS. Il doit finalement être mentionné que les calculs les plus élaborés de QRPA permettent de traiter des déformations oblates ou prolates mais sont à l'heure actuelle trop lourds numériquement pour les noyaux triaxiaux. Cette limitation n'existe pas dans les calculs présentés ici.

Cette comparaison avec la QRPA montre encore une fois que l'approximation BCS est une très bonne approximation pour l'étude des résonances géantes. Et que l'essentiel de l'effet de l'appariement sur les résonances géantes provient de l'état initial : déformation et nombres d'occupation.

Fragmentation du pic principal

La fragmentation du pic principal induit par la déformation (voir figure 4.22) est ici étudiée de manière plus quantitative en fonction du paramètre de déformation,

$$\delta = \frac{3\sqrt{\langle Q_{20} \rangle^2 + 3\langle Q_{22} \rangle^2}}{4A\langle r^2 \rangle}. \quad (4.37)$$

Avec les moments quadrupolaires et le rayon carré moyen défini au chapitre précédent (équations (3.28) et (3.29)). Ce paramètre δ peut être relié au paramètre de déformation de surface β_2 (défini dans la partie 3.2.1) [73],

$$\delta \simeq 0,945\beta_2 \left[1 - \frac{4}{3}\pi^2 \left(\frac{a_0}{R_0} \right)^2 \right] + 0,34\beta_2^2. \quad (4.38)$$

Cette formule étant obtenue en supposant une densité de Fermi-Dirac (3.30).

Sur la figure 4.29, la séparation des pics est tracée en fonction du paramètre δ . La déformation induit un certain nombre de modifications physiques. Il y a tout d'abord une levée de dégénérescence en K qui provient de la géométrie spécifique (voir figure 4.22). Comme nous allons voir, cet effet peut être compris comme une modification des masses collectives. Conjointement, un couplage entre modes collectifs de multipolarité différentes apparaît, en particulier avec la résonance géante monopolaire (GMR). Pour comprendre qualitativement l'écart entre les différentes composantes en $|K|$, on peut utiliser un hamiltonien collectif [116],

$$H = \sum_{i,j=1}^6 \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M_{ij}} \frac{\partial^2}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j} + \frac{1}{2} K_{ij} (\alpha_i - \bar{\alpha}_i) (\alpha_j - \bar{\alpha}_j) \right\}, \quad (4.39)$$

avec les variables collectives α_i et leurs valeurs dans l'état fondamental $\bar{\alpha}_i$.

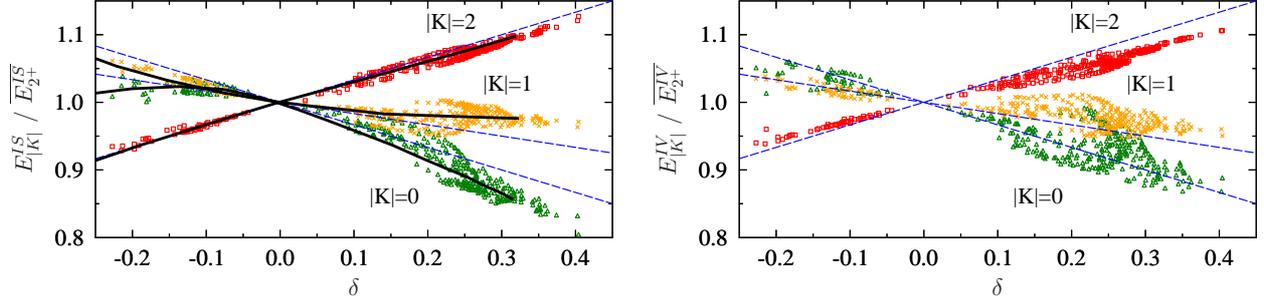


FIG. 4.29 – Énergies de chacune des composantes en $|K|$ en fonction du paramètre de déformation δ pour les excitations isoscalaires (figures de gauche) et isovecteurs (figures de droite). Les lignes en pointillés bleus correspondent au modèle simple (équations (4.44) à (4.46)) et les lignes continues au modèle hydrodynamique [113].

Dans notre étude, nous allons nous restreindre aux degrés de liberté monopolaire et quadrupolaire, avec la convention, α_η pour le degré de liberté monopolaire, et $\alpha_{K=-2,\dots,2}$ pour les degrés de liberté quadrupolaire. Avec la correspondance :

$$\alpha_0 \leftrightarrow d_{z^2}^{K=0}, \quad \alpha_{-1} \leftrightarrow d_{xz}^{|K|=1}, \quad \alpha_{+1} \leftrightarrow d_{yz}^{|K|=1}, \quad \alpha_{-2} \leftrightarrow d_{xy}^{|K|=2}, \quad \alpha_{+2} \leftrightarrow d_{x^2-y^2}^{|K|=2}. \quad (4.40)$$

Dans un premier temps, nous allons supposer que les tenseurs des masses M_{ij} et des forces de rappel K_{ij} sont diagonaux. C'est-à-dire, qu'il n'y a pas de couplage entre les différents modes. Les masses peuvent être reliées aux expressions des règles de somme [116],

$$M_{ij} = \frac{m}{4} \langle \nabla d_i \nabla d_j \rangle = \frac{m^2}{2\hbar^2} m_1^{d_i d_j}. \quad (4.41)$$

Si on néglige les parties hors diagonale, on obtient donc les masses à partir des règles de somme B.2,

$$\begin{cases} M_\eta = mA \langle r^2 \rangle \\ M_0 = m(2A \langle r^2 \rangle + \langle Q_{20} \rangle) \\ M_{-1} = \frac{1}{2}m(4A \langle r^2 \rangle + \langle Q_{20} \rangle + 3\langle Q_{22} \rangle) \\ M_{+1} = \frac{1}{2}m(4A \langle r^2 \rangle + \langle Q_{20} \rangle - 3\langle Q_{22} \rangle) \\ M_{-2} = m(2A \langle r^2 \rangle - \langle Q_{20} \rangle) \\ M_{+2} = m(2A \langle r^2 \rangle - \langle Q_{20} \rangle) \end{cases}. \quad (4.42)$$

En utilisant l'expression de δ , on obtient des expressions simples des masses en fonction de δ . En particulier les masses pour $K=0$, $|K|=1$ et $|K|=2$ sont différentes. Si on néglige le couplage entre modes dans l'hamiltonien (4.39), on obtient directement une expression de l'énergie collective d'excitation,

$$E_i = \hbar \sqrt{\frac{K_i}{M_i}}. \quad (4.43)$$

4.4. Effets de la déformation sur les résonances géantes quadrupolaires

En supposant que les constantes de couplage K_i sont indépendantes de la masse et de K et en reportant les expressions (4.42), on obtient des expressions simples des énergies des pics au premier ordre en fonction de la déformation :

$$\frac{E_{|K|=0}}{E_{2+}} = 1 - \frac{1}{3}\delta, \quad (4.44)$$

$$\frac{E_{|K|=1}}{E_{2+}} = 1 - \frac{1}{6}\delta, \quad (4.45)$$

$$\frac{E_{|K|=2}}{E_{2+}} = 1 + \frac{1}{3}\delta. \quad (4.46)$$

Les droites ainsi obtenues sont tracées sur la figure 4.29. Ce modèle simple explique en grande partie l'écart entre les pics, notamment pour $|K|=2$. Pour comprendre plus finement la déviation, il est possible de comparer au modèle hydrodynamique [113]. Celui-ci tient compte du couplage entre les modes ainsi que de la rotation pour le mode $|K|=1$. Le résultat de ce modèle est tracé sur la figure 4.29 pour les modes isoscalaires. Ce modèle reproduit très bien la tendance moyenne de chacune des composantes. Cependant les résultats de la théorie TDHF+BCS sont dispersés autour de la valeur moyenne. Cette dispersion sera expliquée dans la section 4.4.2.

De façon à caractériser, la dépendance précise en déformation de chacun des pics, un polynôme du second ordre,

$$E_{|K|}^{IS/IV} = \overline{E_{2+}^{IS/IV}} \left(1 + a_1^{|K|}\delta + a_2^{|K|}\delta^2 \right), \quad (4.47)$$

a été ajusté pour chacune des composantes $|K|$. Les résultats sont présentés dans le tableau 4.2.

	$a_1^{ K }$	$a_2^{ K }$		$a_1^{ K }$	$a_2^{ K }$
IS $K=0$	-0,240	-0,672	IV $K=0$	-0,277	-0,052
IS $K=1$	-0,167	0,308	IV $K=1$	-0,111	0,032
IS $K=2$	0,305	-0,036	IV $K=2$	0,250	-0,006

TAB. 4.2 – Résultats de l'ajustement de la fonction (4.47) sur les points de la figure 4.29.

Effet de la déformation sur la hauteur des pics principaux

On remarque sur les figures 4.25, que les composantes en K ont des hauteurs différentes les unes des autres. Pour comprendre ce phénomène, la hauteur de chacune des composantes est obtenue systématiquement en ajustant une fonction de Lorentz (4.24) sur les pics principaux. La valeur normalisée H_K/\overline{H} est tracée sur la figure 4.30 en fonction de la déformation, avec

$$\overline{H} = \frac{1}{5} (H_{|K|=0} + 2H_{|K|=1} + 2H_{|K|=2}). \quad (4.48)$$

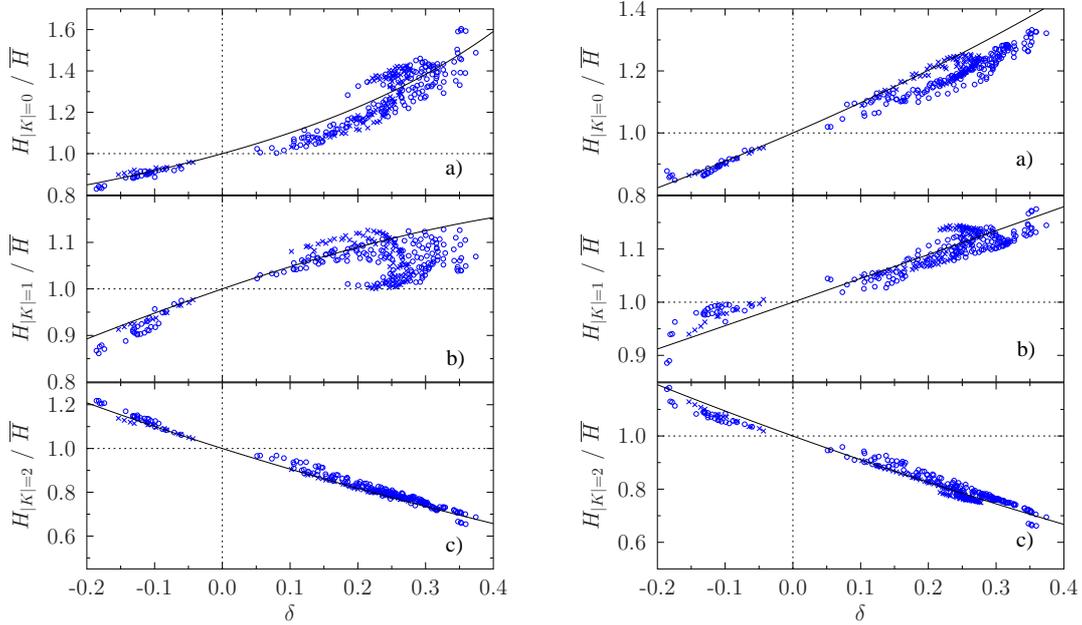


FIG. 4.30 – Hauteur des pics principaux isoscalaires (figures de gauche) et isovecteurs (figures de droite) pour chacune des composantes $|K|=0$ (a), $|K|=1$ (b) and $|K|=2$ (c). Les lignes noires sont obtenues à partir de la formule (4.54) et des formules ajustées sur l'énergie moyenne (équation (4.47)).

Sur cette figure, on remarque des tendances globales pour chacune des composantes. Pour comprendre ces tendances, on peut, à partir des règles de somme isoscalaires, établir les relations suivantes,

$$m_1^{|K|=0} = \bar{m}_1 (1 + 2/3\delta), \quad (4.49)$$

$$m_1^{|K|=1} = \bar{m}_1 (1 + 1/3\delta), \quad (4.50)$$

$$m_1^{|K|=2} = \bar{m}_1 (1 - 2/3\delta), \quad (4.51)$$

avec $\bar{m}_1 = 5e^2\hbar^2 A\langle r^2 \rangle / (4\pi m)$. Si on suppose que la fonction de réponse possède un seul pic principal, on obtient la relation $E_{|K|} H_{|K|} \simeq m^{|K|}$.

Avec ces approximations, la hauteur de chacune des composantes s'écrit,

$$H_{|K|=0}/\bar{H} = (1 + \frac{2}{3}\delta)/E_{|K|=0}(\delta), \quad (4.52)$$

$$H_{|K|=1}/\bar{H} = (1 + \frac{1}{3}\delta)/E_{|K|=1}(\delta), \quad (4.53)$$

$$H_{|K|=2}/\bar{H} = (1 - \frac{2}{3}\delta)/E_{|K|=2}(\delta). \quad (4.54)$$

Cette expression est tracée sur la figure 4.30 et reproduit relativement bien les tendances obtenues par la théorie TDHF+BCS.

Effet de la déformation sur la largeur des pics principaux

De la même manière que pour l'énergie et la hauteur des différentes composantes, la largeur de chacune des composantes est représentée sur la figure 4.31. De façon à ne pas mélanger les différents effets intervenant dans la largeur des résonances géantes, seuls les noyaux de masse $A > 100$ sont présentés. En effet pour les noyaux de masse $A < 100$, les résonances géantes possèdent une largeur intrinsèque importante. Sur cette figure, une augmentation systématique de la largeur avec la déformation est obtenue pour toutes les composantes. En particulier, pour la composante $K=0$, où le couplage avec la résonance monopolaire élargit le pic principal.

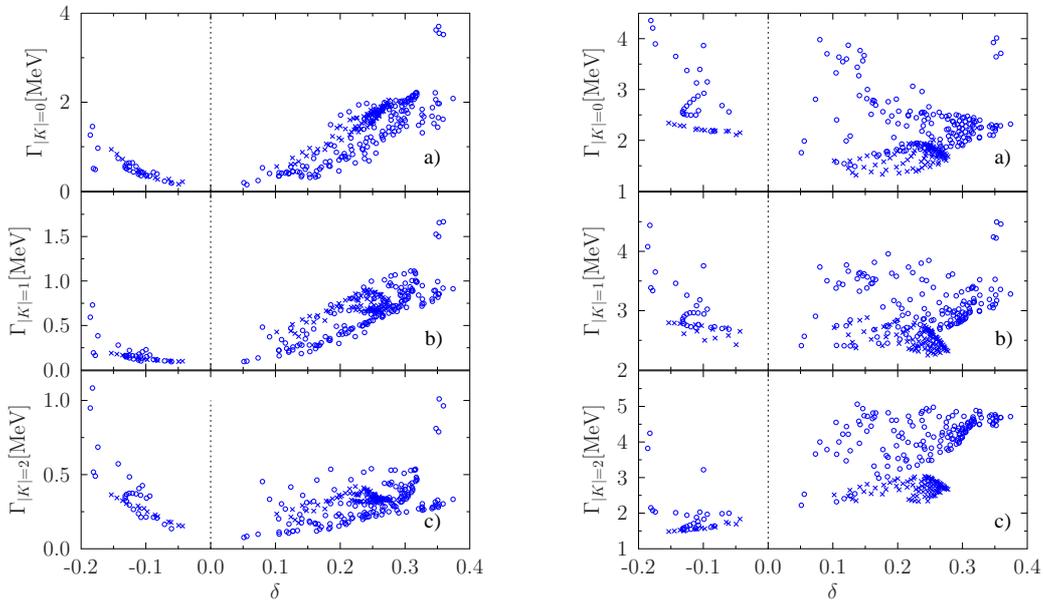


FIG. 4.31 – Largeur des pics principaux isocscalaires (figures de gauche) et isovecteurs (figures de droite) pour chacune des composantes $|K|=0$ (a), $|K|=1$ (b) and $|K|=2$ (c). La largeur présentée est corrigée de la largeur d'amortissement Γ_0 et correspond donc à la largeur physique.

Il faut noter que expérimentalement, les différentes composantes en K ne peuvent pas être séparées. Seul le spectre total peut être mesuré et donc seule la largeur totale de la résonance quadrupolaire peut être comparée à la théorie. Celle-ci est tracée sur la figure 4.32(a) en fonction de la déformation. Cette figure montre que la largeur du pic totale isoscalaire augmente avec δ avec une dépendance décrite par la formule,

$$\Gamma_{\text{tot}} = 0,35 + 23,7\delta^2 \quad [\text{MeV}]. \quad (4.55)$$

Cette évolution est due à l'écartement entre les pics et à l'évolution des largeurs physiques individuelles. Pour comprendre quels effets sont importants, il est nécessaire de faire le lien entre les énergies E_K , les largeurs Γ_K et la largeur totale Γ_{tot} .

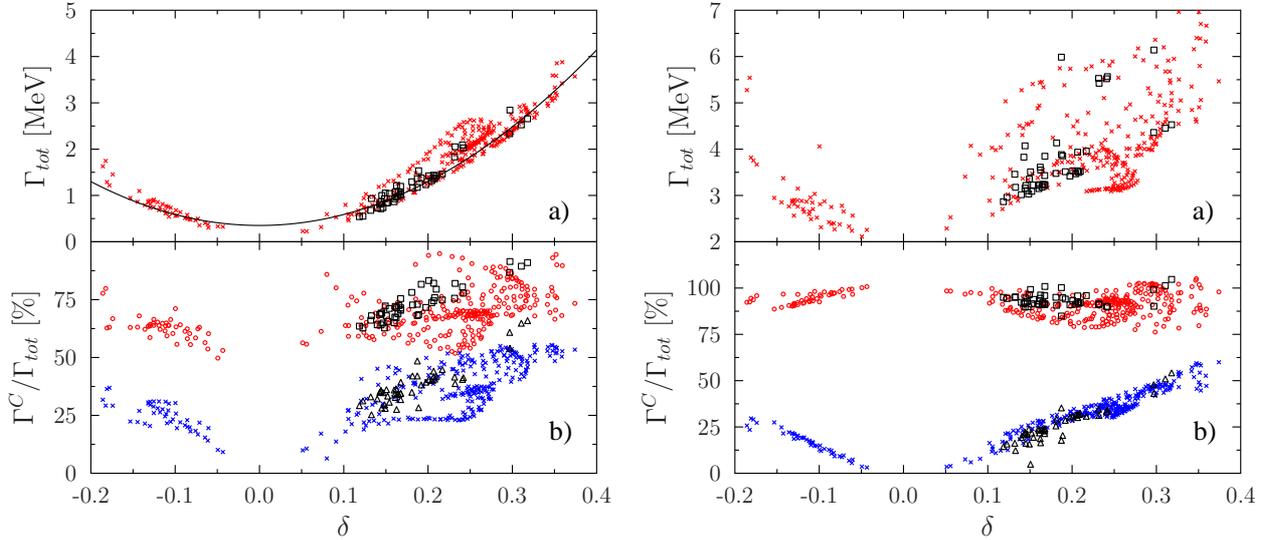


FIG. 4.32 – a) Largeur totale de la résonance totale isoscalaire (figure de gauche) et isovecteur (figure de droite) en fonction du paramètre de déformation δ pour les noyaux déformés axialement (croix rouges) et triaxialement (carrés noirs). La fonction (4.55) est tracée par une ligne continue. b) Rapport (en pourcentage) entre la largeur calculée par la formule (4.55) et la largeur de la résonance totale (cercles rouges). Pour comparaison, le même rapport, où la largeur est calculée en tenant uniquement compte de l'écart entre les pics, est présenté avec des croix bleues. Les mêmes rapports pour les noyaux triaxiaux sont présentés respectivement avec des carrés et des triangles noirs.

Pour cela, le problème peut être simplifié en supposant que chaque pic est décrit par une Gaussienne,

$$S_K(E) = \frac{H_K}{\sqrt{2\pi}\sigma_K} e^{-\frac{(E-E_K)^2}{2\sigma_K^2}}. \quad (4.56)$$

Avec cette définition, on obtient,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S_K(E) dE = H_K, \quad (4.57)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} E S_K(E) dE = H_K E_K, \quad (4.58)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} E^2 S_K(E) dE = H_K (\sigma_K^2 + E_K^2). \quad (4.59)$$

Si on suppose que le pic total correspond à la somme de ces Gaussiennes,

$$S(E) = \sum_{K=-2}^{+2} S_K(E), \quad (4.60)$$

on obtient,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S(E)dE = \sum_K H_K, \quad (4.61)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} ES(E)dE = \sum_K H_K E_K, \quad (4.62)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} E^2 S(E)dE = \sum_K H_K (\sigma_K^2 + E_K^2). \quad (4.63)$$

L'énergie moyenne et la largeur totale sont alors définies comme,

$$H_{\text{tot}} = \sum_K H_K, \quad E_{\text{tot}} = \left(\sum_K c_K E_K \right), \quad (4.64)$$

$$\sigma_{\text{tot}}^2 = \frac{1}{H_{\text{tot}}} \int_{-\infty}^{+\infty} E^2 S(E)dE - \left(\frac{1}{H_{\text{tot}}} \int_{-\infty}^{+\infty} ES(E)dE \right)^2 = \sum_K c_K \sigma_K^2 + \sigma_E^2, \quad (4.65)$$

où la notation $c_K = H_K/H_{\text{tot}}$ a été introduite et avec l'écart type entre les différents K ,

$$\sigma_E^2 \equiv \sum_K c_K E_K^2 - \left(\sum_K c_K E_K \right)^2. \quad (4.66)$$

On voit ainsi les deux contributions à la largeur totale : l'addition des différentes largeurs et la fragmentation en énergie des pics. Supposons que le pic total est Gaussien,

$$S(E) = \frac{H_{\text{tot}}}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\text{tot}}} e^{-\frac{(E-E_{\text{tot}})^2}{2\sigma_{\text{tot}}^2}}, \quad (4.67)$$

ce qui est valide dans le cas d'une fragmentation peu importante. La connexion entre les largeurs des Lorentziennes Γ et les écarts types σ est alors obtenue en supposant que les deux fonctions ont les mêmes largeurs à mi-hauteur. On obtient ainsi :

$$\Gamma_K = 2\sigma_K \sqrt{2 \ln 2} \quad \text{et} \quad \Gamma_{\text{tot}} = 2\sigma_{\text{tot}} \sqrt{2 \ln 2}. \quad (4.68)$$

Finalement, on aboutit à une formule compacte :

$$\Gamma_{\text{tot}}^2 = \sum_K c_K \Gamma_K^2 + \Gamma_E^2, \quad (4.69)$$

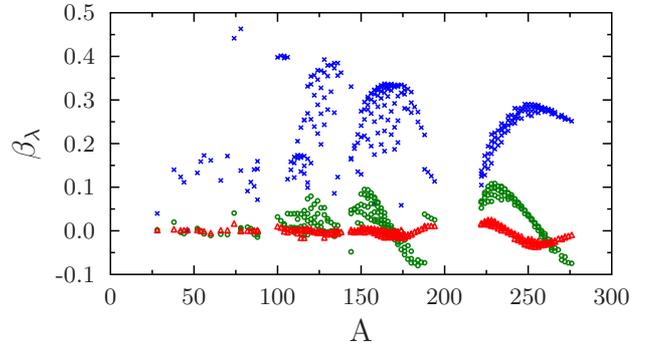
avec $\Gamma_E^2 \equiv 8 \ln 2 \sigma_E^2$. Pour chaque noyau, la largeur Γ^C est calculée à partir de la position, de la hauteur et de la largeur de chaque composante en utilisant l'équation (4.69). Le rapport entre la largeur calculée et la largeur mesurée est présenté sur la figure 4.32. Si la formule (4.69) était parfaite, on obtiendrait $\frac{\Gamma^C}{\Gamma_{\text{tot}}} = 1$. La figure 4.32 montre que la formule (4.69) est satisfaisante

mais sous-estime la largeur Γ_{tot} . Ceci n'est pas surprenant puisque les Lorentziennes ont été approximées par des Gaussiennes, ce qui peut induire des erreurs systématiques. Néanmoins la formule (4.69) permet de séparer les deux contributions entre l'augmentation due à l'écart entre les pics et l'augmentation des largeurs individuelles. Ainsi, le rapport $\frac{\Gamma_E}{\Gamma_{\text{tot}}}$ renseigne sur la proportion d'augmentation de la largeur due à l'écart entre les pics. Ce rapport est tracé sur la figure 4.32. On remarque que l'écart entre les pics ne permet de comprendre qu'une partie minoritaire de la largeur totale. La principale source de l'augmentation de la largeur provient donc de l'augmentation des largeurs physiques de chaque pic (voir figure 4.31). Il est intéressant de noter que cette largeur est quasiment nulle pour les noyaux sphériques (voir figure 4.12). La dynamique d'amortissement dans les noyaux déformés semble beaucoup plus riche. C'est un aspect qui serait intéressant de comprendre à l'avenir.

Effet des déformations d'ordre supérieur

Comme il a été montré précédemment, la déformation quadrupolaire n'explique pas complètement la fragmentation du pic principal. Ici, l'influence des déformations d'ordre supérieur conservant la symétrie axiale est étudiée. La figure 4.33 montre les paramètres de déformation d'ordre supérieur obtenus avec la méthode décrite dans la partie 3.2.1.

FIG. 4.33 – Paramètres de déformation β_2 (croix bleues), β_4 (cercles verts) et β_6 (triangles rouges) en fonction de la masse pour la fonctionnelle SkM*.



La déviation entre l'énergie renormalisée de chacun des pics $E_{|K|}/\bar{E}$ et l'énergie renormalisée obtenue avec le modèle hydrodynamique $\mathcal{E}_{|K|}/\bar{\mathcal{E}}$ est présentée sur la figure 4.34. Une forte corrélation existe entre les déformations d'ordre 4 et 6 et la position de chacun des pics.

De la même manière que le mode monopolaire est modifié par la déformation quadrupolaire, les modes quadrupolaires sont couplés aux déformations hétérocapolaires et d'ordre supérieur. Ces couplages permettent de comprendre en partie la dispersion avec les modèles simples (hydrodynamique et collectif) où seule une déformation quadrupolaire est supposée.

4.4.3 Noyaux triaxiaux

Nous nous intéressons maintenant au cas des noyaux ne possédant aucun axe de symétrie. Ces noyaux sont décrits par le paramètre δ (défini par l'équation (4.37)) et par le paramètre

4.4. Effets de la déformation sur les résonances géantes quadrupolaires

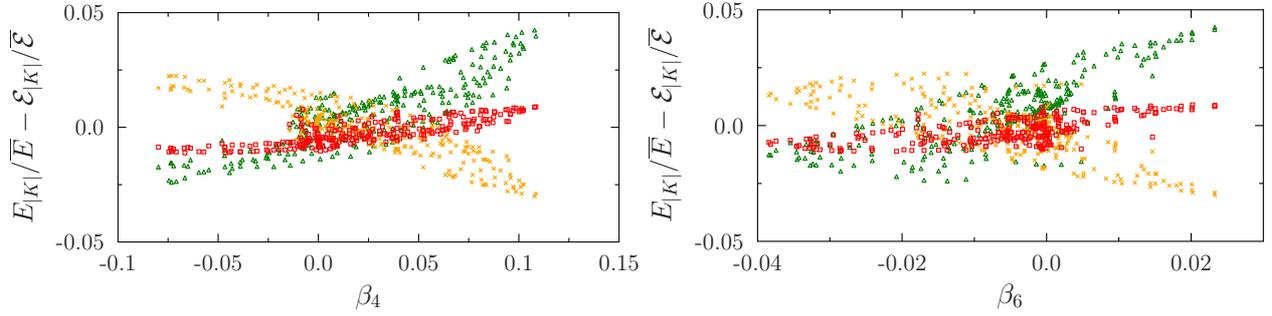


FIG. 4.34 – Déviation entre les énergies des pics isoscalaires obtenues avec TDHF+BCS et les résultats obtenus par le modèle hydrodynamique $\mathcal{E}_{|K|}$ en fonction des paramètres de déformation β_4 (figure de gauche) et β_6 (figure de droite). Les pics correspondant aux composantes $|K|=0$, $|K|=1$ et $|K|=2$ sont présentés respectivement avec des triangles verts, des croix oranges et des carrés rouges.

décrivant la triaxialité γ définie par,

$$\cos(\gamma) = \frac{3\langle Q_{20} \rangle}{4A\langle r^2 \rangle}, \quad \sin(\gamma) = \frac{3\sqrt{3}\langle Q_{22} \rangle}{4A\langle r^2 \rangle}. \quad (4.70)$$

La position dans le plan (δ, γ) de chacun des 54 noyaux triaxiaux est présentée sur la figure 4.35. On voit ainsi que notre échantillon est représentatif de l'ensemble des formes quadrupolaires possibles.

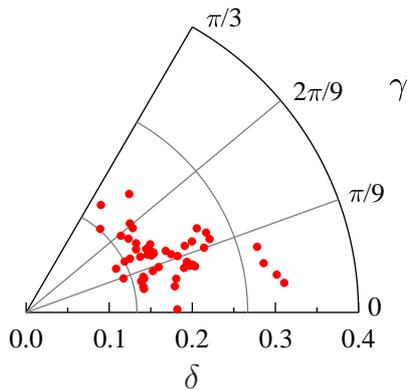


FIG. 4.35 – Positions des 54 noyaux triaxiaux dans le plan (δ, γ) . Chaque point correspond à un noyau déformé triaxialement.

L'absence d'axe de symétrie lève la dégénérescence entre les résonances de même $|K|$ comme on peut le voir sur les figures 4.36 et 4.37 pour la chaîne isotopique du platine. La fragmentation devient alors encore plus complexe.

Pour comprendre l'écart entre les pics de même $|K|$, on utilise les équations du modèle collectif (équations (4.39) à (4.42)) et les définitions de δ et γ . En effet, partant de l'expression

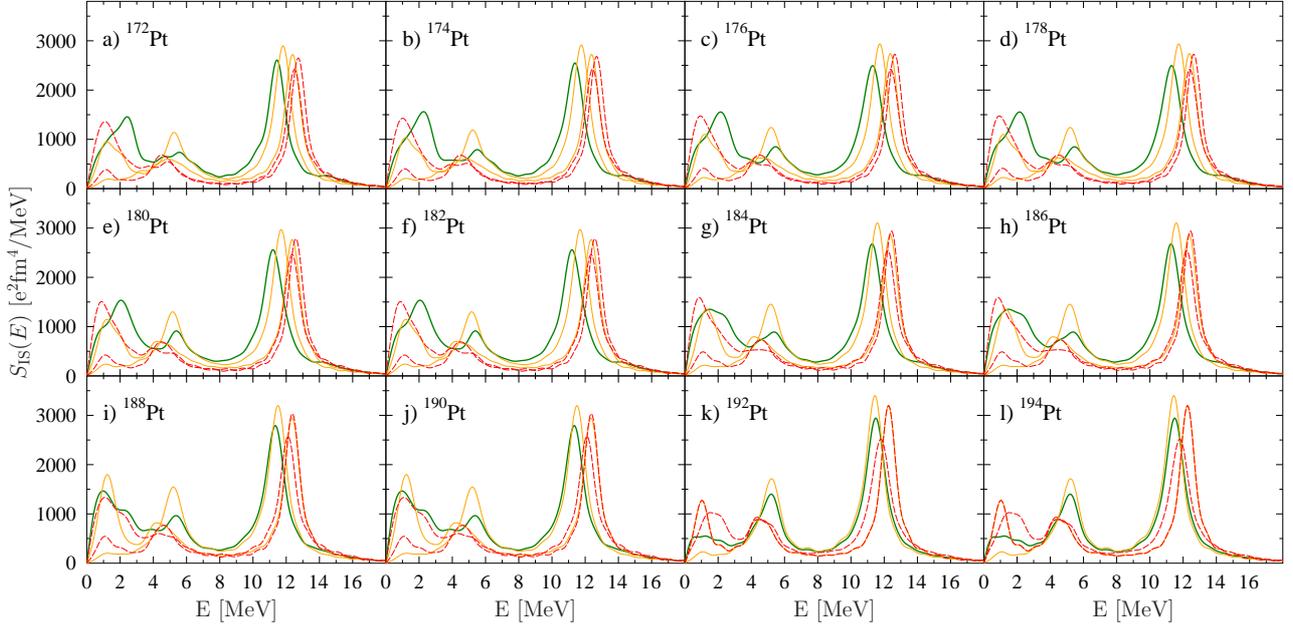


FIG. 4.36 – Fonctions de réponse isoscalaire pour les différentes valeurs de K sur la chaîne isotopique du platine. Dans cette chaîne, la plupart des noyaux sont déformés de façon triaxiale avec SkM* (voir figure 3.2). Les réponses pour $|K|=0$, $|K|=1$ et $|K|=2$ sont tracées respectivement par des lignes vertes, des lignes fines jaunes et des tirets rouges. Il faut noter que pour obtenir les spectres, un facteur d'amortissement de 1 MeV a été utilisé.

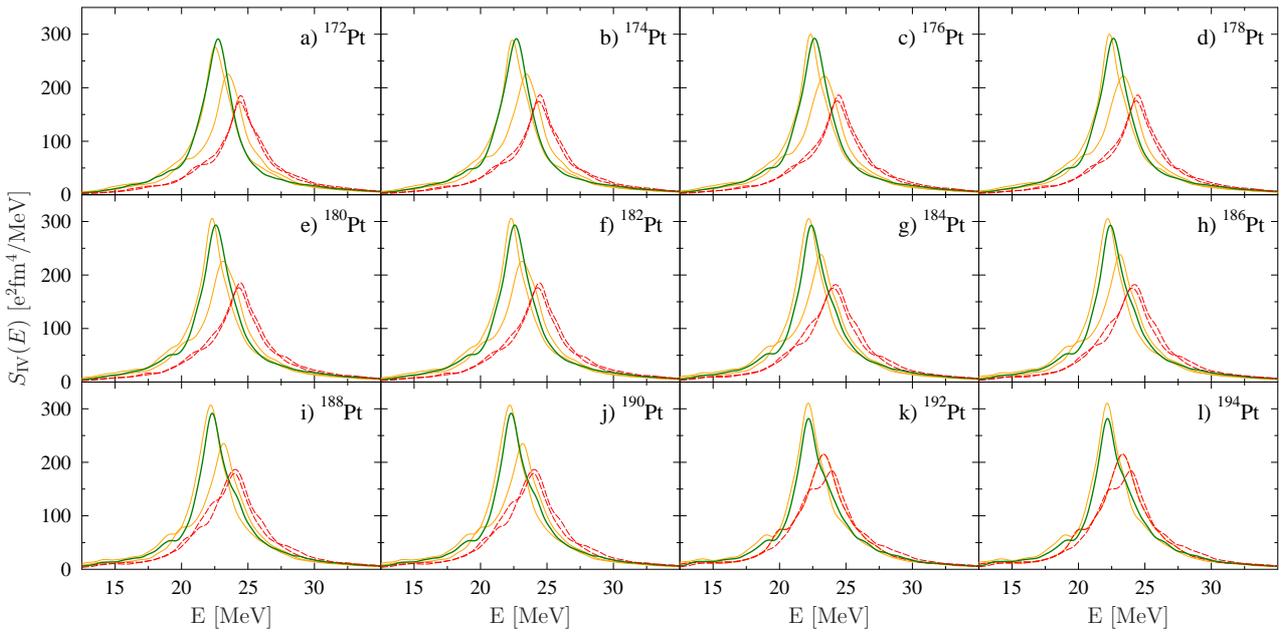


FIG. 4.37 – Même figure que 4.36 pour les résonances isovecteurs.

4.4. Effets de la déformation sur les résonances géantes quadrupolaires

des masses, une expression de l'écart en énergie entre les pics de même $|K|$ est obtenue :

$$\Delta E_1 = E_1 - E_{-1} = E_{sph} \frac{\delta}{\sqrt{3}} \sin(\gamma) \quad \text{et} \quad \Delta E_2 = E_2 - E_{-2} = 0. \quad (4.71)$$

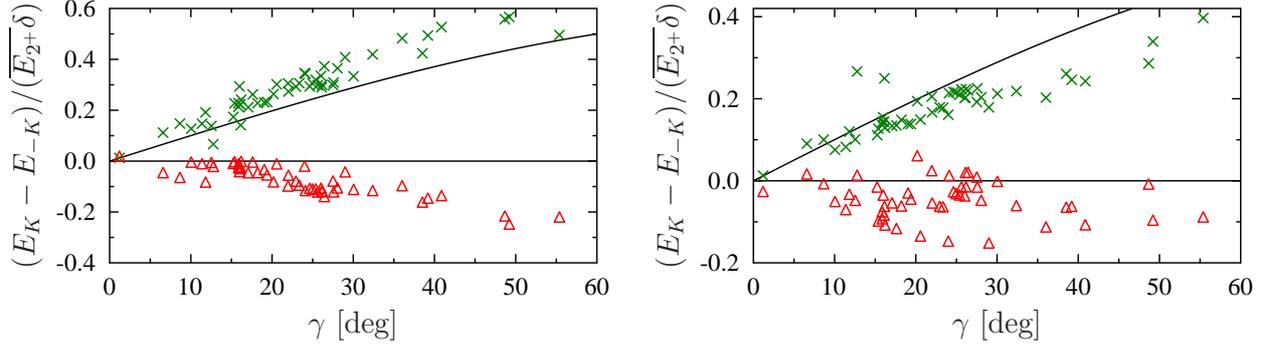


FIG. 4.38 – Différence d'énergie entre les pics de même $|K|$ en fonction du paramètre de déformation triaxiale pour $K=1$ (croix vertes) et $K=2$ (triangles rouges). Les deux lignes correspondent aux prédictions du modèle simple sans couplage (équations (4.71)).

Les écarts obtenus à partir de TDHF+BCS sont comparés à ces expressions sur la figure 4.38. Le modèle simple reproduit assez bien la déviation entre les pics $K=1$ et $K=-1$. Néanmoins ce modèle ne prédit pas d'écart entre les résonances $K=2$ et $K=-2$. Ce qui est globalement cohérent avec la figure 4.38 sauf à grand γ .

Pour aller plus loin, on peut tenir compte du couplage entre les différents modes. Pour cela, on ne tiendra compte que du couplage dû aux éléments hors diagonaux de la matrice M_{ij} . À partir de l'équation (4.41), on en déduit les différents couplages,

$$\begin{cases} M_{\eta 0} = m \langle Q_{20} \rangle \\ M_{\eta+2} = m \langle Q_{22} \rangle \\ M_{0+2} = -m \langle Q_{22} \rangle \end{cases} . \quad (4.72)$$

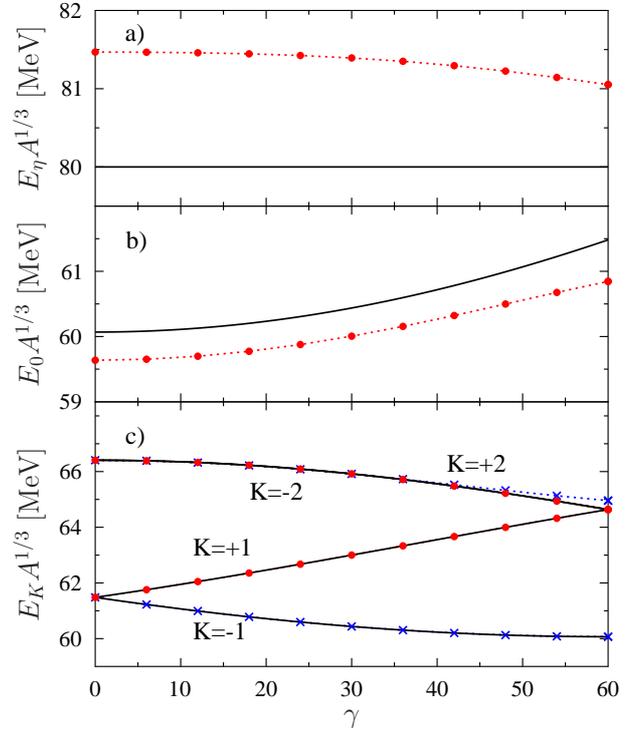
Les autres éléments hors diagonaux étant nuls. Les modes $K=1$ et $K=-1$ ne seront donc pas modifiés par le couplage. Les différentes constantes des forces de rappel des modes monopolaires et quadrupolaires sont choisies de façon à reproduire les expressions empiriques des énergies moyennes,

$$E_{0+} = 80A^{-1/3} \quad \text{et} \quad E_{2+}^{IS} = 63A^{-1/3}. \quad (4.73)$$

En supposant un rayon carré moyen, $\langle r^2 \rangle = 3/5(1, 2A^{1/3})^2$, on obtient les constantes de rappel $K_\eta=133$ A.MeV et $K_K=165$ A.MeV Les énergies obtenues en résolvant l'équation aux valeurs propres,

$$M^{-1} K X_k = \omega_k X_k, \quad (4.74)$$

FIG. 4.39 – Évolution des énergies des différents modes obtenus à l'aide de l'Hamiltonien collectif schématique (4.39) : a) monopolaire, b) $K=0$ et c) $K = \pm 1$ and $K = \pm 2$ en fonction de γ . Les calculs en négligeant les couplages entre les modes (lignes noires) sont comparés aux calculs avec couplages (pointillés avec croix ou cercles). Dans la figure du bas, les courbes correspondantes aux valeurs négatives de K sont tracées avec des points rouges et celles correspondantes aux valeurs positives avec des croix bleues.



sont tracées sur la figure 4.39 en fonction de la triaxialité γ pour une valeur fixe de $\delta=0,15$. Cette figure montre que les couplages entre les modes modifient les énergies monopolaires et quadrupolaires pour $K=0$. Cependant les énergies pour $K=2$ et $K=-2$ ne sont modifiées que très légèrement, ce qui ne permet pas d'expliquer les résultats de la figure 4.38. D'autres part ces erreurs sont assez faibles et pourraient s'expliquer par l'erreur due à la procédure de fit des fonctions de réponse pour obtenir les énergies collectives.

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, une étude complète des résonances géantes a été effectuée à l'aide de la théorie TDHF+BCS. Il a été mis en évidence que l'appariement influence principalement l'état initial du noyau et non la dynamique lors de la résonance. Ceci, à l'exception des résonances quadrupolaires de basse énergie, où l'appariement peut jouer un rôle décisif en créant une excitation de paires. Un très bon accord a été trouvé entre les théories TDHF+BCS et la QRPA, ce qui montre que l'approximation BCS qui suppose que la matrice d'appariement est diagonale dans la base canonique est une bonne approximation pour les résonances géantes. On peut noter qu'il a été montré que les éléments hors diagonaux sont assez faibles [117]. Une méthode de restauration de la symétrie associée au nombre de particules a été proposée pour corriger la fonction de réponse, ceci a montré un effet assez faible du mélange d'états possédant

des nombres de particules différents.

Une étude systématique des résonances quadrupolaires a ensuite été effectuée pour les noyaux sphériques. Cette étude qui a été faite pour l'ensemble des noyaux pairs-pairs montre de fait l'efficacité de la théorie TDHF+BCS et son faible cout numérique. Durant cette étude, à partir des noyaux sphériques, nous avons montré que :

- les énergies des états 2^+ de basse énergie sont bien reproduites mais pas les $B(E2)$ qui sont sous-estimés avec TDHF+BCS. Ceci semble être un problème récurrent aux méthodes de champ moyen avec appariement. Une solution possible étant d'aller au delà en prenant en compte les fluctuations quantiques collectives [95].
- Les énergies collectives isoscalaires et isovecteurs sont bien reproduites par la théorie TDHF+BCS.
- Le manque de corrélations complexes à deux corps ne permet pas de reproduire les largeurs des résonances qui sont le plus souvent fortement sous-estimées.
- La fonctionnelle de Skyrme SkM* reproduit mieux les résultats que la fonctionnelle SLy4,
- Les effets de structure peuvent modifier l'énergie collective jusqu'à 1 MeV, ces effets de structure étant "lissés" par l'appariement.
- Le lien entre les énergies collectives GQR isoscalaires et isovecteurs et l'énergie de symétrie a été discutée montrant toutefois des lacunes dans la compréhension du lien entre systèmes finis et infinis.

L'étude s'est ensuite portée sur les noyaux déformés, la déformation fragmentant la réponse. Une description complète de la séparation des pics en trois pour les noyaux déformés axialement a montré que la fragmentation du pic principal peut être bien comprise par des modèles macroscopiques simples. Des effets plus complexes ont néanmoins été mis en évidence, comme une influence des effets des déformations d'ordre supérieur et l'augmentation de la largeur des composantes en K avec la déformation. La méthode TDHF+BCS étant simple et relativement peu couteuse numériquement, il est possible d'étudier les noyaux ne possédant pas d'axe de symétrie ce qui reste difficile à l'heure actuelle avec les codes de QRPA. L'étude pour les noyaux triaxiaux a montré une levée de dégénérescence entre les états K et $-K$ qui peut être comprise en partie par des modèles simples prenant en compte la géométrie du noyau.

Il est à noter que des études systématiques équivalentes à celle-ci pourraient facilement être reproduites pour les autres résonances géantes : monopolaire, dipolaire, octupolaire, etc...

Chapitre 5

Application de TDHF+BCS aux réactions nucléaires.

5.1 Introduction

Les réactions de transfert ont connu récemment un regain d'intérêt expérimental notamment en ce qui concerne leur rôle dans les mécanismes de fusion [118, 119, 120, 121] et en tant qu'instrument pour mesurer les corrélations entre nucléons. De nouvelles expériences ont en particulier montré l'importance du transfert de paires [122, 16, 123, 124]. La description de ce transfert est complexe puisqu'il est nécessaire de traiter simultanément la cinématique de la réaction, l'effet tunnel, les corrélations et la structure des deux participants. Une approche couramment utilisée consiste à déterminer les probabilités de transition et les facteurs de forme à l'aide d'un modèle de structure tel que la QRPA et de décrire la réaction en utilisant les techniques de canaux couplés [23, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 137, 87]. Ces approches ont le désavantage de traiter de manière séparée la structure et les réactions.

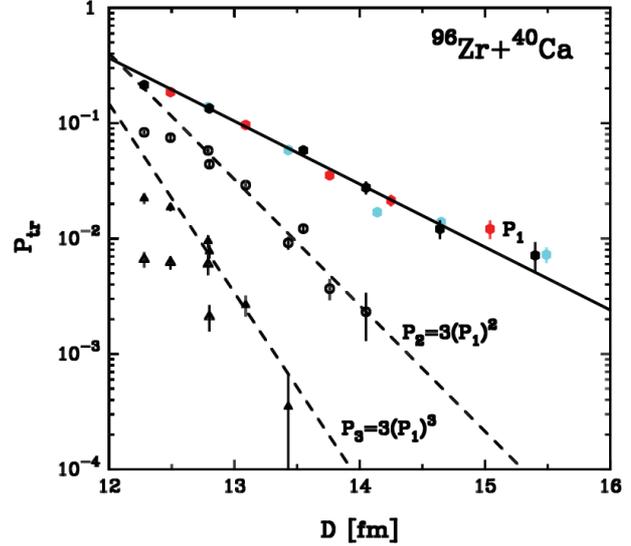
Une alternative à cette méthode est d'utiliser les théories dynamiques de champ moyen avec et sans appariement [7, 6, 124]. Ces théories permettent une description complète de la structure et des réactions nucléaires aux énergies proches de la barrière Coulombienne et donnent une vision unifiée de ces collisions.

TDHF a été utilisé fréquemment pour décrire les réactions [124, 138, 139, 140, 141], il est particulièrement adapté à basse énergie en raison de l'absence des effets des collisions à 2 corps. En effet, à basse énergie, le principe de Pauli bloque de façon importante les collisions entre nucléons.

Dans ce chapitre, l'effet de l'appariement sur les réactions de transfert est étudié avec les théories dynamiques de champ moyen avec et sans appariement. On s'attend à ce que l'appariement augmente la probabilité de transférer une paire de particules. Un exemple de résultat

expérimental est montré sur la figure 5.1, où les probabilités de transfert de particules du Zirconium au Calcium sont tracées en fonction de la distance minimale d'approche. La probabilité

FIG. 5.1 – Probabilités de transfert en fonction de la distance minimale d'approche pour la réaction $^{96}\text{Zr}+^{40}\text{Ca}$. Extrait de la référence [16]. P_1 , P_2 et P_3 dénote les probabilités de transfert de 1, 2 ou 3 neutrons du zirconium au calcium.



de transfert est définie ici comme le rapport entre la section efficace de transfert sur la section efficace de Rutherford. La distance minimale d'approche est calculée en supposant une trajectoire de Rutherford, c'est-à-dire en supposant que seule la force coulombienne intervient dans la cinématique. Avec cette trajectoire classique, on obtient la relation entre l'énergie du centre de masse $E_{c.m.}$ et la distance minimale d'approche D ,

$$D = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_{c.m.}} \left(1 + \frac{1}{\sin(\theta_{c.m.}/2)} \right), \quad (5.1)$$

avec $\theta_{c.m.}$ l'angle de diffusion dans le centre de masse et les charges des deux fragments Z_1 et Z_2 . Avec cette représentation en fonction de la distance minimale d'approche, il est possible de comparer les résultats expérimentaux avec des calculs théoriques obtenus pour un paramètre d'impact nul.

La figure 5.1 montre que les probabilités de transfert augmentent au fur et à mesure que la distance minimale d'approche est petite. En effet, plus les noyaux sont proches, plus les queues de distribution des deux noyaux sont en contact, et plus la probabilité qu'un nucléon passe d'un fragment à l'autre est importante. Un résultat intéressant de cette expérience est la relation empirique entre la probabilité de transférer deux neutrons et le transfert d'un seul neutron : $P_2 \simeq 3P_1^2$. Cette valeur de 3 montre une influence importante des corrélations entre les nucléons. En effet, si le transfert de deux neutrons s'effectue de façon indépendante (aussi appelé transfert séquentiel), et en négligeant les effets quantiques, on s'attend à la relation $P_2 \simeq P_1^2$. L'une des motivations de ce chapitre est de quantifier comment l'appariement induit une augmentation de P_{2n} par rapport au cas non corrélé.

5.2 Description des réactions nucléaires à l'aide du champ moyen dépendant du temps

Dans un premier temps, nous allons présenter la méthode théorique permettant de déterminer les probabilités de transfert avec la théorie TDHF. La réaction étudiée ici est la réaction $^{40}\text{Ca}+^{48}\text{Ca}$. Les deux noyaux étant à couche fermée, ils ne présentent pas d'appariement. L'état fondamental des deux noyaux est d'abord déterminé avec EV8 et la fonctionnelle Sly4d (voir tableau 3.1), dans un réseau de taille : $2L_x \times 2L_y \times 2L_z = 22,4 \times 22,4 \times 22,4 \text{ fm}^3$.

Puis les deux noyaux sont placés sur le même réseau de taille $60,8 \times 22,4 \times 22,4 \text{ fm}^3$, et une impulsion leur est donnée de façon à obtenir l'énergie dans le centre de masse et le paramètre d'impact souhaités. La distance initiale entre les deux noyaux est ici de 38,4 fm et le paramètre d'impact est nul. L'évolution de chacune des fonctions d'onde est ensuite effectuée avec le champ moyen [11, 26]. La figure 5.2 montre l'évolution en temps des deux fragments. Les trois figures

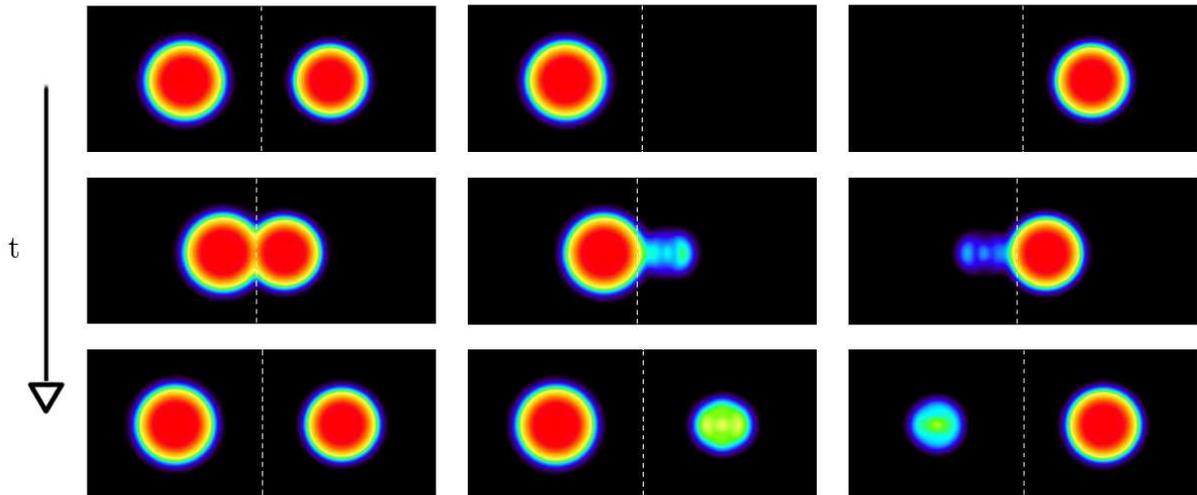


FIG. 5.2 – Densité de neutron en fonction du temps lors d'une collision $^{48}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ pour une énergie dans le centre de masse de 48,6 MeV. Le ^{48}Ca étant initialement à gauche et le ^{40}Ca à droite. La figure de gauche représente la densité de neutron totale, les figures centrales et de droite représentent respectivement la densité calculée uniquement avec les fonctions d'onde initialement dans le ^{48}Ca et le ^{40}Ca . La ligne verticale en pointillés représente la position du col aux différents temps.

du haut montrent la densité de neutron lors de la phase d'approche, lorsque les deux fragments sont en contact (figures du milieu) et lors de la séparation (figures du bas). Pour chaque temps, la densité de neutron est tracée, elle est calculée ici de trois façon : la densité totale, la densité

calculée à partir des fonctions d'ondes initialement dans le ^{48}Ca et la densité calculée à partir des fonctions d'ondes initialement dans le ^{40}Ca .

On voit ainsi que des particules initialement dans le ^{48}Ca ont été transférées au ^{40}Ca . De même, des particules initialement dans le ^{40}Ca se retrouvent dans l'autre fragment. Le transfert est néanmoins plus important du ^{48}Ca au ^{40}Ca puisque ce transfert tend à équilibrer les rapports N/Z . Pour déterminer le nombre moyen de particules transférées au ^{40}Ca , on intègre la densité à gauche ou à droite de la position du col. On définit ainsi l'opérateur qui compte le nombre de particules d'isospin τ dans une boîte \mathcal{B} ,

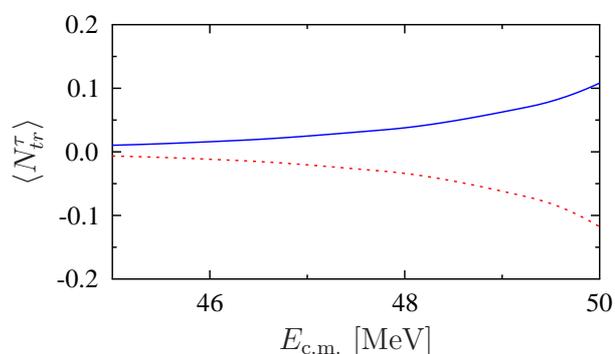
$$\hat{N}_{\mathcal{B}}^{\tau} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma,\tau}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma,\tau}(\mathbf{r}) \Theta(\mathbf{r}), \quad (5.2)$$

$\Psi_{\sigma,\tau}^{\dagger}(\mathbf{r})$ et $\Psi_{\sigma,\tau}(\mathbf{r})$ étant les opérateurs de création et d'annihilation de particules. $\Theta(\mathbf{r})$ est la fonction qui définit la boîte avec $\Theta(\mathbf{r})=1$ si \mathbf{r} est dans la boîte \mathcal{B} et $\Theta(\mathbf{r})=0$ autrement. Dans le cas présenté dans la figure 5.2, $\Theta(\mathbf{r})=1$ si $x > X_{\text{col}}$ et $\Theta(\mathbf{r})=0$ si $x < X_{\text{col}}$, x étant l'axe de la collision et X_{col} la position du col entre les deux noyaux. La position du col est calculée ici de façon simple,

$$X_{\text{col}} = \frac{A_2^{1/3} x_1 + A_1^{1/3} x_2}{A_1^{1/3} + A_2^{1/3}}, \quad (5.3)$$

avec x_1 et x_2 les positions moyennes des deux fragments et avec A_1 et A_2 les nombres de masse des deux fragments. Pour simplifier le calcul du col, on calcule les positions moyennes des deux fragments en négligeant le transfert, c'est-à-dire en moyennant la densité obtenue à partir des fonctions d'ondes initialement dans chacun des noyaux. Le nombre de protons ou neutrons transférés dans le sens $^{48}\text{Ca} \rightarrow ^{40}\text{Ca}$ peut donc être calculé avec la formule suivante $N_{tr}^{\tau} = \langle \hat{N}_{\mathcal{B}}^{\tau} \rangle - 20$.

FIG. 5.3 – Nombre moyen de neutrons (ligne continue bleu) et de protons (ligne en pointillés rouges) transférés en fonction de l'énergie dans le centre de masse. Le transfert est défini positivement dans le sens $^{48}\text{Ca} \rightarrow ^{40}\text{Ca}$.



Les résultats sont montrés sur la figure 5.3 où les nombres de protons et neutrons transférés sont tracés en fonction de l'énergie dans le centre de masse. Cette figure montre que le transfert moyen de protons est du même ordre de grandeur que le transfert de neutrons. Néanmoins,

on voit que à grande distance, le transfert de protons est légèrement inférieur à celui des neutrons. Ceci peut être directement attribué aux effets coulombiens à un corps induisant une modification des fonctions d'onde proton à grande distance ce qui réduit la probabilité de transfert. On remarque aussi sur cette figure que le transfert proton se fait dans le sens inverse du transfert de neutron. En effet, le terme d'asymétrie dans l'équation d'état de la matière nucléaire privilégie les voies de transfert qui équilibrent le terme d'asymétrie [142]. Pour illustrer ce phénomène, les rapports N/Z sont tracés pour les deux fragments au cours du temps. On voit ainsi que les deux rapports se rapprochent au cours du temps. À basse énergie, en dessous de la barrière Coulombienne, on voit que cet équilibre n'est toutefois que partiel. Le taux d'équilibre dépendra essentiellement du temps de contact. Dans la figure 5.4, on voit que le temps de contact est très court, ce qui ne laisse pas le temps au rapport N/Z de s'équilibrer complètement.

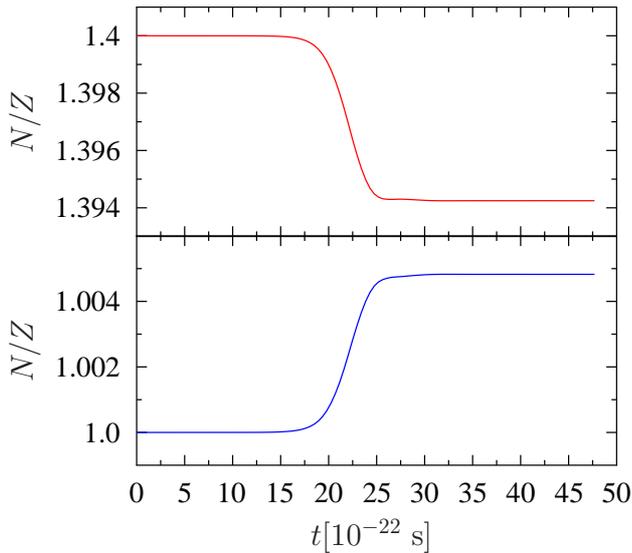


FIG. 5.4 – Rapport entre le nombre de neutrons et de protons pour chacun des fragments en fonction du temps pour la réaction $^{48}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ à 48,64 MeV. Le rapport du fragment correspondant initialement au ^{48}Ca est tracé sur la figure du haut tandis que la figure du bas correspond à celui du ^{40}Ca

5.2.1 Calcul des probabilités de transfert.

De façon à décrire plus précisément le transfert et de façon à comparer nos résultats aux résultats expérimentaux, il est nécessaire de calculer explicitement les probabilités de transfert. Pour cela, nous allons utiliser la méthode développée dans la référence [6], qui consiste à projeter l'état HF sur le nombre de particules dans la boîte \mathcal{B} . Dans la théorie TDHF, aux instants initiaux, l'état du système est décrit par le produit de deux déterminants de Slater spatialement séparés,

$$|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle. \quad (5.4)$$

Ainsi, initialement si on coupe le système en deux comme sur la figure 5.2, on a deux noyaux qui sont états propres du nombre de particules $N_{\mathcal{B}}$. Au cours du temps, l'équation (5.4) reste valide, toutefois dû au transfert, l'état à la droite du col est un mélange d'ondes à un corps de $|\Psi_1\rangle$ et d'ondes à un corps de $|\Psi_2\rangle$, c'est le phénomène d'intrication quantique. Ainsi, l'état obtenu en coupant le système n'est plus un état de Slater et n'est plus non plus un état propre du nombre de particules $\langle N_{\mathcal{B}}^2 \rangle \neq \langle N_{\mathcal{B}} \rangle^2$. En utilisant les projecteurs, on peut remonter aux probabilités d'avoir transféré un certain nombre de particules. Le projecteur sur un nombre de particules donné N s'écrit de la même façon que le projecteur (1.44),

$$\hat{P}_{\mathcal{B}}(N) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\varphi(\hat{N}_{\mathcal{B}} - N)}. \quad (5.5)$$

Pour comprendre l'action de ce projecteur, on peut supposer qu'à un instant t , l'état total peut s'écrire comme un mélange de configurations correspondant à des répartitions différentes des particules entre les deux boîtes \mathcal{B} et $\bar{\mathcal{B}}$,

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |N_{\mathcal{B}} = n, N_{\bar{\mathcal{B}}} = N_{\text{tot}} - n\rangle, \quad (5.6)$$

avec

$$\hat{N}_{\mathcal{B}} |N_{\mathcal{B}} = n, N_{\bar{\mathcal{B}}} = N_{\text{tot}} - n\rangle = n |N_{\mathcal{B}} = n, N_{\bar{\mathcal{B}}} = N_{\text{tot}} - n\rangle. \quad (5.7)$$

Dans ce cas, l'opérateur va sélectionner la composante possédant N particules exactement dans la boîte \mathcal{B} ,

$$\begin{aligned} \hat{P}_{\mathcal{B}}(N)|\Psi\rangle &= \sum_n c_n \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\varphi(n-N)} |N_{\mathcal{B}} = n, N_{\bar{\mathcal{B}}} = N_{\text{tot}} - n\rangle, \\ &= c_N |N_{\mathcal{B}} = N, N_{\bar{\mathcal{B}}} = N_{\text{tot}} - N\rangle. \end{aligned} \quad (5.8)$$

À l'aide de cet opérateur de projection, il est possible de déterminer la probabilité $P_{\mathcal{B}}(N)$ de mesurer N particules dans la boîte \mathcal{B} ,

$$P_{\mathcal{B}}(N) = \langle \Psi | \hat{P}_{\mathcal{B}}(N) | \Psi \rangle. \quad (5.9)$$

Le calcul explicite de $P_{\mathcal{B}}(N)$ est donné en Annexe A.2.1.

Les probabilités de mesurer exactement 21 ou 22 neutrons dans la boîte \mathcal{B} qui correspond ici à la partie droite sur la figure 5.2 sont tracées au cours du temps sur la figure 5.5. Pendant la phase d'approche les probabilités sont nulles puis lors du contact, elles augmentent et lorsque les deux fragments sont séparés les probabilités saturent à une valeur constante. Ces deux probabilités $P_{\mathcal{B}}(21)$ et $P_{\mathcal{B}}(22)$ correspondent respectivement aux probabilités de transférer un ou deux neutrons du ^{48}Ca au ^{40}Ca .

Il est à noter que les propriétés suivantes ont été testées numériquement :

5.3. Inclusion de l'appariement

- Normalisation : $\sum_N P_B(N) = 1$,
- moyenne : $\sum_N N P_B(N) = \langle \Psi | \hat{N}_B | \Psi \rangle$,
- écart type : $\sum_N N^2 P_B(N) - (\sum_N N P_B(N))^2 = \langle \Psi | \hat{N}_B^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{N}_B | \Psi \rangle^2$,
- cohérence entre les boîtes :

$$P_B(N) = P_{\bar{B}}(N_{\text{tot}} - N), \quad (5.10)$$

où la boîte \bar{B} correspond au complément de la boîte B .

Une erreur sur ces propriétés inférieure à 10^{-8} a systématiquement été obtenue. Cette technique de projection est valable uniquement pour l'évolution TDHF, elle a été utilisée pour étudier plusieurs réactions de transfert [6, 124, 143].

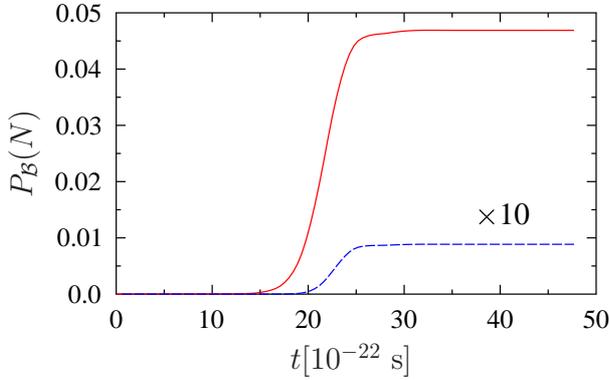


FIG. 5.5 – Probabilités d'obtenir 21 (ligne continue rouge) ou 22 (ligne en pointillés bleus) neutrons dans la boîte B au cours du temps. La probabilité $P_B(22)$ a été multipliée par un facteur 10.

5.3 Inclusion de l'appariement

La prise en compte de l'appariement et la possibilité d'avoir des noyaux superfluides requièrent d'appréhender la notion du nombre de particules avec plus de précautions. En effet, comme nous l'avons vu dans la section 1.2.4, un noyau apparié brise automatiquement le nombre de particules. Ainsi même à $t=0$, le noyau n'a le bon nombre de particule qu'en moyenne. La discussion ci-dessus doit donc être généralisée ainsi que la technique de projection. On utilisera ici le cas modèle de la réaction $^{46}\text{Ca} + ^{40}\text{Ca}$ avec de l'appariement présent initialement dans le noyau de ^{46}Ca . Les deux noyaux sont initialisés de la même façon avec EV8, puis placés sur le réseau avec une certaine vitesse initiale et un paramètre d'impact nul.

Dans la méthode TDHF+BCS, l'état à N corps total du système s'écrit alors comme le produit tensoriel des deux états initiaux,

$$|\Psi(t)\rangle = \prod_{\alpha_1} \left(u_{\alpha_1}(t) + v_{\alpha_1}(t) a_{\alpha_1}^\dagger(t) a_{\alpha_1}^\dagger(t) \right) \prod_{\alpha_2} \left(u_{\alpha_2}(t) + v_{\alpha_2}(t) a_{\alpha_2}^\dagger(t) a_{\alpha_2}^\dagger(t) \right) |-\rangle, \quad (5.11)$$

avec les états de quasi-particules α_1 provenant du premier noyau et les états α_2 provenant du second. Il est à noter que le noyau de ^{40}Ca étant dans sa phase normale, tous les v_α sont égaux à

1 ($u_\alpha=0$) et à 0 pour les autres ($u_\alpha=1$). Pour étudier le transfert, il est nécessaire de couper en deux le système conduisant à des difficultés spécifiques à TDHF+BCS (voir chapitre 2). Ainsi, on utilise la théorie FOA de façon à éviter que le nombre de particules transférées oscille après la phase de transfert. En effet, la brisure de l'équation de continuité par la théorie TDHF+BCS (voir chapitre 2) provoquerait un phénomène de transfert même lorsque les deux fragments seraient très éloignés.

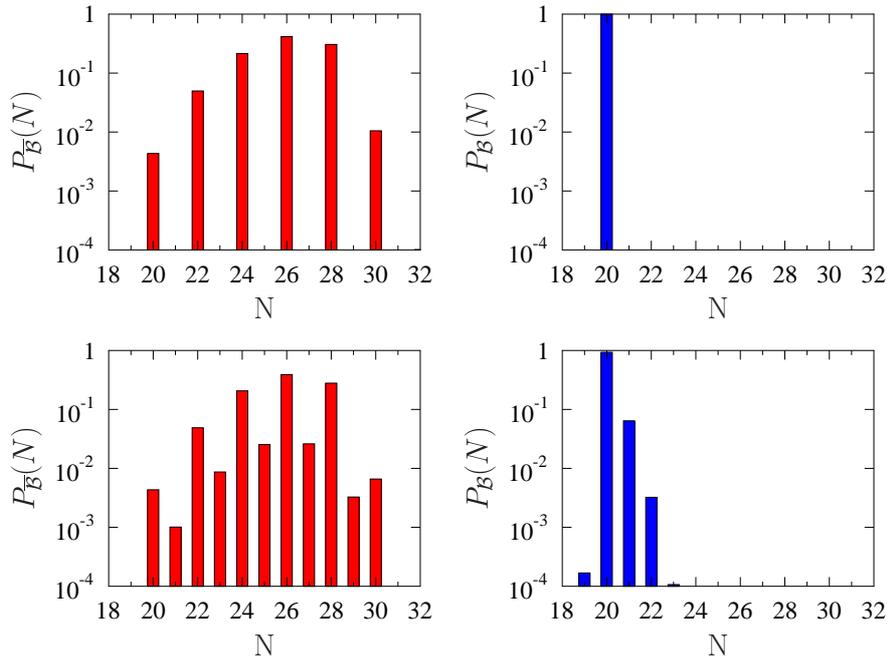


FIG. 5.6 – Probabilités d’obtenir N neutrons dans chacune des boîtes au temps initial $t=0$ (figures du haut) et après le transfert (figures du bas). La boîte associée au ^{46}Ca (respectivement ^{40}Ca) est représentée à gauche (respectivement à droite).

5.3.1 Calcul des probabilités de transfert pour un système superfluide

Le calcul des probabilités de transfert avec un état BCS possède une difficulté supplémentaire, en effet, la brisure de la symétrie associée au nombre de particules dans l’état BCS pose un problème important d’interprétation des résultats. Pour mieux comprendre, on peut calculer les probabilités comme précédemment,

$$P_{\mathcal{B}}(N) = \langle \Psi | \hat{P}_{\mathcal{B}}(N) | \Psi \rangle. \quad (5.12)$$

Le calcul est alors plus compliqué que pour un déterminant de Slater, et l'utilisation de la technique du Pfaffien permet de s'affranchir de certaines difficultés. Le détail des calculs est présenté en annexe A.2.2.

Les différentes probabilités $P_{\mathcal{B}}(N)$ et $P_{\overline{\mathcal{B}}}(N)$ avant et après la réaction sont présentées sur la figure 5.6. Sur cette figure, on remarque que (i) initialement le noyau de ^{46}Ca possède des composantes de différents nombres de particules (ii) la propriété $P_{\mathcal{B}}(N)=P_{\overline{\mathcal{B}}}(N_{\text{tot}}-N)$ n'est pas respectée. Ces deux phénomènes sont dus à la brisure de symétrie du nombre de particules de BCS (voir la section 1.2.4). En effet, comme on l'a déjà vu précédemment, l'état BCS mélange des états possédant des nombres de particules différents, par conséquent, la propriété (5.10) n'est plus conservée, mais elle est remplacée par,

$$P_{\mathcal{B}}(N) = \sum_{N_{\text{tot}}} P(N_{\text{tot}}) P_{\overline{\mathcal{B}}}(N_{\text{tot}} - N | N_{\text{tot}}), \quad (5.13)$$

avec $P(N_{\text{tot}})$ la probabilité d'avoir N_{tot} particules dans l'espace total.

Ces deux phénomènes empêchent toute interprétation simple des résultats, il n'est donc pas possible de déterminer les probabilités de transfert avec cette méthode où une seule projection est effectuée dans un des sous-espace \mathcal{B} ou $\overline{\mathcal{B}}$.

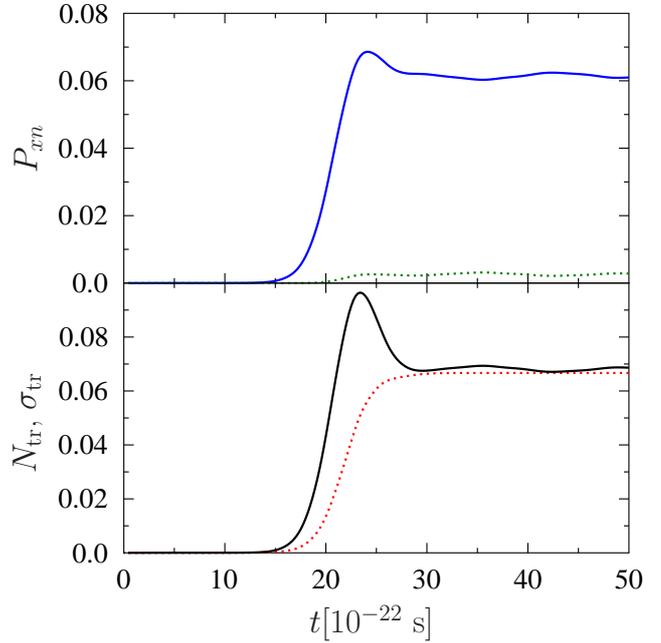
5.3.2 Double projection

Pour résoudre cette difficulté, une méthode de double projection a été mise en place. Sur la figure 5.6, on voit que l'une des difficultés est que le noyau initial de ^{46}Ca mélange plusieurs nombres de particules différents. On peut ainsi être pollué par les réactions $^{44}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$, $^{48}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$... Afin d'éviter ce problème, il apparaît naturel de sélectionner la voie qui nous intéresse. Ceci peut être fait par exemple en projetant sur un nombre de protons et de neutrons donné dans l'espace complet avant de projeter dans un des sous-espaces. C'est la méthode qui est appelée double projection ci-dessous. La méthode consiste donc à projeter tout d'abord l'état BCS sur le nombre de particules total de façon à enlever les composantes non physiques puis de déterminer les probabilités de transfert sur cet état. C'est-à-dire, calculer,

$$P_{\mathcal{B}}^{N_{\text{tot}}}(N) = \frac{\langle \Psi | \hat{P}_{\mathcal{B}}(N) \hat{P}(N_{\text{tot}}) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \hat{P}(N_{\text{tot}}) | \Psi \rangle}. \quad (5.14)$$

Le calcul explicite de $P_{\mathcal{B}}^{N_{\text{tot}}}(N)$ est présenté en annexe A.2.3. Avec cette méthode, on obtient bien une seule composante avec 26 neutrons dans la boîte $\overline{\mathcal{B}}$ à $t=0$ et on retrouve la propriété (5.10). Il est à noter que cette méthode ne fonctionne que pour les systèmes où un seul des deux noyaux possède de l'appariement. Dans le cas où les deux possèdent de l'appariement, la propriété (5.10) sera bien respectée, mais les deux fragments pourront mélanger différents nombres de particules. Il sera alors nécessaire de développer des méthodes plus élaborées.

FIG. 5.7 – Figure du haut : probabilités de transfert d’un (ligne continue bleu) et de deux neutrons (ligne en pointillés verts) en fonction du temps pour la réaction $^{46}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ à 49,5 MeV. Figure du bas : Nombre moyen de particules transférées (ligne en pointillés rouges) et écart type moyen du nombre de particules transférées (ligne continue noire) en fonction du temps.



Les résultats obtenus avec la méthode de la double projection sont tracés sur la figure 5.7 en fonction du temps. On s’aperçoit sur cette figure que les probabilités oscillent légèrement au cours du temps après la collision, alors que ce n’est pas le cas pour les résultats TDHF sur la figure 5.5. On remarque aussi que le nombre moyen de particules transférées est constant après la réaction, mais l’écart type,

$$\sigma_{\text{tr}} = \langle \hat{N}_B^2 \rangle - \langle \hat{N}_B \rangle^2, \quad (5.15)$$

oscille. De la même manière que pour le phénomène d’évaporation avec TDHF+BCS, où les propriétés asymptotiques des observables à un corps n’étaient pas physiques (voir chapitre 2), ici les propriétés asymptotiques des observables à deux corps ont un comportement oscillant qui ne semble pas physique. En effet, on s’attend à ce que après la réaction, lorsque les deux fragments sont éloignés, la compétition entre le transfert d’une particule ou de deux particules ne peut plus avoir lieu. Pour mieux comprendre l’origine de ces oscillations, il est intéressant de considérer l’équation de continuité à deux corps.

5.3.3 Équation de continuité à deux corps

De la même façon qu’il existe une équation qui régit le transport de la densité à un corps (l’équation de continuité à un corps),

$$\frac{d\rho(\mathbf{r}, t)}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t), \quad (5.16)$$

5.3. Inclusion de l'appariement

il existe une équation de continuité à deux corps,

$$\frac{d\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)}{dt} = -(\vec{\nabla}_1 \cdot \mathbf{j}_1^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) + \vec{\nabla}_2 \cdot \mathbf{j}_2^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)), \quad (5.17)$$

avec $\mathbf{j}_1^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ qui représente le courant de la particule (1) sachant que la particule (1) est en \mathbf{r}_1 et la particule (2) est en \mathbf{r}_2 . Ce courant s'écrit,

$$\mathbf{j}_1^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\hbar}{2mi} \int [\Psi^*(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) \nabla_1 \Psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) - \Psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) \nabla_1 \Psi^*(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N)] d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N, \quad (5.18)$$

ou en seconde quantification,

$$\hat{\mathbf{j}}_1^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\nabla_{\mathbf{r}_1} \Psi^\dagger(\mathbf{r}'_1) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1) - \nabla_{\mathbf{r}_1} \Psi^\dagger(\mathbf{r}'_1) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1) \right) \Big|_{\mathbf{r}'_1 = \mathbf{r}_1}. \quad (5.19)$$

Il est possible de démontrer cette équation de continuité pour une évolution exacte avec une interaction locale. Nous avons montré (section 2.5.2) que TDHFB du fait du respect des équations Erhenfest à un corps respecte l'équation de continuité à un corps. Toutefois, ce n'est pas le cas pour les observables à 2 corps. En effet, du fait de la brisure de la symétrie du nombre de particules, l'évolution TDHFB ne respecte pas l'équation de continuité à deux corps. Ainsi dans le cadre du modèle à une dimension du chapitre 2, on obtient l'équation,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{x_1, x_2}^{(2)} &= -\frac{\partial}{\partial x_1} j_1^{(2)}(x_1, x_2) - \frac{\partial}{\partial x_2} j_2^{(2)}(x_1, x_2) \\ &+ \frac{2}{i\hbar} \left(-\Delta_{x_1 x_3} \kappa_{x_3 x_2}^* \rho_{x_2 x_1} + \kappa_{x_1 x_3} \Delta_{x_3 x_2}^* \rho_{x_2 x_1} - \Delta_{x_2 x_3} \kappa_{x_3 x_1}^* \rho_{x_1 x_2} + \kappa_{x_2 x_3} \Delta_{x_3 x_1}^* \rho_{x_1 x_2} \right. \\ &\left. + \rho_{x_1 x_3}^* \Delta_{x_3 x_2}^* \kappa_{x_1 x_2} + \Delta_{x_1 x_3}^* \rho_{x_3 x_2} \kappa_{x_1 x_2} - \kappa_{x_1 x_2}^* \rho_{x_1 x_3} \Delta_{x_3 x_2} - \kappa_{x_1 x_2}^* \Delta_{x_1 x_3} \rho_{x_3 x_2}^* \right). \quad (5.20) \end{aligned}$$

Cette équation contient des termes supplémentaires qui ne s'annulent pas *a priori*. Certains conduiront à des oscillations dans $\langle N^2 \rangle$ par exemple et donc des difficultés apparaîtront également même si TDHFB est utilisé. Cette non conservation est également vraie dans la limite TDHF+BCS. Si de plus l'approximation FOA est faite, la brisure de l'équation de continuité à deux corps dépend du choix concernant l'angle de jauge,

$$\begin{aligned} \frac{d\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{dt} &= -\vec{\nabla}_{\mathbf{r}_1} \cdot \vec{j}_1^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \vec{\nabla}_{\mathbf{r}_2} \cdot \vec{j}_2^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &+ \sum_{\alpha\alpha' > 0} \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\bar{\alpha}}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\alpha'}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\bar{\alpha}'}(\mathbf{r}_2) (\eta_\alpha + \eta_{\bar{\alpha}} - \eta_{\alpha'} - \eta_{\bar{\alpha}'}) \kappa_\alpha^* \kappa_{\alpha'}. \quad (5.21) \end{aligned}$$

Le choix de l'angle de jauge ne modifie pas les observables dans la théorie TDHF+BCS, mais avec l'approximation FOA, ce choix modifie les observables à deux corps. Le choix utilisé ici, $\eta_\alpha(t) = \epsilon_\alpha(t)$ brise l'équation de continuité à un corps. De façon à conserver cette équation, une possibilité est d'utiliser le choix $\eta_\alpha = 0$.

Lien entre l'équation de continuité à deux corps et les oscillations des probabilités

Pour mieux comprendre les oscillations de la figure 5.7, on établit le lien entre la densité à deux corps et les probabilités de transfert. À partir de la densité à deux corps, on peut définir le nombre total de paires dans la boîte \mathcal{B} ,

$$\langle \hat{\mathcal{N}}_{\mathcal{B}}^{(2)} \rangle = \int_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \mathcal{B}} \langle \Psi | \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1) | \Psi \rangle d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (5.22)$$

Cette observable peut être reliée aux fluctuations du nombre de particules dans la boîte \mathcal{B} , en effet :

$$\langle \hat{\mathcal{N}}_{\mathcal{B}}^{(2)} \rangle = \langle \hat{N}_{\mathcal{B}}^2 \rangle - \langle \hat{N}_{\mathcal{B}} \rangle = \sigma_{\mathcal{B}}^2 + \langle \hat{N}_{\mathcal{B}} \rangle^2 - \langle \hat{N}_{\mathcal{B}} \rangle. \quad (5.23)$$

Ces fluctuations étant liées aux probabilités de transfert par la relation,

$$\sigma_{\mathcal{B}}^2 = \sum_N N^2 P_{\mathcal{B}}(N) - \left(\sum_N N P_{\mathcal{B}}(N) \right)^2. \quad (5.24)$$

Comme on le voit sur la figure 5.7, le nombre moyen de particules transférées est constant après la réaction, ce qui est normale puisque l'évolution FOA conserve l'équation de continuité à un corps. En revanche, on peut établir un lien direct entre la brisure de l'équation de continuité à deux corps, l'évolution du nombre de paires, l'évolution des fluctuations du nombre de particules dans la boîte \mathcal{B} et les oscillations des probabilités de transfert.

En effet, l'évolution du nombre de paires est reliée à l'équation de continuité,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathcal{N}}_{\mathcal{B}}^{(2)}(t) \rangle &= \int_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \mathcal{B}} \frac{d}{dt} \rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \\ &= \int_{\mathbf{r}_1 \in \mathcal{S}, \mathbf{r}_2 \in \mathcal{B}} -2\mathbf{j}_1^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) d\mathbf{S}_1 d\mathbf{r}_2, \end{aligned} \quad (5.25)$$

avec \mathcal{S} le contour de la boîte \mathcal{B} et $d\mathbf{S}_1$ le vecteur perpendiculaire à la surface dirigé en dehors de la boîte en \mathbf{r}_1 . Pour une théorie respectant l'équation de continuité à deux corps, lorsque les deux fragments sont séparés, le courant à deux corps est nul sur le contour de la boîte et donc le nombre de paires dans chacune des boîtes est conservé. Ainsi, les probabilités de transfert devraient rester constantes après la collision.

Les oscillations des probabilités de transfert de la figure 5.7 s'expliquent donc par la brisure de l'équation de continuité à deux corps. Comme on l'a vu précédemment, il existe un moyen simple de conserver cette propriété avec le choix de jauge $\eta_\alpha = 0$.

Choix de l'angle de Jauge pour la théorie FOA

Sur la figure 5.8, les fluctuations calculées avec le choix de jauge $\eta_\alpha=0$ sont constantes après la réaction. Cependant, un résultat non-physique persiste, en effet, les résultats physiques ne

5.3. Inclusion de l'appariement

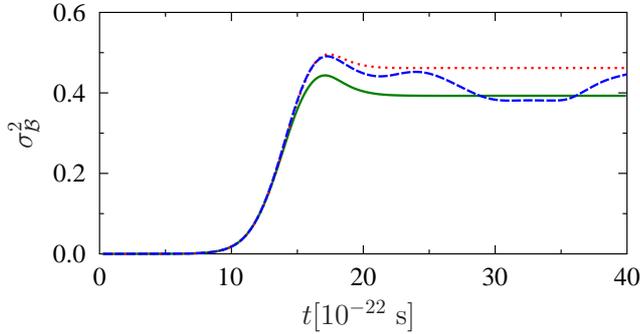


FIG. 5.8 – Fluctuations du nombre de particules au cours du temps pour le choix de jauge $\eta_\alpha=\epsilon_\alpha$ (courbe en tirets bleus) et pour $\eta_\alpha=0$ avec une distance initiale de 30,4 fm (courbe continue verte) et de 48 fm (courbe en pointillés rouges).

doivent pas dépendre de la distance initiale entre les deux noyaux. Or sur la figure 5.8, les résultats dépendent fortement de d_{ini} .

Nous faisons donc face à une difficulté spécifique des méthodes avec appariement. Dans le cas FOA, nous voyons que des choix spécifiques d'angle de jauge possèdent des comportements non-physique :

1. $\eta_\alpha=\epsilon_\alpha$: Les résultats sont indépendants de la distance initiale, mais oscillent après la réaction.
2. $\eta_\alpha=0$: Les résultats dépendent de la distance initiale, mais restent constants après la réaction.

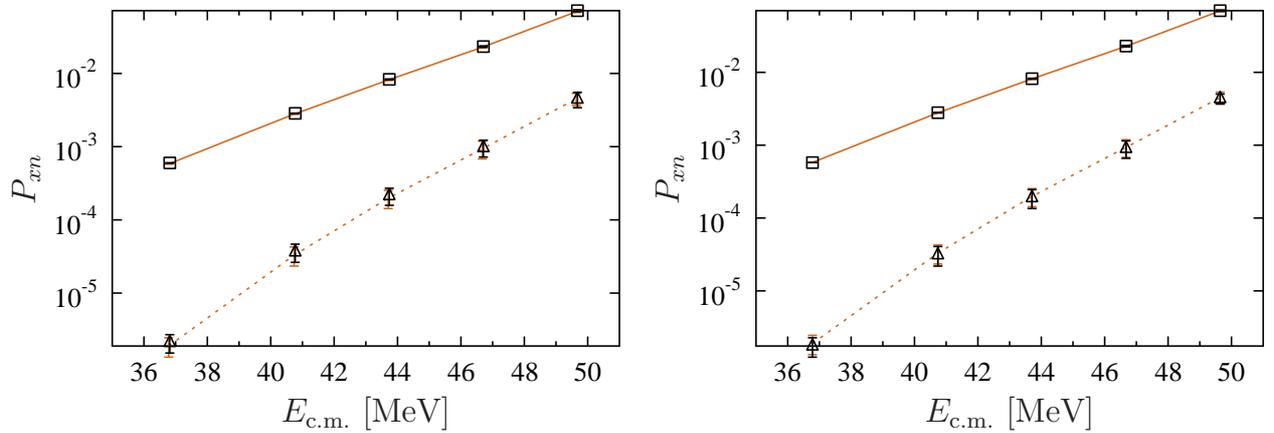


FIG. 5.9 – Probabilités de transfert d'un neutron (ligne continue marron) et de deux neutrons (ligne en pointillés marrons). Ces calculs obtenus avec les paramètres numériques standards sont comparés aux simulations utilisant une distance initiale plus petite (28 fm) sur la figure de gauche et en utilisant un espace plus grand $67,2 \times 28,8 \times 28,8 \text{ fm}^3$ sur la figure de droite avec des carrés et des triangles noirs respectivement pour les probabilités de transférer un ou deux neutrons.

Un moyen simple de palier ces oscillations consiste à moyennner les résultats au cours du

temps après la réaction pour le choix (1) ou de moyenner vis à vis de la distance initiale pour le choix (2). La méthode la moins couteuse étant la première, c'est celle-ci que nous allons utiliser. Des incertitudes seront ajoutées à la valeur moyenne calculée et seront calculées comme l'écart type des résultats au cours du temps.

Les résultats pour la réaction $^{40}\text{Ca}+^{46}\text{Ca}$ sont tracés sur la figure 5.9 où divers aspects numériques sont testés. On voit sur cette figure que les oscillations (représentées par les barres d'incertitudes) restent assez faibles. De façon à tester l'effet de l'appariement sans mélanger les effets dus à la déformation, nous allons utiliser la théorie de l'occupation moyenne présentée au chapitre précédent section 4.3.3. Cette théorie brise le nombre de particules de la même façon que BCS, il est donc nécessaire d'utiliser une méthode de double projection présentée en annexe A.2.3.

5.4 Effets systématiques de l'appariement sur une chaîne isotopique, réaction $^{40}\text{Ca}+^A\text{Ca}$

De façon à étudier l'effet de l'appariement et les possibles effets de structure, nous allons étudier systématiquement les réactions $^{40}\text{Ca}+^A\text{Ca}$, avec A entre 40 et 48. La structure de ces noyaux peut être décrite en première approximation comme un cœur inerte de ^{40}Ca avec une couche de valence la $1f_{7/2}$.

5.4.1 Détermination de la force d'appariement

La force d'appariement est ajustée ici uniquement sur les propriétés de la chaîne isotopique du calcium. La propriété choisie ici est le gap à 5 points (équation (3.39)) calculé à partir des masses expérimentales. Ce gap est calculé pour la théorie HF+BCS à partir des énergies de liaison des noyaux pairs et impairs. Pour calculer les noyaux possédant un nombre de neutron impair, une méthode de blocking simple a été utilisée. Elle consiste à supposer que la particule non appariée se situe sur une orbitale proche de l'énergie de Fermi. Cette orbitale aura donc un nombre d'occupation $n_\alpha + n_{\bar{\alpha}}=1$ et ne participera pas au calcul BCS entre les particules et orbitales restantes.

La force V_0^{nn} de chacune des trois interactions de volume, de surface et mixte est ajustée sur le ^{44}Ca . Pour l'interaction d'appariement entre proton, l'interaction ajustée sur toute la charte a été utilisée (valeurs du tableau 3.2), mais ne joue aucun rôle puisque la chaîne isotopique du calcium correspond à $Z=20$ qui est un nombre magique. Il n'y a donc pas d'appariement proton. Le résultat de cet ajustement est présenté sur la figure 5.10 avec les paramètres suivants : Pour l'interaction de volume $V_0^{nn}=-585 \text{ MeV fm}^3$, mixte $V_0^{nn}=-798 \text{ MeV fm}^3$ et de surface $V_0^{nn}=-1256 \text{ MeV fm}^3$.

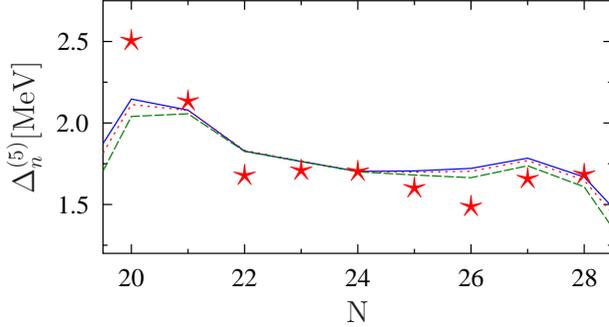


FIG. 5.10 – Gaps à 5 points obtenus expérimentalement (étoiles rouges) et théoriquement pour la chaîne isotopique du calcium. Les résultats théoriques avec une interaction volumique, mixte et surfacique sont présentés respectivement par une ligne continue verte, des pointillés bleus et des tirets rouges.

Même si le ^{40}Ca possède de l'appariement avec BCS, dans la suite de cette étude, le ^{40}Ca sera décrit sans appariement.

5.4.2 Effet du type d'interaction d'appariement

Ces trois interactions donnent lieu à des propriétés différentes des noyaux et on peut s'attendre à ce que les résultats dépendent du type d'interaction choisi. Pour tester cela, la réaction $^{40}\text{Ca}+^{46}\text{Ca}$ a été simulée pour les trois types d'interaction. Les résultats sont tracés sur la figure 5.11.

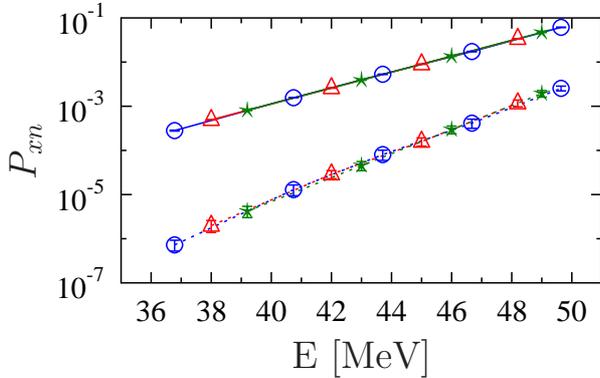


FIG. 5.11 – Comparaison des différentes probabilités de transfert P_{1n} et P_{2n} en fonction de l'énergie de centre de masse pour la réaction $^{40}\text{Ca}+^{46}\text{Ca}$. Les résultats sont obtenus en utilisant les interactions de volume (cercles bleus), surface (étoiles vertes) et mixte (triangles rouges).

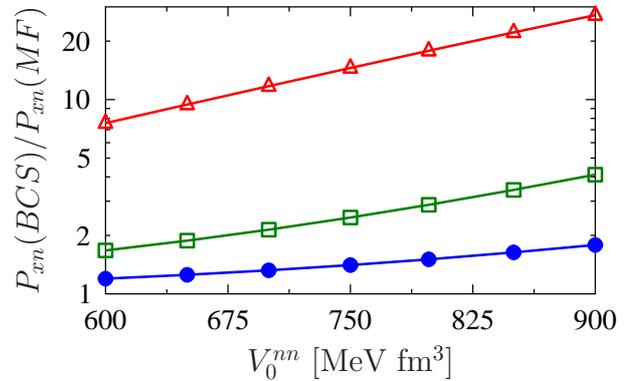
Cette figure montre que les résultats sont indépendants du type de force d'appariement utilisé. Cela montre que si des interactions différentes sont ajustées pour reproduire le gap sur un noyau alors les taux de transfert sont identiques. Puisque les résultats sont insensibles au type d'appariement utilisé, dans la suite on prendra l'interaction mixte.

5.4.3 Influence de l'intensité de l'interaction d'appariement

Même si le type d'interaction d'appariement n'influence que peu les réactions de transfert dans le cas que nous avons considéré, l'intensité de la force influence les taux de transfert. Sur la figure 5.12, les rapports entre les probabilités avec et sans appariement sont tracés en

fonction de la force d'appariement. Trois calculs sont systématiquement effectués, le premier avec appariement (TDHF+BCS avec l'approximation FOA), le deuxième sans appariement avec la théorie de l'occupation moyenne et un troisième calcul qui consiste à négliger la densité anormale dans le calcul des probabilités. Pour cette dernière, l'évolution FOA est effectuée, puis les probabilités sont calculées à partir des nombres d'occupation de BCS et la méthode décrite en annexe A.2.4. Ainsi les observables à un corps sont identiques à celles de BCS et le seul rôle de l'appariement provient de la fragmentation des nombres d'occupation induite par l'appariement.

FIG. 5.12 – Rapport entre les probabilités calculées en tenant compte de l'appariement et les probabilités sans appariement en fonction de l'intensité de la force d'appariement pour la réaction $^{40}\text{Ca}+^{46}\text{Ca}$ à une énergie de $E_{c.m.}=43,7$ MeV. $P_{1n}(\text{BCS})/P_{1n}(\text{MF})$ est tracé par des points bleus et $P_{2n}(\text{BCS})/P_{2n}(\text{MF})$ est tracé en négligeant (carrés verts) ou non (triangles rouges) la densité anormale.



Les rapports tracés sur la figure 5.12 représentent les augmentations des probabilités dues à l'appariement. On peut discerner deux effets : (i) l'augmentation de la probabilité de transfert d'un neutron qui est due aux effets de fragmentation des nombres d'occupation. En effet, les nucléons situés sur des orbitales moins liées sont susceptibles d'être transférés plus facilement. (ii) l'augmentation de la probabilité de transfert d'une paire de neutrons due aux corrélations induites par la densité anormale non nulle. De façon à séparer les deux contributions, les probabilités calculées avec les nombres d'occupation BCS sans tenir compte des densités anormales sont tracées avec des carrés verts sur la figure 5.12. On s'aperçoit ainsi qu'une partie de l'augmentation de P_{2n} avec l'appariement provient de la fragmentation des nombres d'occupation. Néanmoins la majeure partie est due aux corrélations d'appariement.

5.4.4 Effet de structure

De façon à décrire les effets systématiques de structure, les probabilités de transfert avec et sans appariement sont tracées sur la figure 5.13 pour toutes les réactions $^{40}\text{Ca}+^{42,44,46,48}\text{Ca}$. Les effets de l'appariement précédemment décrits sont systématiquement obtenus pour toute la chaîne isotopique : (i) une augmentation de P_{1n} due à la fragmentation des nombres d'occupation, (ii) une augmentation de P_{2n} due principalement aux corrélations.

Il est à noter qu'avec la théorie TDHF+BCS, la relation $P_2 \propto P_1^2$ n'est plus respectée, le facteur d'augmentation P_2/P_1^2 n'est pas indépendant de l'énergie dans le centre de masse, alors

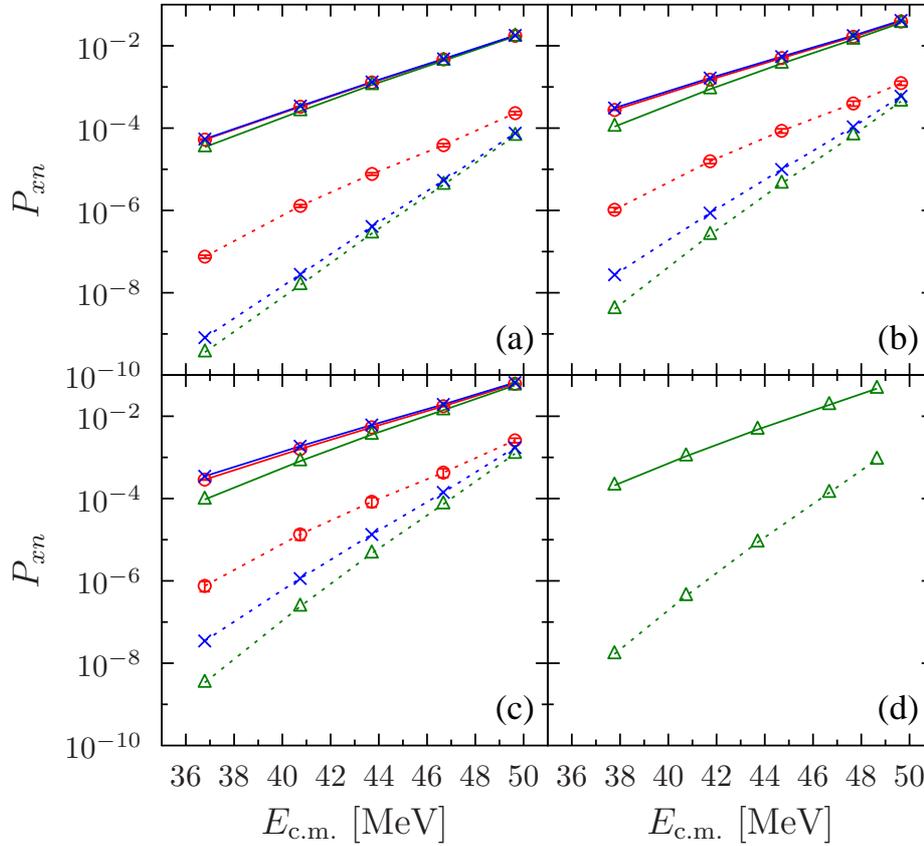


FIG. 5.13 – Probabilités de transfert d'une (P_{1n}) et de deux particules (P_{2n}) en fonction de l'énergie dans le centre de masse pour les réactions (a) $^{40}\text{Ca}+^{42}\text{Ca}$, (b) $^{40}\text{Ca}+^{44}\text{Ca}$, (c) $^{40}\text{Ca}+^{46}\text{Ca}$ et (d) $^{40}\text{Ca}+^{48}\text{Ca}$. Les résultats avec appariement en négligeant (croix bleues) ou non (cercles rouges) la densité anormale sont systématiquement comparés avec le calcul sans appariement (triangles verts). Pour la figure (d), les deux noyaux sont magiques, par conséquent seule l'évolution sans appariement est tracée.

qu'expérimentalement cela semble être le cas [16, 144, 124].

Pour comparer les différentes réactions entre elles, il est nécessaire de se placer à une énergie fixe en dessous de la barrière de fusion. Pour cela la barrière est systématiquement déduite des calculs TDHF+BCS.

Effet de l'appariement sur la barrière coulombienne

L'effet de l'appariement sur la barrière de fusion est systématiquement étudié ici pour les réactions $^{40}\text{Ca}+^A\text{Ca}$. Pour obtenir la barrière, la technique décrite dans la référence [4] est utilisée. Elle consiste à déterminer l'énergie minimale pour laquelle le système fusionne avec

TDHF (ici TDHF+BCS). En effet, pour les théories de champ moyen et au delà, les trajectoires obtenues sont classiques pour les variables collectives telles que la distance relative entre les deux noyaux. Par conséquent, pour les énergies en dessous de la barrière de fusion, les deux noyaux se séparent après la collision, et pour les énergies plus hautes que la barrière, les deux noyaux fusionnent. Par dichotomie, il est alors simple de déterminer la barrière de fusion.

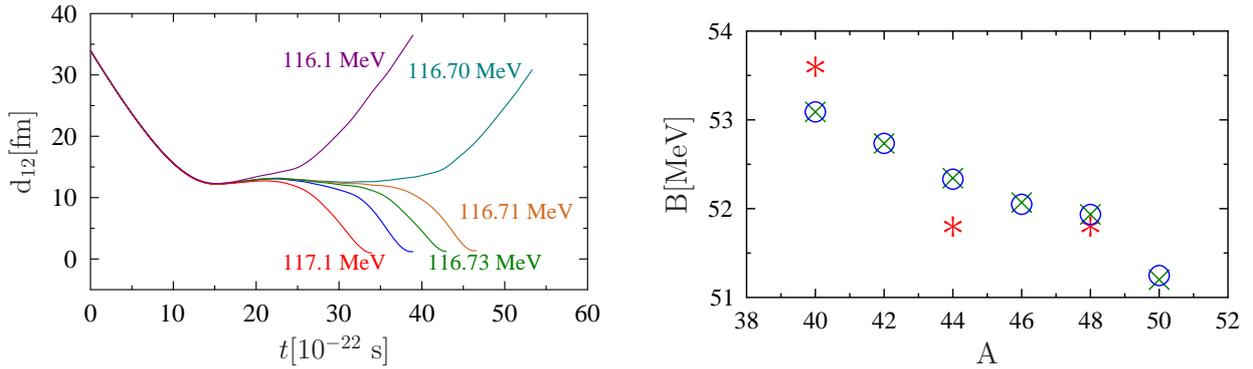


FIG. 5.14 – Figure de gauche : Distance entre les deux fragments au cours de la réaction $^{40}\text{Ca}+^{116}\text{Sn}$ pour plusieurs énergies du centre de masse. Dans ce cas, l'énergie seuil se situe entre 116,70 MeV et 117,1 MeV. Figure de droite : hauteur de la barrière de fusion obtenue par cette méthode. Les résultats avec appariement (cercles bleus) et sans appariement (croix vertes) sont comparés aux données expérimentales [145] (étoiles rouges).

La figure 5.14 montre que les théories de champ moyen dynamique reproduisent assez bien les barrières. Dans cette figure, les calculs avec appariement sont systématiquement comparés aux cas sans appariement, on voit ainsi qu'il n'y a quasiment pas d'effet de l'appariement pour ces calculs, puisque les calculs TDHF+BCS donnent des résultats quasiment identiques à ceux pour lesquels l'appariement n'est pas pris en compte.

Courbe en cloche

Pour déterminer les effets de l'appariement sur une chaîne isotopique, le rapport $P_{2n}(BCS)/P_{2n}(HF)$ est systématiquement tracé pour une énergie de 4 et 6 MeV en dessous de la barrière sur la figure 5.15. La courbe en cloche obtenue est typique des effets de l'appariement, par exemple, le gap d'appariement,

$$\Delta_{BCS} = \frac{\sum_{k>0} \kappa_k \Delta_k}{\sum_{k>0} \kappa_k}, \quad (5.26)$$

tracé sur la figure 5.15(a), possède le même comportement sur la chaîne isotopique : une courbe en cloche entre deux nombres magiques. Cette similitude montre que l'augmentation des probabilités de transfert dépend directement du gap d'appariement. Elle montre également que

5.4. Effets systématiques de l'appariement sur une chaîne isotopique, réaction $^{40}\text{Ca}+^A\text{Ca}$

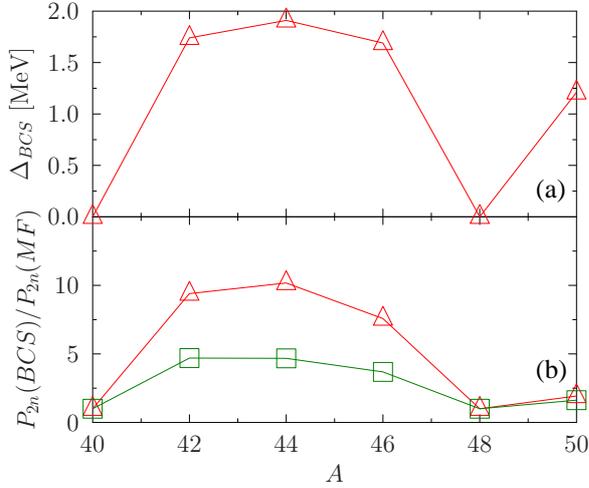


FIG. 5.15 – (a) Gaps moyen pour les neutrons obtenus par BCS (équation (5.26)) en fonction de la masse le long de la chaîne isotopique des calciums. (b) Rapport entre la probabilité de transfert de deux neutrons obtenue avec et sans appariement pour deux énergies en dessous de la barrière de fusion 4 MeV (carrés verts) et 6 MeV (triangles rouges).

l'augmentation de P_{2n} dépend fortement de l'énergie $E_{c.m.}$. En particulier, plus l'énergie est basse et plus l'effet relatif de l'appariement est fort.

5.4.5 Relation entre P_{2n} et P_{1n}^2

Expérimentalement, il n'est pas possible de discerner le transfert de paire simultané ou séquentiel. En général, la probabilité de transfert de deux particules est comparée à $(P_{1n})^2$. $P_{2n}=(P_{1n})^2$ est alors considéré comme la limite où le transfert de paires est totalement séquentiel. Le rapport $P_{2n}/(P_{1n})^2$ est tracé sur la figure 5.16 pour toutes les réactions avec et sans appariement. Plusieurs enseignements peuvent être tirés de cette figure, (i) ce rapport n'est pas constant

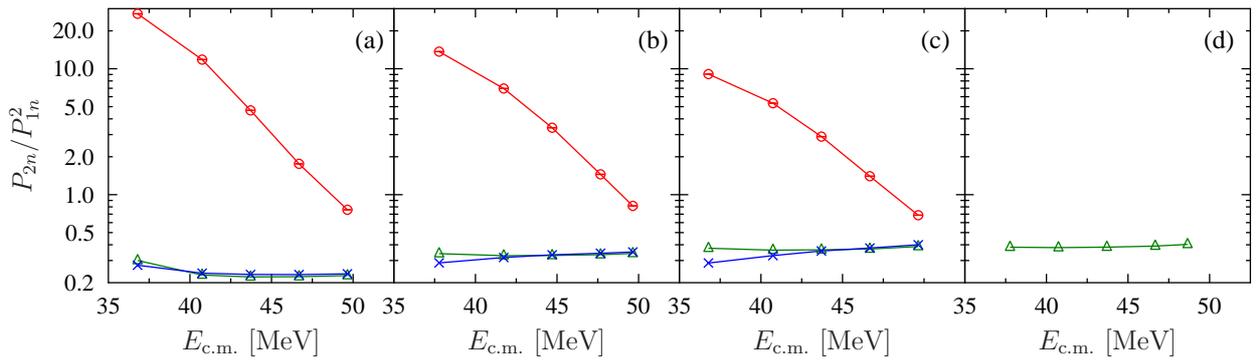


FIG. 5.16 – Rapports $P_{2n}/(P_{1n})^2$ en fonction de l'énergie du centre de masse pour différentes réactions : (a) $^{40}\text{Ca}+^{42}\text{Ca}$, (b) $^{40}\text{Ca}+^{44}\text{Ca}$, (c) $^{40}\text{Ca}+^{46}\text{Ca}$ et (d) $^{40}\text{Ca}+^{48}\text{Ca}$. Les résultats avec appariement en négligeant (croix bleus) ou non (cercles rouges) les corrélations sont comparés avec les résultats sans appariement (triangles verts).

en fonction de $E_{c.m.}$ lorsque les corrélations sont prises en compte (ii) lorsque les corrélations

sont négligées les deux calculs avec et sans appariement donnent les mêmes résultats, (iii) sans les corrélations le rapport est inférieur à 1.

Il est possible de comprendre de façon simple le cas sans appariement. Pour cela, supposons N_v neutrons de valence sur la couche $1f_{7/2}$ ayant chacun une probabilité p d'être transférés sur un des N_f états libres du ^{40}Ca ($N_f=8$). En négligeant les états à un corps de plus haute énergie et en supposant que le ^{40}Ca est un cœur inerte, la combinatoire nous donne les probabilités de transfert,

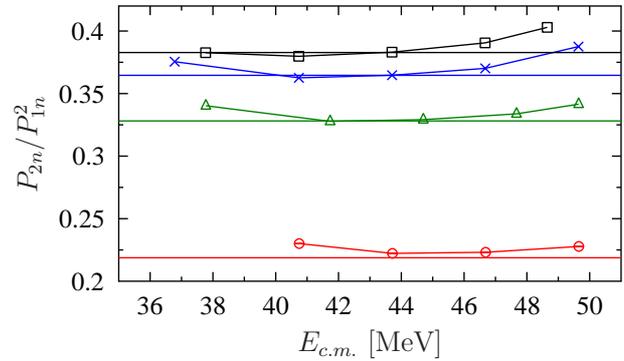
$$P_{xn} = \frac{N_v!}{x!(N_v-x)!} \frac{N_f!}{(N_f-x)!} p^x (1-p)^{N_v-x}. \quad (5.27)$$

Avec le facteur $\frac{N_f!}{(N_f-x)!}$ provenant du principe de Pauli. Le rapport entre les probabilités est alors,

$$\begin{aligned} \frac{P_{2n}}{(P_{1n})^2} &= \frac{1}{2} \frac{(N_v-1)}{N_v} \frac{(N_f-1)}{N_f} \frac{1}{(1-p)^{N_v}}, \\ &\simeq \frac{1}{2} \frac{(N_v-1)}{N_v} \frac{(N_f-1)}{N_f}, \end{aligned} \quad (5.28)$$

pour $p \ll 1$ et est donc prédit constant.

FIG. 5.17 – Rapports $P_{2n}/(P_{1n})^2$ en fonction de l'énergie de centre de masse pour la réaction $^{42}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ (cercles rouges), $^{44}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ (triangles verts), $^{46}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ (croix bleues) et $^{48}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ (carrés noirs) obtenus avec TDHF. Les lignes horizontales correspondent dans chaque cas à la valeur obtenue par la combinatoire (équation (5.28)) avec $N_f=8$ et $N_v=x$ pour la réaction $^{40+x}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$.



Ce rapport est comparé avec celui obtenu avec TDHF pour toutes les réactions $^{40+x}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ sur la figure 5.17, les résultats sont alors très bien reproduits par cette formule simple. Néanmoins, le cas des réactions $^{42,44,46,48}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ est relativement simple du fait qu'une seule orbitale prend part durant la réaction. En général, il n'est pas trivial d'obtenir une relation entre P_{2n} et P_{1n}^2 , en effet si plusieurs états non dégénérés interviennent de la part des deux fragments avec des probabilités différentes de transfert, il est alors impossible de connaître *a priori* la relation entre P_{2n} et P_{1n}^2 .

Cette analyse montre donc que (i) la formule simpliste $P_{2n}=P_{1n}^2$ pour le transfert séquentiel est fautive, (ii) dans le cas où un grand nombre de nucléons participe à la réaction on obtient la relation $P_{2n}=P_{1n}^2/2$, (iii) dans les cas simples où le nombre de nucléons participant à la réaction est connu et où chaque nucléon a la même probabilité de transfert alors il est possible de connaître grâce à la combinatoire le taux de transfert séquentiel.

5.5 Réaction $^{96}\text{Zr}+^{40}\text{Ca}$

L'une des motivations de ce travail étant de pouvoir comparer une théorie microscopique avec appariement aux données récentes [16]. La réaction $^{96}\text{Zr}+^{40}\text{Ca}$ a été simulée avec la théorie FOA avec l'interaction mixte d'appariement du tableau 3.2 et est comparée aux données expérimentales [16] sur la figure 5.18. Il faut noter que pour cette réaction, il n'a pas été possible d'utiliser la théorie TDHF. En effet, avec HF et la fonctionnelle Sly4d, le ^{96}Zr est déformé de façon octupolaire. Le calcul aurait donc été beaucoup plus complexe puisqu'il aurait été nécessaire de moyennner les résultats selon toutes les orientations possibles du ^{96}Zr . Les résultats avec appariement sans tenir compte des corrélations sont néanmoins tracés sur la figure de droite avec des triangles rouges.

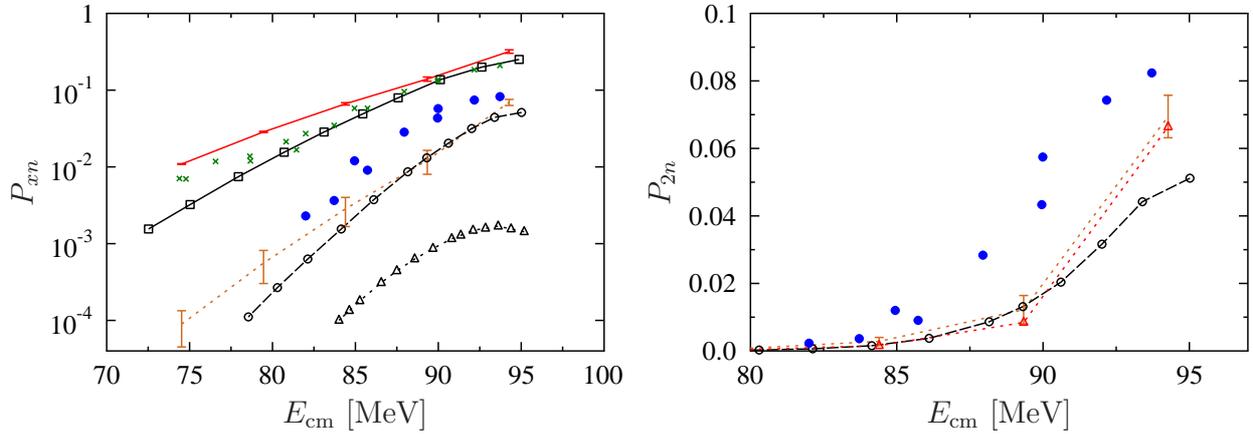


FIG. 5.18 – Figure de gauche : probabilités de transfert en fonction de l'énergie du centre de masse pour une collision avec un paramètre d'impact nul. Les données expérimentales [16] sont tracées pour P_{1n} avec des croix vertes et pour P_{2n} avec des points bleus. Les résultats de TDHF+BCS sont présentés par une ligne continue rouge pour P_{1n} et en pointillés oranges pour P_{2n} . Les résultats théoriques de modèle en couche avec traitement semi classique de la réaction obtenus dans la référence [16] sont aussi tracés. Ces résultats sont présentés par des carrés noirs pour le transfert d'un neutron, par des triangles noirs pour le transfert de deux neutrons où seul le transfert entre les états fondamentaux est pris en compte et par des cercles noirs pour le transfert où le transfert entre l'état fondamental et le premier état $0+$ est pris en compte. Figure de droite : même figure, en échelle linéaire pour la probabilité de transfert de deux neutrons. Le résultat avec appariement où la densité anormale est négligée est tracé avec des triangles rouges.

Cette figure montre que la probabilité de transfert d'un neutron est assez bien reproduite par les deux calculs théoriques. Il faut noter que pour le résultat TDHF+BCS aucun paramètre n'est ajusté aux données expérimentales. Il est probable que la différence entre les

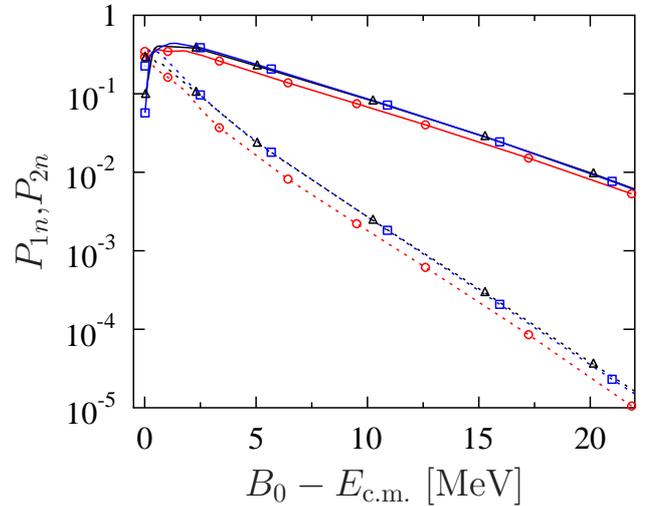
points expérimentaux et la théorie TDHF+BCS provient d'une erreur sur les énergies des états individuels.

Pour la probabilité de transfert de deux neutrons, la situation est différente, aucune des deux théories ne reproduit les données expérimentales et il y a en moyenne un facteur 4 entre les résultats expérimentaux et les résultats théoriques. Il faut noter cependant que la situation est meilleure lorsque les corrélations sont prises en compte. Il est intéressant de noter que les deux calculs théoriques donnent des résultats très proches alors que deux stratégies différentes sont utilisées. Dans nos calculs, la structure et la dynamique sont décrits par le même formalisme tandis que les résultats de la référence [16] sont obtenus en utilisant un modèle en couche incluant l'appariement et la réaction est traitée avec une approche semi classique.

Le désaccord entre les deux théories et les résultats expérimentaux semble montrer qu'un effet qui n'est pas pris en compte par les deux approches joue un rôle important. On peut s'attendre à ce que des corrélations plus complexes aient lieu lors de la réaction et augmentent le transfert de particules corrélées. Pour incorporer ces effets, il serait nécessaire d'utiliser la théorie TDDM présentée à la section 1.3.4 ou le champ moyen stochastique [146].

5.6 Probabilités de transfert au voisinage de la barrière

FIG. 5.19 – Probabilités de transfert de P_{1n} (lignes continues) et P_{2n} (lignes en pointillés) en fonction de $B_0 - E_{c.m.}$ pour les réactions $^{40}\text{Ca}+^{116}\text{Sn}$ (cercles rouges), $^{40}\text{Ca}+^{124}\text{Sn}$ (triangles noirs) et $^{40}\text{Ca}+^{130}\text{Sn}$ (carrés bleus).



De façon à comprendre, les interactions entre le transfert de nucléons et la fusion, on se propose ici d'étudier les réactions de $^{40}\text{Ca}+^{116,124,130}\text{Sn}$ avec les différents isotopes de l'étain superfluide. Pour ces trois systèmes, les barrières obtenues avec TDHF+BCS sont $116,41 \pm 0,07$ (^{116}Sn), $114,69 \pm 0,04$ (^{124}Sn), et $113,92 \pm 0,02$ (^{130}Sn). Ces trois isotopes possèdent des rapports N/Z très différents, ce qui explique que sur la figure 5.19, les trois réactions aient des probabilités de transfert différentes. Sur cette figure, on remarque aussi que pour des énergies très proches de la barrière, la probabilité de transférer une paire de neutrons est plus importante que la

probabilité de transférer un seul neutron. Une étude plus fine peut être effectuée avec la figure 5.20 où les probabilités sont tracées pour des énergies très proches de la barrière. On voit ainsi qu'il existe une zone d'énergie pour laquelle le transfert d'une paire de neutrons domine. Cette zone s'agrandissant à mesure que le noyau devient riche en neutrons.

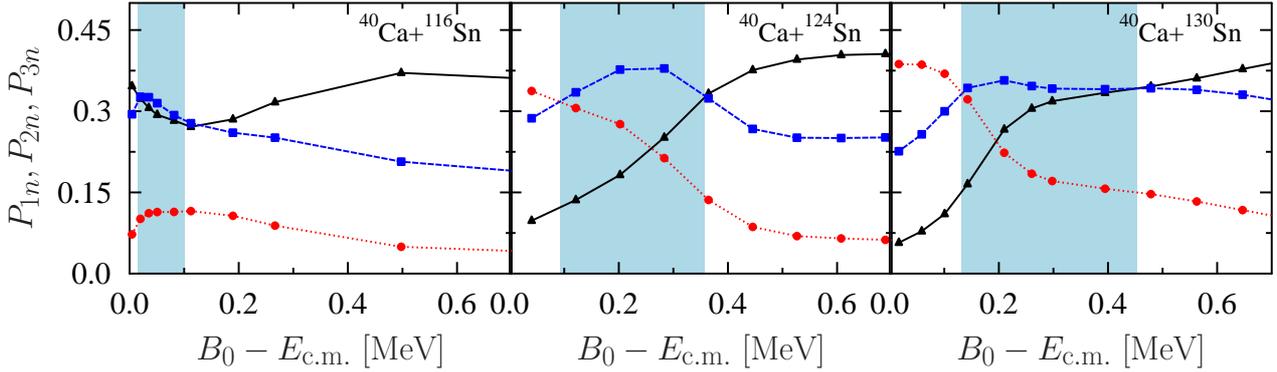


FIG. 5.20 – Probabilités de transfert de 1, 2 et 3 neutrons tracés respectivement avec des triangles noirs, carrés bleus et des points rouges en fonction de l'énergie sous la barrière pour les réactions $^{40}\text{Ca} + ^{116,124,130}\text{Sn}$. Dans chaque cas, la partie coloriée en bleu correspond à la zone en énergie où le transfert de paire domine (extrait de [147]).

Ce résultat microscopique permet de valider une supposition théorique d'un modèle macroscopique [147] et a montré que pour une énergie précise proche de la barrière il est possible de sonder majoritairement le transfert de paires.

5.7 Conclusion

Dans ce chapitre, l'effet de l'appariement sur les réactions de transfert/fusion a été étudié avec la théorie TDHF+BCS en utilisant l'approximation des nombres d'occupation constants. Une méthode de projection a été développée qui permet de s'affranchir du problème de la non exacte conservation du nombre de particules avec BCS. Il a été montré que l'appariement joue un rôle important dans le transfert de particules. Plusieurs effets ont été mis en évidence (i) un effet de la fragmentation des nombres d'occupation, ce qui modifie la probabilité de transfert d'une particule ainsi que le transfert séquentiel de deux particules (ii) un effet des corrélations d'appariement qui augmentent de façon importante la probabilité de transférer deux particules.

La théorie TDHF+BCS a ensuite été comparée aux résultats expérimentaux. Cette comparaison a montré que la théorie TDHF+BCS permet de reproduire correctement le transfert individuel de particules, cependant la probabilité de transférer une paire est sous-estimée. Ce phénomène s'explique par le manque de corrélations plus complexes par la théorie BCS. En

effet, on peut s'attendre à ce qu'une théorie plus riche en corrélations telle que TDDM puisse reproduire correctement les probabilités de transfert.

Conclusion

Dans cette thèse, nous nous sommes donnés comme objectif d'incorporer l'appariement aux descriptions en champ moyen des phénomènes dynamiques en physique nucléaire et d'étudier l'influence de cette appariement sur ces phénomènes. Dans un premier temps, nous avons établi les différentes théories dynamiques de champ moyen avec et sans appariement avec la hiérarchie suivante : dynamique exacte, TDDM, TDHFB, TDHF+BCS et TDHF. Cette hiérarchie allant de la dynamique la plus riche en phénomènes physiques à la plus simple.

Cette étude théorique a permis de mettre en exergue les avantages et limitations de chaque théorie, notamment la brisure de la symétrie associée au nombre de particules pour les théories basées sur la notion de quasi-particules : TDHFB et TDHF+BCS. Comme nous l'avons vu dans la suite, cette brisure de symétrie induit un mélange de configurations entre états possédant des nombres de particules différents ce qui provoque une erreur systématique des observables pour le modèle d'évaporation du chapitre 2, pour les réactions de transfert au chapitre 5 et dans une moindre mesure pour les spectres des résonances géantes au chapitre 4. Cette erreur pouvant être partiellement corrigée en projetant l'état de vide de quasi-particule sur le bon nombre de particules. Néanmoins pour aller plus loin, il serait nécessaire d'utiliser une théorie qui préserve exactement le nombre de particules de façon auto-cohérente.

Dans un deuxième temps, les théories avec appariement ont été testées dans un modèle d'évaporation à une dimension. Ce modèle, de par sa simplicité peut être résolu exactement dans le cas de deux particules. Cette étude a permis de mettre à jour une pathologie de la dynamique TDHF+BCS, la non conservation de l'équation de continuité. Cette non conservation entraîne une oscillation du nombre de particules évaporées ce qui est un phénomène non physique. De la même manière, on peut s'attendre à ce que pour tous phénomènes physiques où il est nécessaire de couper un système en deux parties (réactions de transfert, fission, cassure), la théorie TDHF+BCS présentera un comportement non physique. Pour remédier à ce problème, une approximation supplémentaire est proposée, la FOA, elle consiste à figer les nombres d'occupation au cours du temps. Il a été montré dans le cadre de ce modèle à une dimension que cette dynamique est compétitive par rapport à TDHFB, même si cette comparaison dans le cadre d'un système de deux particules doit être prise avec précaution. Cette étude a aussi permis de clarifier certaines ambiguïtés numériques de la théorie TDHFB, notamment concernant

le potentiel imaginaire.

Le cadre de la théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité a ensuite été présenté. Cette théorie permet d'augmenter le pouvoir prédictif des méthodes de champ moyen avec et sans appariement en partant d'une interaction effective. Un exemple d'applications statiques a été effectué pour décrire la forme des noyaux sur toutes la charte. En particulier, une polarisation de la diffusivité le long de la surface a été mise en évidence pour tous les noyaux déformés. Cette polarisation est de la même façon que la déformation influencée par l'appariement. En effet l'appariement en provoquant une fragmentation des nombres d'occupation a tendance à atténuer ou supprimer la déformation. Cette étude a permis d'illustrer la compétition entre la déformation et l'appariement dans les noyaux ainsi que la richesse des phénomènes pouvant être pris en compte dans les approches microscopiques de type EDF.

La théorie de l'énergie fonctionnelle de la densité avec la méthode TDHF+BCS a ensuite été présentée pour les cas réalistes en trois dimensions et appliquée au cas des résonances géantes. La comparaison de l'évolution en figeant ou non les nombres d'occupation a mis en évidence un couplage de la réponse quadrupolaire de basse énergie aux oscillations de paires. Une étude générale des résonances géantes isoscalaires et isovecteurs a ensuite été effectuée pour tous les noyaux de la charte. Cette étude étant motivée par le faible coût de la théorie TDHF+BCS comparé à la QRPA, pour laquelle il est encore difficile de traiter toutes les formes de noyaux. Tout d'abord, nous nous sommes focalisés sur les noyaux sphériques. Une description complète a alors été effectuée du pic principal le long de charte des noyaux. Des effets de structure et d'appariement ont ainsi été mis en évidence et décrits précisément. Concernant les noyaux déformés, la fragmentation du pic principal a été systématiquement étudiée et comparée à des modèles macroscopiques. De cette manière, il a été montré une influence non négligeable des déformations hexadécupolaire et d'ordre supérieur sur l'écart entre les différentes composantes de la réponse. Il est à noter que cette étude a tenu compte des déformations triaxiales ce qui est à la limite des applications de QRPA.

Cette étude a aussi permis de comparer la théorie TDHF+BCS à la théorie QRPA équivalente à TDHFB. Due à la restriction des corrélations à la base canonique, on pourrait s'attendre à ce que la théorie TDHF+BCS donne des résultats moins bons que la QRPA. À l'exception des spectres de basse énergie, il a été montré à plusieurs reprises dans cette étude que les résultats TDHF+BCS étaient très proches des résultats de QRPA et ce y compris pour des noyaux éloignés de la vallée de stabilité. De plus, il a été montré que le principal effet de l'appariement provenait des conditions initiales : (i) la fragmentation des nombres d'occupation (ii) la déformation. Cela confirme que l'approximation BCS qui consiste à supposer diagonale la matrice d'appariement Δ est une bonne approximation, et que le problème du gaz de BCS peut être résolu avec une fonction de coupure appropriée. C'est donc cette théorie TDHF+BCS qui a été utilisée pour étudier les réactions de transfert.

Une difficulté pour étudier les réactions de transfert est la détermination des probabilités de transfert, pour cela la méthode utilisant des projecteurs pour TDHF a été étendue au cas avec appariement. Deux difficultés ont émergées tout d'abord le calcul du produit scalaire entre deux états tournés, pour cela une méthode utilisant le Pfaffien a été utilisée. Deuxièmement, la brisure de la symétrie associée au nombre de particules, pour résoudre ce problème une méthode de double projection a été mise en place. La mise en place de toutes ces méthodes a permis d'étudier les réactions de transfert lorsqu'un des deux noyaux est superfluide. Une étude sur un cas modèle, $^{40}\text{Ca}+^A\text{Ca}$ a été effectué, nous avons ainsi pu montrer que l'appariement a tendance à augmenter les probabilités de transfert d'un et deux nucléons. En particulier, le deuxième peut augmenter de plusieurs ordres de grandeur. Un lien direct a pu être établi entre le facteur d'augmentation dû à l'appariement et le gap BCS. Enfin, pour les réactions $^{116,124,130}\text{Sn}+^{40}\text{Ca}$, une étude à des énergies proches de la barrière a montré que le transfert de paires peut éventuellement dominer sur les autres canaux ce qui ouvre des perspectives nouvelles pour l'étude des corrélations. Néanmoins, la comparaison avec les données expérimentales a montré que le transfert de paires est sous-estimé par cette approche bien que le transfert individuel soit assez bien reproduit.

À travers ces différentes études pour divers phénomènes de dynamique nucléaire, nous avons pu établir différentes sources d'effets de l'appariement sur la dynamique nucléaire :

- Un effet à travers la forme du noyau qui change les conditions initiales des différentes dynamiques. Ainsi la prise en compte de l'appariement permet d'obtenir une forme réaliste des noyaux lors de la dynamique.
- Un effet à travers la fragmentation des nombres d'occupation, ainsi les états au dessus de l'énergie de Fermi peuvent être peuplés. Ce phénomène permet alors aux particules appariées de s'échapper plus facilement du noyau (chapitre 2), d'être plus facilement transférées (chapitre 5) et de lisser les effets de structure (chapitre 4).
- Un effet direct des corrélations, ce qui augmente la probabilité de transférer une paire de nucléons (chapitre 5).
- Un effet des excitations de paires, qui peuvent se coupler aux modes collectifs de basse énergie (chapitre 4)

Cette étude a permis de fournir une description standardisée et cohérente avec les modèles de structure. En perspective, on peut donc suggérer d'autres applications de la théorie TDHF+BCS aux phénomènes de décroissance, de fission, aux autres modes collectifs, etc ...

Néanmoins, la description de la dynamique nucléaire en ne tenant compte que de l'évolution du champ moyen et de l'appariement possède certaines limitations. Notamment le fait que la dynamique ne s'effectue qu'avec un unique champ moyen. Par exemple, pour les réactions, il ne peut y avoir qu'une seule trajectoire des deux fragments. Ainsi les fluctuations quantiques dans l'espace collectif des différentes observables sont sous-estimées avec les approches de champ moyen avec appariement. Il est probable que la prise en compte de ces fluctuations permettrait

de mieux reproduire les probabilités de transfert de paires et les largeurs des résonances géantes.

De façon à améliorer la description de ces phénomènes, il est donc nécessaire d'aller plus loin dans la description des corrélations. Pour cela plusieurs pistes sont envisageables :

- TDDM, présenté au chapitre 1 qui permettrait de tenir compte des termes de collision lors de la réaction [41, 42, 43].
- Le champ moyen stochastique avec prise en compte de l'appariement, qui tiendrait compte des collisions et des fluctuations [148].
- Les méthodes multi-configurationnelles dépendantes du temps, utilisées en physique atomique, permettraient de tenir compte des corrélations de façon exacte [149].

Il faut néanmoins garder à l'esprit que ces théories sont beaucoup plus coûteuses numériquement que TDHF+BCS.

Annexe A

Méthodes de restauration de symétries associées au nombre de particules.

Dans cette annexe, on présente les différentes équations relatives à la restaurations de la symétrie associée au nombre de particules. Pour cela, nous allons utiliser la méthode de Fomenko [150] qui consiste à utiliser le projecteur :

$$\hat{P}(N) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(\hat{N}-N)} d\varphi. \quad (\text{A.1})$$

Cette intégrale étant numériquement discrétisée,

$$\hat{P}(N) = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M e^{i\frac{2\pi l}{M}(\hat{N}-N)}. \quad (\text{A.2})$$

Toutes les discrétisations ont été effectuées avec un nombre de points $M=20$, il a été testé que les résultats étaient identiques si on augmente le nombre de points.

L'état projeté sur le bon nombre de particules s'écrit comme,

$$|N\rangle = \hat{P}(N)|\Psi\rangle. \quad (\text{A.3})$$

On montre à présent comment calculer la composante de l'état BCS qui contient N particules,

$$P(N) = \langle BCS|\hat{P}(N)|BCS\rangle \quad \text{avec} \quad |BCS\rangle = \prod_{\alpha} (u_{\alpha} + v_{\alpha}a_{\alpha}^{\dagger}a_{\alpha}^{\dagger})|-\rangle. \quad (\text{A.4})$$

En développant l'exponentiel du nombre de particules ,

$$e^{i\varphi\hat{N}} = \prod_{\alpha} (1 + (e^{i\varphi} - 1)a_{\alpha}^{\dagger}a_{\alpha}), \quad (\text{A.5})$$

on obtient les propriétés,

$$e^{i\varphi\hat{N}} a_\alpha^\dagger = e^{i\varphi} a_\alpha^\dagger e^{i\varphi\hat{N}}, \quad \text{et} \quad e^{i\varphi\hat{N}} a_\alpha = e^{-i\varphi} a_\alpha e^{i\varphi\hat{N}}, \quad (\text{A.6})$$

ce qui nous permet de calculer l'amplitude de la composante à N particules,

$$P(N) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i\varphi N} \langle - | \prod_{\alpha>0} (u_\alpha^* + v_\alpha^* a_{\bar{\alpha}} a_\alpha) e^{i\varphi\hat{N}} \prod_{\alpha'>0} (u_{\alpha'}^* + v_{\alpha'}^* a_{\bar{\alpha}'} a_{\alpha'}) | - \rangle d\varphi, \quad (\text{A.7})$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i\varphi N} \langle - | \prod_{\alpha>0} (u_\alpha^* + v_\alpha^* a_{\bar{\alpha}} a_\alpha) \prod_{\alpha'>0} (u_{\alpha'} + e^{i2\varphi} v_{\alpha'} a_{\bar{\alpha}'} a_{\alpha'}) | - \rangle d\varphi, \quad (\text{A.8})$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i\varphi N} \prod_{\alpha>0} (1 - n_\alpha + n_\alpha e^{i2\varphi}) d\varphi. \quad (\text{A.9})$$

A.1 Valeur d'un opérateur à un corps sur un état projeté

A.1.1 Cas général

Pour calculer une observable à un corps sur l'état projeté, il nous faut calculer :

$$O^{(N)} = \langle \Psi | \hat{P}(N) \hat{O} \hat{P}(N) | \Psi \rangle \quad \text{avec} \quad \hat{O} = \int \int O(x, x') \hat{\rho}(x, x') dx dx'. \quad (\text{A.10})$$

L'opérateur \hat{O} conservant le nombre de particules, on peut simplifier cette expression :

$$O^{(N)} = \int \int O(x, x') \langle \Psi | \hat{\rho}(x, x') \hat{P}(N) | \Psi \rangle dx dx'. \quad (\text{A.11})$$

L'opérateur à un corps projeté sur le bon nombre de particules peut alors s'écrire [151] :

$$\langle \Psi | \hat{\rho}(x, x') \hat{P}(N) | \Psi \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} x(\varphi) C(\varphi) \rho d\varphi}{\int_0^{2\pi} x(\varphi) d\varphi}, \quad (\text{A.12})$$

avec

$$x(\varphi) = \frac{e^{i\varphi(M-N)}}{2\pi \sqrt{\det C(\varphi)}} \quad \text{et} \quad C(\varphi) = (\rho + e^{-2i\varphi}(1 - \rho))^{-1}. \quad (\text{A.13})$$

M étant la taille de la matrice densité à un corps.

A.1.2 Projection dans le cas BCS

Dans le cas où le vide de quasi-particule est écrit simplement comme,

$$|\Psi\rangle = \prod_{\alpha} (u_{\alpha} + v_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\bar{\alpha}}^{\dagger}) | - \rangle, \quad (\text{A.14})$$

la densité à un corps projetée sur le bon nombre de particules s'écrit simplement en fonction des nombres d'occupation projetés,

$$\rho^{(N)}(\mathbf{r}) = \sum_i n_i^{(N)} |\varphi_i(\mathbf{r})|. \quad (\text{A.15})$$

Les $n_i^{(N)}$ sont obtenus à partir des relations d'anticommutation,

$$a_\beta^\dagger a_\beta e^{i\varphi \hat{N}} |BCS\rangle = a_\beta^\dagger a_\beta \prod_{\alpha>0} (u_\alpha + v_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger e^{2i\varphi}) |-\rangle, \quad (\text{A.16})$$

$$= v_\beta e^{2i\varphi} a_\beta^\dagger a_\beta^\dagger \prod_{\alpha \neq \beta, \alpha>0} (u_\alpha + v_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger e^{2i\varphi}) |-\rangle. \quad (\text{A.17})$$

On obtient ainsi une expression des nombres d'occupation de l'état projeté,

$$n_\beta^{(N)} = \frac{1}{P(N)} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} n_\beta \prod_{\alpha \neq \beta, \alpha>0} (1 - n_\alpha + n_\alpha e^{i2\varphi}) d\varphi. \quad (\text{A.18})$$

Avec la normalisation $P(N)$ obtenue avec l'équation (A.4).

A.2 Projection sur un nombre de particules dans une boîte

Dans le chapitre 5, il est nécessaire de calculer la probabilité $P_{\mathcal{B}}(N_{\mathcal{B}})$ de mesurer un nombre de particules $N_{\mathcal{B}}$ dans une boîte \mathcal{B} , c'est à dire l'amplitude de la composante à $N_{\mathcal{B}}$ particules dans l'état à N corps $|\Psi\rangle$. Pour cela une projection est effectuée,

$$P_{\mathcal{B}}(N) = \langle \Psi | \hat{P}_{\mathcal{B}}(N) | \Psi \rangle, \quad (\text{A.19})$$

avec

$$\hat{P}_{\mathcal{B}}(N) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(\hat{N}_{\mathcal{B}} - N)} d\varphi. \quad (\text{A.20})$$

Le nombre de particules dans la boîte étant donné par,

$$\hat{N}_{\mathcal{B}} = \sum_{r,s} \Theta(\mathbf{r}) \Psi_s^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_s(\mathbf{r}), \quad (\text{A.21})$$

avec $\Theta(\mathbf{r})=1$ dans la boîte et 0 en dehors. Pour chaque théorie, on obtient,

$$\hat{P}_{\mathcal{B}}(N) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i\varphi N} \langle \Psi | \Psi_{\mathcal{B}}(\varphi) \rangle d\varphi, \quad (\text{A.22})$$

avec l'état tourné dans l'espace de jauge $|\Psi_{\mathcal{B}}(\varphi)\rangle = e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}} |\Psi\rangle$, la difficulté consistant à calculer le produit scalaire $\langle \Psi | \Psi_{\mathcal{B}}(\varphi) \rangle$ pour chacune des théories.

A.2.1 Projection dans le cas HF

Pour calculer le produit scalaire $\langle \Psi | \Psi_{\mathcal{B}}(\varphi) \rangle$ un état HF, $|\Psi\rangle = \prod_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} |-\rangle$, il est tout d'abord nécessaire d'établir les propriétés suivantes,

$$e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}} = \prod_{\mathbf{r}, s} (1 + (e^{i\varphi \Theta(\mathbf{r})} - 1) \Psi_s^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_s(\mathbf{r})), \quad (\text{A.23})$$

$$e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}} \Psi_s^{\dagger}(\mathbf{r}) = e^{i\varphi \Theta(\mathbf{r})} \Psi_s^{\dagger}(\mathbf{r}) e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}}. \quad (\text{A.24})$$

Il est ainsi possible d'obtenir les états individuels,

$$a_i^{\dagger} = \sum_s \int \varphi_i^s(\mathbf{r}) \Psi_s^{\dagger}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (\text{A.25})$$

tournés de l'angle φ dans la boîte,

$$e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}} a_i^{\dagger} = b_i^{\dagger} e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}} \quad \text{avec} \quad b_i^{\dagger} = \sum_s \int e^{i\varphi \Theta(\mathbf{r})} \varphi_i^s(\mathbf{r}) \Psi_s^{\dagger}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{A.26})$$

Le déterminant de Slater tourné s'écrit alors,

$$|\Psi_{\mathcal{B}}(\varphi)\rangle = \prod_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} |-\rangle. \quad (\text{A.27})$$

On obtient ainsi le produit scalaire,

$$\langle \Psi | \Psi_{\mathcal{B}}(\varphi) \rangle = \det(F), \quad (\text{A.28})$$

où la matrice F est définie comme,

$$e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}} a_i^{\dagger} e^{-i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}} = \sum_j F_{ij} a_j^{\dagger}. \quad (\text{A.29})$$

Il est possible de montrer que,

$$F_{ij} = \sum_s \int d\mathbf{r} \varphi_i^*(\mathbf{r}, s) \varphi_j(\mathbf{r}, s) e^{i\varphi \Theta(\mathbf{r})} = \delta_{ij} + \langle i|j \rangle_{\mathcal{B}} (e^{i\varphi} - 1). \quad (\text{A.30})$$

$\langle i|j \rangle_{\mathcal{B}}$ étant le produit scalaire entre les fonctions d'onde i et j dans la boîte \mathcal{B} . On retrouve ainsi les mêmes équations que dans la référence [6].

A.2.2 Projection dans le cas BCS

Avec un état BCS, l'état tourné s'écrit,

$$|\Psi_{\mathcal{B}}(\varphi)\rangle = \prod_{\alpha > 0} (u_{\alpha} + v_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\bar{\alpha}}^{\dagger}) |-\rangle, \quad (\text{A.31})$$

avec la même définition de b_α^\dagger que précédemment. Pour calculer le produit scalaire entre deux états de quasi-particules, il n'existait jusqu'à récemment que la formule de Onishi [152]. Cette formule ne permet d'obtenir que la norme du produit scalaire entre deux états de quasi-particules. Or pour les projections, la phase est primordiale. Il n'est donc pas possible d'utiliser cette formule.

Récemment une méthode utilisant le Pfaffien a été développée [153, 154, 155]. Le produit scalaire s'écrit alors,

$$\langle \Psi | \Psi_{\mathcal{B}}(\varphi) \rangle = \frac{(-1)^n}{\prod_\alpha v_\alpha^2} \text{pf} \begin{bmatrix} \mathcal{K} & \mathcal{M}(\varphi) \\ -\mathcal{M}^t(\varphi) & -\mathcal{K}^* \end{bmatrix}, \quad (\text{A.32})$$

avec les matrices \mathcal{K} et \mathcal{M} de taille $2n \times 2n$ où n est le nombre d'états de quasi-particules α avec $\alpha > 0$. Ces matrices se décomposent en blocs 2×2 ,

$$\mathcal{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & [\kappa_{i\bar{i}} \delta_{ij}] \\ -[\kappa_{i\bar{i}} \delta_{ij}] & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{M}(\varphi) = \begin{bmatrix} [v_i v_j F_{ij}(\varphi)] & [v_i v_{\bar{j}} F_{i\bar{j}}(\varphi)] \\ [v_{\bar{i}} v_j F_{\bar{i}j}(\varphi)] & [v_{\bar{i}} v_{\bar{j}} F_{\bar{i}\bar{j}}(\varphi)] \end{bmatrix}, \quad (\text{A.33})$$

avec la matrice F définie précédemment. Le Pfaffien étant un outil mathématique complexe, le programme fortran de la référence [156] a été utilisé pour le calcul numérique du Pfaffien. Comme il est mentionné au chapitre 5, cette méthode pose certains problèmes dus au mélange de configurations possédant des nombres de particules différents dans l'état BCS. Il est alors nécessaire d'utiliser une méthode de double projection.

A.2.3 Projection dans le cas BCS avec double projection

La méthode de double projection consiste à considérer l'état BCS projeté sur le nombre de particules totale,

$$|N_{\text{tot}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \Psi | \hat{P}(N_{\text{tot}}) | \Psi \rangle}} \hat{P}(N_{\text{tot}}) | \Psi \rangle. \quad (\text{A.34})$$

Puis de calculer la probabilité d'obtenir $N_{\mathcal{B}}$ particules sur cet état,

$$P_{\mathcal{B}}^{N_{\text{tot}}}(N_{\mathcal{B}}) = \langle N_{\text{tot}} | \hat{P}_{\mathcal{B}}(N_{\mathcal{B}}) | N_{\text{tot}} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{P}_{\mathcal{B}}(N_{\mathcal{B}}) \hat{P}(N_{\text{tot}}) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \hat{P}(N_{\text{tot}}) | \Psi \rangle}. \quad (\text{A.35})$$

Où l'on utilise le fait que les deux projecteurs $\hat{P}_{\mathcal{B}}(N_{\mathcal{B}})$ et $\hat{P}(N_{\text{tot}})$ commutent. Il est alors nécessaire d'intégrer par rapport à deux angles de jauge,

$$P_{\mathcal{B}}^{N_{\text{tot}}}(N_{\mathcal{B}}) = \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(\varphi N_{\text{tot}} - \varphi' N_{\mathcal{B}})} \langle \Psi | \Psi(\varphi, \varphi') \rangle d\varphi d\varphi', \quad (\text{A.36})$$

où l'état $|\Psi(\varphi, \varphi')\rangle$ est tourné d'un angle φ dans l'espace total et d'un angle φ' dans la boîte \mathcal{B} ,

$$|\Psi(\varphi, \varphi')\rangle = e^{i(\varphi\hat{N} + \varphi'\hat{N}_{\mathcal{B}})}|\Psi\rangle, \quad (\text{A.37})$$

et \mathcal{N} la normalisation de l'état projeté $\mathcal{N} = \langle\Psi|\hat{P}(N_{\text{tot}})|\Psi\rangle$. En utilisant la même méthode que pour obtenir l'équation (A.30), on obtient,

$$F_{ij}(\varphi, \varphi') = e^{i\varphi} \left(\delta_{ij} + \langle i|j\rangle_{\mathcal{B}}(e^{i\varphi'} - 1) \right). \quad (\text{A.38})$$

Le produit scalaire $\langle\Psi|\Psi(\varphi, \varphi')\rangle$ étant obtenu avec les mêmes équations (A.32) et (A.33).

A.2.4 Projection dans le cas de la théorie d'occupation moyenne

La théorie de l'occupation moyenne suppose que la densité à un corps s'écrit,

$$\hat{\rho} = \sum_i |\varphi_i\rangle n_i \langle\varphi_i|, \quad (\text{A.39})$$

et qu'il n'y a pas de corrélation entre les particules. La densité à N corps peut s'écrire,

$$\hat{D} = \frac{1}{Z} \exp\left(-\sum_i \lambda_i a_i^\dagger a_i\right). \quad (\text{A.40})$$

Avec les facteurs λ_i reliés au nombres d'occupations par [157],

$$n_i = \frac{1}{1 + e^{\lambda_i}}, \quad (\text{A.41})$$

la densité peut ainsi s'écrire,

$$\hat{D} = \frac{1}{Z} \prod_i [1 + (e^{-\lambda_i} - 1)\hat{n}_i]. \quad (\text{A.42})$$

La valeur moyenne de l'opérateur de projection est calculé à partir de la trace de la densité,

$$P_{\mathcal{B}}(N_{\mathcal{B}}) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{\mathcal{B}}(N_{\mathcal{B}}) \hat{D} \hat{P}_{\mathcal{B}}(N_{\mathcal{B}}) \right) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{\mathcal{B}}(N_{\mathcal{B}}) \hat{D} \right), \quad (\text{A.43})$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(\varphi N_{\mathcal{B}})} \text{Tr} \left(e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}} \hat{D} \right) d\varphi. \quad (\text{A.44})$$

Si on réécrit l'opérateur $e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}}$ comme :

$$e^{i\varphi \hat{N}_{\mathcal{B}}} = e^{-\sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} L_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}')}, \quad (\text{A.45})$$

A.2. Projection sur un nombre de particules dans une boîte

avec $L_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = -i\varphi\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}\Theta(\mathbf{r})$. D'après la référence [158] équation (A.16) (démontré dans la référence [11]),

$$\mathrm{Tr} \left(e^{i\varphi\hat{N}_B} \hat{D} \right) = \frac{1}{z} \exp[\mathrm{Tr} \ln(1 + e^{-L}e^{-M})] = \frac{1}{z} \det(1 + e^{-L}e^{-M}). \quad (\text{A.46})$$

Dans la base position, $e^{-L} = [e^{i\varphi\Theta(\mathbf{r})}\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}]_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$. Ce qui donne dans la base canonique :

$$\begin{aligned} [e^{-L}]_{ij} &= \sum_{\mathbf{r}} \varphi_i^*(\mathbf{r})\varphi_j(\mathbf{r})e^{i\varphi\Theta(\mathbf{r})} = \sum_{\mathbf{r}} \varphi_i^*(\mathbf{r})\varphi_j(\mathbf{r}) (1 + (e^{i\varphi} - 1)\Theta(\mathbf{r})), \\ &= \delta_{ij} + \langle i|j \rangle_B (e^{i\varphi} - 1) = F_{ij}. \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Avec la relation $[e^{-M}]_{ij} = \delta_{ij}e^{-\lambda_i} = \delta_{ij}\frac{n_i}{1-n_i}$, on obtient finalement,

$$\mathrm{Tr} \left(e^{i\varphi\hat{N}_B} \hat{D} \right) = \frac{1}{z} \det \left(\delta_{ij} + F_{ij} \frac{n_j}{1-n_j} \right), \quad (\text{A.48})$$

avec $z = \prod_i (1 + \frac{n_i}{1-n_i})$. On peut réécrire le résultat comme,

$$\mathrm{Tr} \left(e^{i\varphi\hat{N}_B} \hat{D} \right) = \det \left(\frac{\delta_{ij} + F_{ij} \frac{n_j}{1-n_j}}{1 + \frac{n_j}{1-n_j}} \right) = \det ((1 - n_j)\delta_{ij} + F_{ij}n_j). \quad (\text{A.49})$$

Dans la limite d'un déterminant de Slater, $n_i=1$ ou 0 , on retrouve bien la relation (A.28). Il faut noter que même si il n'y a pas d'appariement dans cette théorie, le nombre de particules n'est pas un bon nombre quantique comme on peut le voir sur la figure A.1. Sur cette figure, la probabilité d'obtenir N particules dans l'espace totale pour un noyau de ^{46}Ca est calculé. Par conséquent, les mêmes problèmes d'interprétation de BCS (voir 5.3.1) se poseront avec cette théorie.

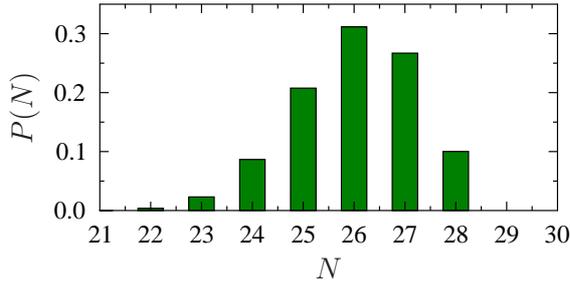


FIG. A.1 – Distribution des différentes composantes en nombre de particules pour le ^{46}Ca avec la théorie d'occupation moyenne.

Pour résoudre ce problème, la même technique de double projection de BCS est utilisée. Dans ce cas, la probabilité devient,

$$P_B^{N_{\text{tot}}}(N_B) = \frac{\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(\varphi N_{\text{tot}} - \varphi' N_B)} \mathrm{Tr} \left(e^{i\varphi\hat{N}} e^{i\varphi'\hat{N}_B} \hat{D} \right) d\varphi d\varphi'}{\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(\varphi N_{\text{tot}})} \mathrm{Tr} \left(e^{i\varphi\hat{N}} \hat{D} \right) d\varphi}. \quad (\text{A.50})$$

avec

$$\text{Tr} \left(e^{i\varphi \hat{N}} e^{i\varphi' \hat{N}_B} \hat{D} \right) = \det \left((1 - n_j) \delta_{ij} + F_{ij}(\varphi, \varphi') n_j \right). \quad (\text{A.51})$$

$F_{ij}(\varphi, \varphi')$ étant la matrice définie par l'équation (A.38).

Annexe B

Opérateur d'excitation quadrupolaire

B.1 Opérateurs réels

La réponse GQR avec la QRPA est généralement étudiée avec les opérateurs d'excitation exprimés en fonction des harmoniques sphériques :

$$Q_{2K}^{IS} = e \sum_{i=1}^A r_i^2 Y_{2K}(\Omega_i) \quad (\text{B.1})$$

$$Q_{2K}^{IV} = \frac{eN}{A} \sum_{i=1}^Z r_i^2 Y_{2K}(\Omega_i) - \frac{eZ}{A} \sum_{i=1}^N r_i^2 Y_{2K}(\Omega_i), \quad (\text{B.2})$$

avec $K = 0, \pm 1$ ou ± 2 .

Pour les noyaux sphériques, la fonction de réponse obtenue pour les différents K est identique. En revanche, il y a une levée de dégénérescence pour les noyaux déformés. Ici pour des raisons de simplicité, on remplace les harmoniques sphériques complexes par les harmoniques sphériques réelles :

$$d_{z^2}^{K=0} = Y_{20} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \frac{-x^2 - y^2 + 2z^2}{r^2} \quad (\text{B.3})$$

$$d_{xz}^{K=-1} = \sqrt{\frac{1}{2}} (Y_{2-1} - Y_{21}) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \frac{xz}{r^2} \quad (\text{B.4})$$

$$d_{yz}^{K=1} = i \sqrt{\frac{1}{2}} (Y_{2-1} + Y_{21}) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \frac{yz}{r^2} \quad (\text{B.5})$$

$$d_{xy}^{K=-2} = i \sqrt{\frac{1}{2}} (Y_{2-2} - Y_{22}) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \frac{xy}{r^2} \quad (\text{B.6})$$

$$d_{x^2-y^2}^{K=2} = \sqrt{\frac{1}{2}} (Y_{2-2} + Y_{22}) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \frac{x^2 - y^2}{r^2}. \quad (\text{B.7})$$

Il faut noter que dans ce travail, on a défini autrement le signe du nombre quantique K . On obtient donc un jeu de cinq opérateurs que l'on écrit : $Q_{z^2}^{IS/IV}$, $Q_{xz}^{IS/IV}$, $Q_{yz}^{IS/IV}$, $Q_{xy}^{IS/IV}$ et $Q_{x^2-z^2}^{IS/IV}$ où les Y sont remplacés par les d dans les équations (B.1) et (B.2).

La connexion entre la fonction de réponse obtenue avec les harmoniques sphériques standards et les harmoniques sphériques réelles peut être obtenue de façon simple :

$$S(Q_{z^2}^{IS/IV}, E) = S(Q_{20}^{IS/IV}, E) \quad (\text{B.8})$$

$$S(Q_{xz}^{IS/IV}, E) + S(Q_{yz}^{IS/IV}, E) = S(Q_{21}^{IS/IV}, E) + S(Q_{2-1}^{IS/IV}, E) \quad (\text{B.9})$$

$$S(Q_{xy}^{IS/IV}, E) + S(Q_{x^2-y^2}^{IS/IV}, E) = S(Q_{22}^{IS/IV}, E) + S(Q_{2-2}^{IS/IV}, E). \quad (\text{B.10})$$

Si le système possède une symétrie axiale selon l'axe \vec{z} alors on obtient simplement,

$$S(Q_{xz}^{IS/IV}, E) = S(Q_{yz}^{IS/IV}, E) = S(Q_{21}^{IS/IV}, E) = S(Q_{2-1}^{IS/IV}, E) \quad (\text{B.11})$$

$$S(Q_{xy}^{IS/IV}, E) = S(Q_{x^2-y^2}^{IS/IV}, E) = S(Q_{22}^{IS/IV}, E) = S(Q_{2-2}^{IS/IV}, E). \quad (\text{B.12})$$

B.2 Règles de somme

Pour un opérateur isoscalaire \hat{Q} , la règle de somme pondérée, $m_1(Q)$ peut être déterminée grâce à la formule générale [73] :

$$\begin{aligned} m_1^Q &= \sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) |\langle \Psi_{\nu} | Q | \Psi_0 \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{2} \langle \Psi_0 | [Q, [H, Q]] | \Psi_0 \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \langle \Psi_0 | \sum_k |\vec{\nabla}_k Q(\mathbf{r}_k)|^2 | \Psi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

avec les vecteurs et valeurs propres de l'Hamiltonien $H|\Psi_{\nu}\rangle = E_{\nu}|\Psi_{\nu}\rangle$. Pour chacun des opérateurs isoscalaires quadrupolaires, on obtient :

$$m_1^{z^2} = e^2 \frac{5\hbar^2}{8\pi m} (2A\langle r^2 \rangle + \langle Q_{20} \rangle) \quad (\text{B.14})$$

$$m_1^{xz} = e^2 \frac{5\hbar^2}{16\pi m} (4A\langle r^2 \rangle + \langle Q_{20} \rangle + 3\langle Q_{22} \rangle) \quad (\text{B.15})$$

$$m_1^{yz} = e^2 \frac{5\hbar^2}{16\pi m} (4A\langle r^2 \rangle + \langle Q_{20} \rangle - 3\langle Q_{22} \rangle) \quad (\text{B.16})$$

$$m_1^{xy} = e^2 \frac{5\hbar^2}{8\pi m} (2A\langle r^2 \rangle - \langle Q_{20} \rangle) \quad (\text{B.17})$$

$$m_1^{x^2-y^2} = e^2 \frac{5\hbar^2}{8\pi m} (2A\langle r^2 \rangle - \langle Q_{20} \rangle). \quad (\text{B.18})$$

On peut noter que dans le cas d'une symétrie sphérique avec $\langle Q_{20} \rangle = \langle Q_{22} \rangle = 0$, les règles de somme sont toutes égales. Dans le cas d'une symétrie axiale $\langle Q_{22} \rangle = 0$, nous avons en plus $m_1^{xz} = m_1^{yz}$ et $m_1^{xy} = m_1^{x^2-y^2}$

Pour les excitations isovectorielles, on peut utiliser les formules générales, tenant en compte des termes de l'interaction de Skyrme qui dépendent de l'impulsion [32] :

$$m_1^Q = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\int |\nabla Q|^2 \rho_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \int |\nabla Q|^2 \rho_p(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right] + C \int |\nabla Q|^2 \rho_n(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (\text{B.19})$$

avec

$$C = \frac{1}{4} (t_1 (1 + \frac{1}{2} x_1) + t_2 (1 + \frac{1}{2} x_2)). \quad (\text{B.20})$$

Les différentes règles de somme obtenues sont :

$$m_1^{z^2} = e^2 \frac{5\hbar^2}{8\pi m} \left(\frac{N^2}{A^2} (2Z \langle r^2 \rangle_p + \langle Q_{20} \rangle_p) + \frac{Z^2}{A^2} (2N \langle r^2 \rangle_n + \langle Q_{20} \rangle_n) \right) + C \frac{5}{16\pi} \int (16z^2 + 4y^2 + 4x^2) \rho_n(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{B.21})$$

$$m_1^{xz} = e^2 \frac{5\hbar^2}{16\pi m} \left(\frac{N^2}{A^2} (4Z \langle r^2 \rangle_p + \langle Q_{20} \rangle_p + 3 \langle Q_{22} \rangle_p) + \frac{Z^2}{A^2} (4N \langle r^2 \rangle_n + \langle Q_{20} \rangle_n + 3 \langle Q_{22} \rangle_n) \right) + C \frac{15}{4\pi} \int (z^2 + x^2) \rho_n(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{B.22})$$

$$m_1^{yz} = e^2 \frac{5\hbar^2}{16\pi m} \left(\frac{N^2}{A^2} (4Z \langle r^2 \rangle_p + \langle Q_{20} \rangle_p - 3 \langle Q_{22} \rangle_p) + \frac{Z^2}{A^2} (4N \langle r^2 \rangle_n + \langle Q_{20} \rangle_n - 3 \langle Q_{22} \rangle_n) \right) + C \frac{15}{4\pi} \int (z^2 + y^2) \rho_n(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{B.23})$$

$$m_1^{xy} = e^2 \frac{5\hbar^2}{8\pi m} \left(\frac{N^2}{A^2} (2Z \langle r^2 \rangle_p - \langle Q_{20} \rangle_p) + \frac{Z^2}{A^2} (2N \langle r^2 \rangle_n - \langle Q_{20} \rangle_n) \right) + C \frac{15}{4\pi} \int (y^2 + x^2) \rho_n(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{B.24})$$

$$m_1^{x^2-y^2} = e^2 \frac{5\hbar^2}{8\pi m} \left(\frac{N^2}{A^2} (2Z \langle r^2 \rangle_p - \langle Q_{20} \rangle_p) + \frac{Z^2}{A^2} (2N \langle r^2 \rangle_n - \langle Q_{20} \rangle_n) \right) + C \frac{15}{4\pi} \int (y^2 + x^2) \rho_n(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{B.25})$$

Les règles de symétries étant les mêmes que pour l'excitation isoscalaire.

Bibliographie

- [1] P.A.M. Dirac. Note on exchange phenomena in the Thomas atom. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 26 :376, 1930.
- [2] P. Bonche, S. Koonin, and J. W. Negele. One-dimensional nuclear dynamics in the time-dependent hartree-fock approximation. *Phys. Rev. C*, 13 :1226–1258, 1976.
- [3] P. Bonche, B. Grammaticos, and S. Koonin. Three-dimensional time-dependent Hartree-Fock calculations of $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ and $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ fusion cross sections. *Phys. Rev. C*, 17 :1700–1705, 1978.
- [4] C. Simenel and B. Avez. Time-dependent Hartree-Fock description of heavy ions fusion. *Int. J. of Mod. Phys. E*, 17(01) :31–40, 2008.
- [5] H. Stöcker, R.Y. Cusson, H.J. Lustig, et al. Fusion-fission, superheavy molecular-capture and symmetric fragmentation in 3D-TDHF calculations of the reactions ^{238}U , ^{208}Pb (4.6-8.0MeV/u) ^{64}Ni , ^{64}Ca . *Zeitschrift fr Physik A Atoms and Nuclei*, 306(3) :235–238, 1982.
- [6] C. Simenel. Particle transfer reactions with the time-dependent Hartree-Fock theory using a particle number projection technique. *Phys. Rev. Lett.*, 105 :192701, 2010.
- [7] A.S. Umar, V.E. Oberacker, and J.A. Maruhn. Neutron transfer dynamics and doorway to fusion in time-dependent hartree-fock theory. *The European Physical Journal A*, 37(2) :245–250, 2008.
- [8] J. Błocki and H. Flocard. Calculations of giant resonances with time-dependent Hartree-Fock . *Physics Letters B*, 85(23) :163 – 166, 1979.
- [9] P.-G. Reinhard, Lu Guo, and J.A. Maruhn. Nuclear giant resonances and linear response. *The European Physical Journal A*, 32(1) :19–23, 2007.
- [10] J. W. Negele. The mean-field theory of nuclear structure and dynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 54 :913–1015, 1982.
- [11] C. Simenel. Nuclear quantum many-body dynamics. *The European Physical Journal A*, 48(11) :1–49, 2012.
- [12] P. Bonche, H. Flocard, and P.H. Heenen. Solution of the Skyrme HF+BCS equation on a 3D mesh . *Computer Physics Communications*, 171(1) :49 – 62, 2005.

-
- [13] S. Hilaire and M. Girod. Large-scale mean-field calculations from proton to neutron drip lines using the D1S Gogny force. *The European Physical Journal A*, 33(2) :237–241, 2007.
- [14] B. Gall, P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, and P.-H. Heenen. Superdeformed rotational bands in the mercury region. A cranked Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov study. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 348(3) :183–197, 1994.
- [15] G. Hupin and D. Lacroix. Number-conserving approach to the pairing problem : Application to Kr and Sn isotopic chains. *Phys. Rev. C*, 86 :024309, 2012.
- [16] L. Corradi, S. Szilner, G. Pollaro, et al. Single and pair neutron transfers at sub-barrier energies. *Phys. Rev. C*, 84 :034603, 2011.
- [17] D.R. Hartree. The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 24 :89, 1928.
- [18] V. Fock. Näherungsmethode zur lösung des quantenmechanischen mehrkörperproblems. *Zeitschrift für Physik*, 61(1-2) :126–148, 1930.
- [19] N.N. Bogoliubov. *JETP*, 7 :41, 1958.
- [20] P. Ring and P. Schuck. *The nuclear many-body problem*. Springer, 2005.
- [21] J.-P. Blaizot and G. Ripka. *Quantum theory of finite systems*, volume 3. Mit Press Cambridge, 1986.
- [22] H. Flocard. Nuclear dynamics by self consistent methods : TDHF and ATDHF. *Nukleonika*, 24 :19–66, 1979.
- [23] B. Avez, C. Simenel, and P. Chomaz. Pairing vibrations study with the time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory. *Phys. Rev. C*, 78 :044318, 2008.
- [24] I. Stetcu, A. Bulgac, P. Magierski, and K. J. Roche. Isovector giant dipole resonance from the 3D time-dependent density functional theory for superfluid nuclei. *Phys. Rev. C*, 84 :051309, 2011.
- [25] Y. Hashimoto. Linear responses in time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov method with Gogny interaction. *The European Physical Journal A*, 48(5) :1–9, 2012.
- [26] C. Simenel, D. Lacroix, and B. Avez. *Quantum Many-Body Dynamics : Applications to Nuclear Reactions*. VDM Verlag, Sarrebruck, 2010. Posted as arXiv :0806.2714.
- [27] K. Hagino and H. Sagawa. Continuum QRPA in the coordinate space representation. *Nuclear Physics A*, 695(1-4) :82 – 94, 2001.
- [28] M. Matsuo. Continuum linear response in coordinate space Hartree-Fock-Bogoliubov formalism for collective excitations in drip-line nuclei. *Nuclear Physics A*, 696(3-4) :371 – 395, 2001.
- [29] M. Grasso, N. Sandulescu, N. Van Giai, and R.J. Liotta. Pairing and continuum effects in nuclei close to the drip line. *Phys. Rev. C*, 64 :064321, 2001.

- [30] E. Khan, N. Sandulescu, M. Grasso, and N. Van Giai. Continuum quasiparticle random phase approximation and the time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov approach. *Phys. Rev. C*, 66 :024309, 2002.
- [31] N. Paar, T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring. Quasiparticle random phase approximation based on the relativistic Hartree-Bogoliubov model. ii. nuclear spin and isospin excitations. *Phys. Rev. C*, 69 :054303, 2004.
- [32] J. Terasaki and J. Engel. Self-consistent description of multipole strength : Systematic calculations. *Phys. Rev. C*, 74 :044301, 2006.
- [33] T. Nakatsukasa and K. Yabana. Giant resonances in the deformed continuum. *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, 20(1) :163–164, 2003.
- [34] S. Péru, G. Gosselin, M. Martini, et al. Giant resonances in ^{238}U within the quasiparticle random-phase approximation with the Gogny force. *Phys. Rev. C*, 83 :014314, 2011.
- [35] S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, et al. Canonical-basis time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory and linear-response calculations. *Phys. Rev. C*, 82 :034306, 2010.
- [36] J. Błocki and H. Flocard. Simple dynamical models including pairing residual interaction. *Nuclear Physics A*, 273(1) :45 – 60, 1976.
- [37] M. Born and H.S. Green. A general kinetic theory of liquids. i. the molecular distribution functions. In *Proc R Soc A*, volume 1946, pages 10–18, 1946.
- [38] N.N. Bogoliubov. Kinetic equations. *J. Phys.(USSR)*, 10 :265, 1946.
- [39] J.G. Kirkwood. The statistical mechanical theory of transport processes i. general theory. *The Journal of Chemical Physics*, 14(3) :180–201, 1946.
- [40] D. Lacroix, S. Ayik, and P. Chomaz. Collective response of nuclei : Comparison between experiments and extended mean-field calculations. *Phys. Rev. C*, 63 :064305, 2001.
- [41] M. Tohyama and A.S. Umar. Fusion window problem in time-dependent Hartree-Fock theory revisited. *Phys. Rev. C*, 65 :037601, 2002.
- [42] M. Assié. *Influence des corrélations entre les nucléons sur les réactions de cassure nucléaire : aspects théorique et expérimentaux*. Thèse, Université Paris Sud - Paris XI, 2008.
- [43] M. Assié and D. Lacroix. Probing neutron correlations through nuclear breakup. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :202501, 2009.
- [44] M. Tohyama and M. Gong. Small amplitude limit of the time dependent density matrix theory. *Zeitschrift für Physik A Atomic Nuclei*, 332(3) :269–274, 1989.
- [45] D. Gambacurta, M. Grasso, and F. Catara. Collective nuclear excitations with Skyrme-second random-phase approximation. *Phys. Rev. C*, 81 :054312, 2010.

-
- [46] P. Papakonstantinou and R. Roth. Second random phase approximation and renormalized realistic interactions. *Physics Letters B*, 671(3) :356 – 360, 2009.
- [47] M. Tohyama and S. Takahara. Relation between density-matrix theory and pairing theory. *Progress of Theoretical Physics*, 112(3) :499–509, 2004.
- [48] K. Washiama. private communication.
- [49] N. Van Giai, P. Chomaz, P.F. Bortignon, F. Zardi, and R.A. Broglia. Direct emission of particles from giant resonances : Theoretical approaches. *Nuclear Physics A*, 482(1-2) :437 – 452, 1988.
- [50] A. Bulgac and Y. Yu. Renormalization of the Hartree-Fock-Bogoliubov equations in the case of a zero range pairing interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :042504, 2002.
- [51] G. Tonini, F. Werner, and Y. Castin. Formation of a vortex lattice in a rotating BCS Fermi gas. *The European Physical Journal D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, 39(2) :283–294, 2006.
- [52] M. Heinen and H.-J. Kull. Radiation boundary conditions for the numerical solution of the three-dimensional time-dependent Schrödinger equation with a localized interaction. *Phys. Rev. E*, 79 :056709, 2009.
- [53] C.I. Pardi and P.D. Stevenson. Continuum time-dependent Hartree-Fock method for giant resonances in spherical nuclei. *Phys. Rev. C*, 87 :014330, 2013.
- [54] T. Nakatsukasa and K. Yabana. Linear response theory in the continuum for deformed nuclei : Green’s function vs time-dependent Hartree-Fock with the absorbing boundary condition. *Phys. Rev. C*, 71 :024301, 2005.
- [55] J.A. Maruhn, P.G. Reinhard, P. D. Stevenson, J.R. Stone, and M.R. Strayer. Dipole giant resonances in deformed heavy nuclei. *Phys. Rev. C*, 71 :064328, 2005.
- [56] J. Dechargé and D. Gogny. Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the D1 effective interaction on spherical nuclei. *Phys. Rev. C*, 21 :1568–1593, 1980.
- [57] T.H.R. Skyrme. The nuclear surface. *Philosophical Magazine*, 1(11) :1043–1054, 1956.
- [58] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136 :B864–B871, 1964.
- [59] D. Lacroix, T. Duguet, and M. Bender. Configuration mixing within the energy density functional formalism : Removing spurious contributions from nondiagonal energy kernels. *Phys. Rev. C*, 79 :044318, 2009.
- [60] M. Bender, T. Duguet, and D. Lacroix. Particle-number restoration within the energy density functional formalism. *Phys. Rev. C*, 79 :044319, 2009.
- [61] T. Duguet, M. Bender, K. Bennaceur, D. Lacroix, and T. Lesinski. Particle-number restoration within the energy density functional formalism : Nonviability of terms depending on noninteger powers of the density matrices. *Phys. Rev. C*, 79 :044320, 2009.

- [62] M. Anguiano, J.L. Egido, and L.M. Robledo. Particle number projection with effective forces. *Nuclear Physics A*, 696(34) :467 – 493, 2001.
- [63] J. Dobaczewski, M. V. Stoitsov, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard. Particle-number projection and the density functional theory. *Phys. Rev. C*, 76 :054315, 2007.
- [64] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer. A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities. *Nuclear Physics A*, 627(4) :710 – 746, 1997.
- [65] P. Bonche, H. Flocard, and P.H. Heenen. Self-consistent calculation of nuclear rotations : The complete yrast line of ^{24}Mg . *Nuclear Physics A*, 467(1) :115 – 135, 1987.
- [66] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet, and H.-B. Hakansson. Towards a better parametrisation of Skyrme-like effective forces : A critical study of the SkM force . *Nuclear Physics A*, 386(1) :79 – 100, 1982.
- [67] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer. A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities . *Nuclear Physics A*, 635(1-2) :231 – 256, 1998.
- [68] K.-H. Kim, T. Otsuka, and P. Bonche. Three-dimensional TDHF calculations for reactions of unstable nuclei. *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, 23(10) :1267, 1997.
- [69] G. F. Bertsch, C. A. Bertulani, W. Nazarewicz, N. Schunck, and M. V. Stoitsov. Odd-even mass differences from self-consistent mean field theory. *Phys. Rev. C*, 79 :034306, 2009.
- [70] M. Grasso. Two-neutron transfer probabilities and spatial-localization effects at the drip line. *Phys. Rev. C*, 87 :064308, 2013.
- [71] J. Dobaczewski, H. Flocard, and J. Treiner. Hartree-Fock-Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line . *Nuclear Physics A*, 422(1) :103 – 139, 1984.
- [72] M. Bender, P.H. Heenen, and P.G. Reinhard. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. *Rev. Mod. Phys.*, 75 :121–180, 2003.
- [73] A. Bohr and A. Mottelson. *Nuclear Structure Vol. 2 : Nuclear Deformations*. World Scientific, Singapore, 1998.
- [74] A. Saxena and V.S. Ramamurthy. Surface diffuseness of deformed and rotating nuclei. *Pramana*, 27(5) :679–684, 1986.
- [75] D. P. Arteaga, E. Khan, and P. Ring. Isovector dipole strength in nuclei with extreme neutron excess. *Phys. Rev. C*, 79 :034311, 2009.
- [76] G. Scamps, D. Lacroix, G. G. Adamian, and N. V. Antonenko. Polarization of the nuclear surface in deformed nuclei. *Phys. Rev. C*, 88 :064327, 2013.

-
- [77] T. Duguet, P. Bonche, P.-H. Heenen, and J. Meyer. Pairing correlations. ii. microscopic analysis of odd-even mass staggering in nuclei. *Phys. Rev. C*, 65 :014311, 2001.
- [78] M. Yamagami, Y. R. Shimizu, and T. Nakatsukasa. Optimal pair density functional for the description of nuclei with large neutron excess. *Phys. Rev. C*, 80 :064301, 2009.
- [79] S. Goriely. Radiative neutron captures by neutron-rich nuclei and the r-process nucleosynthesis. *Physics Letters B*, 436(1-2) :10 – 18, 1998.
- [80] M. N. Harakeh and A. Van der Woode. *Giant Resonances : Fundamental High-Frequency Modes of Nuclear Excitation*, volume 24. Oxford University Press, 2001.
- [81] X. Roca-Maza, M. Brenna, B. K. Agrawal, et al. Giant quadrupole resonances in ^{208}Pb , the nuclear symmetry energy, and the neutron skin thickness. *Phys. Rev. C*, 87 :034301, 2013.
- [82] D. Lacroix, S. Ayik, and Ph. Chomaz. Nuclear collective vibrations in extended mean-field theory. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 52(2) :497 – 563, 2004.
- [83] G. F. Bertsch and R. A. Broglia. *Oscillations in finite quantum systems*. Cambridge University Press, 1994.
- [84] N. Paar, D. Vretenar, E. Khan, and G. Colò. Exotic modes of excitation in atomic nuclei far from stability. *Reports on Progress in Physics*, 70(5) :691, 2007.
- [85] C. Losa, A. Pastore, T. Døssing, E. Vigezzi, and R.A. Broglia. Linear response of light deformed nuclei investigated by self-consistent quasiparticle random-phase approximation. *Phys. Rev. C*, 81 :064307, 2010.
- [86] G. Hupin. *Approches fonctionnelles de la densité pour les systèmes finis appariés*. Thèse, Université de Caen, 2011.
- [87] D. Gambacurta and D. Lacroix. Description of two-particle transfer in superfluid systems. *Phys. Rev. C*, 86 :064320, 2012.
- [88] O. Bohigas, A.M. Lane, and J. Martorell. Sum rules for nuclear collective excitations. *Physics Reports*, 51(5) :267 – 316, 1979.
- [89] G. Colò, L. Cao, N. Van Giai, and L. Capelli. Self-consistent RPA calculations with Skyrme-type interactions : The skyrme_rpa program. *Computer Physics Communications*, 184(1) :142 – 161, 2013.
- [90] T. Sil, S. Shlomo, B. K. Agrawal, and P.-G. Reinhard. Effects of self-consistency violation in Hartree-Fock RPA calculations for nuclear giant resonances revisited. *Phys. Rev. C*, 73 :034316, 2006.
- [91] J. Terasaki and J. Engel. Self-consistent Skyrme quasiparticle random-phase approximation for use in axially symmetric nuclei of arbitrary mass. *Phys. Rev. C*, 82 :034326, 2010.

- [92] S. Raman, C.W. Nestor JR., and P. Tikkanen. Transition probability from the ground to the first-excited 2^+ state of even-even nuclides. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 78(1) :1 – 128, 2001.
- [93] G. F. Bertsch. Nuclear pairing : basic phenomena revisited. *arXiv preprint arXiv :1203.5529*, 2012.
- [94] J. Terasaki, J. Engel, and G. F. Bertsch. Systematics of the first 2^+ excitation in spherical nuclei with the skryme quasiparticle random-phase approximation. *Phys. Rev. C*, 78 :044311, 2008.
- [95] G. F. Bertsch, M. Girod, S. Hilaire, et al. Systematics of the first 2^+ excitation with the Gogny interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 99 :032502, 2007.
- [96] F. E. Bertrand. Giant multipole resonances - perspectives after ten years. *Nuclear Physics A*, 354(1-2) :129 – 156, 1981.
- [97] T. Li, U. Garg, Y. Liu, et al. Isoscalar giant resonances in the Sn nuclei and implications for the asymmetry term in the nuclear-matter incompressibility. *Phys. Rev. C*, 81 :034309, 2010.
- [98] Y.-W. Lui, D. H. Youngblood, S. Shlomo, et al. Isoscalar giant resonances in ^{48}Ca . *Phys. Rev. C*, 83 :044327, 2011.
- [99] M. Buenerd. The compression modes in nuclei - an experimental review. *J. Phys. Colloques*, 45 :C4-115-C4-134, 1984.
- [100] D. H. Youngblood, P. Bogucki, J. D. Bronson, et al. Systematics of the giant monopole resonance from inelastic alpha scattering. *Phys. Rev. C*, 23 :1997-2007, 1981.
- [101] W.T.A. Borghols, S. Brandenburg, J.H. Meier, et al. Particle decay of the giant resonance region in ^{90}Zr and especially of the giant monopole resonance. *Nuclear Physics A*, 504(2) :231 – 268, 1989.
- [102] M. M. Sharma, W. T. A. Borghols, S. Brandenburg, et al. Giant monopole resonance in Sn and Sm nuclei and the compressibility of nuclear matter. *Phys. Rev. C*, 38 :2562-2572, 1988.
- [103] D. A. Sims, G. J. O'Keefe, R. P. Rassool, et al. (γ, n) study of the isovector quadrupole resonance in ^{40}Ca . *Phys. Rev. C*, 55 :1288-1294, 1997.
- [104] T. Ichihara, M. Ishihara, H. Ohnuma, et al. Isovector quadrupole resonance observed in the $^{60}\text{Ni}(^{13}\text{C}, ^{13}\text{N})^{60}\text{Co}$ reaction at $E/A=100$ MeV. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :142501, 2002.
- [105] S. S. Henshaw, M. W. Ahmed, G. Feldman, A. M. Nathan, and H. R. Weller. New method for precise determination of the isovector giant quadrupole resonances in nuclei. *Phys. Rev. Lett.*, 107 :222501, 2011.
- [106] K. Maeda, S. Ito, H. Itoh, et al. Isovector quadrupole resonance in $^{13}\text{C}(\gamma, n)$ reaction. *Journal of the Physical Society of Japan*, 75(3) :034201, 2006.

-
- [107] G. F. Bertsch, P. F. Bortignon, and R. A. Broglia. Damping of nuclear excitations. *Rev. Mod. Phys.*, 55 :287–314, 1983.
- [108] D. Gambacurta, M. Grasso, V. De Donno, G. Co, and F. Catara. Second random-phase approximation with the Gogny force : First applications. *Phys. Rev. C*, 86 :021304, 2012.
- [109] M. Brenna, G. Colò, and P.F. Bortignon. Microscopic theory of the γ decay of nuclear giant resonances. *Phys. Rev. C*, 85 :014305, 2012.
- [110] X. Viñas, M. Centelles, X. Roca-Maza, and M. Warda. Density dependence of the symmetry energy from neutron skin thickness in finite nuclei. 2013. arXiv :1308.1008 [nucl-th].
- [111] M. Centelles, X. Roca-Maza, X. Viñas, and M. Warda. Nuclear symmetry energy probed by neutron skin thickness of nuclei. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :122502, 2009.
- [112] L. W. Chen, C. M. Ko, and B. A. Li. Nuclear matter symmetry energy and the neutron skin thickness of heavy nuclei. *Phys. Rev. C*, 72 :064309, 2005.
- [113] S. Nishizaki and K. Andō. A fluiddynamical description of isoscalar giant resonances in deformed nuclei. *Progress of Theoretical Physics*, 73(4) :889–904, 1985.
- [114] T. Nakatsukasa, T. Inakura, and K. Yabana. Finite amplitude method for the solution of the random-phase approximation. *Phys. Rev. C*, 76 :024318, 2007.
- [115] K. Yoshida and T. Nakatsukasa. Shape evolution of giant resonances in Nd and Sm isotopes. *Phys. Rev. C*, 88 :034309, 2013.
- [116] Y Abgrall, B Morand, E Caurier, and B Grammaticos. On the fragmentation of the giant isoscalar resonances in deformed nuclei. *Nuclear Physics A*, 346(3) :431–448, 1980.
- [117] K. Hagino and H. Sagawa. Perturbative Hartree-Fock-Bogoliubov model for many-body pairing correlations. *Phys. Rev. C*, 71 :044302, 2005.
- [118] V. V. Sargsyan, G. G. Adamian, N. V. Antonenko, W. Scheid, and H. Q. Zhang. Influence of neutron transfer in reactions with weakly and strongly bound nuclei on the sub-barrier capture process. *Phys. Rev. C*, 86 :014602, 2012.
- [119] V. V. Sargsyan, G. G. Adamian, N. V. Antonenko, W. Scheid, and H. Q. Zhang. Role of neutron transfer in capture processes at sub-barrier energies. *Phys. Rev. C*, 85 :024616, 2012.
- [120] V. I. Zagrebaev. Sub-barrier fusion enhancement due to neutron transfer. *Phys. Rev. C*, 67 :061601, 2003.
- [121] R. A. Broglia, C. H. Dasso, S. Landowne, and A. Winther. Possible effect of transfer reactions on heavy ion fusion at sub-barrier energies. *Phys. Rev. C*, 27 :2433–2435, 1983.
- [122] A. Lemasson, A. Shrivastava, A. Navin, et al. Modern rutherford experiment : Tunneling of the most neutron-rich nucleus. *Phys. Rev. Lett.*, 103 :232701, 2009.

- [123] W. Von Oertzen and A. Vitturi. Pairing correlations of nucleons and multi-nucleon transfer between heavy nuclei. *Reports on Progress in Physics*, 64(10) :1247, 2001.
- [124] M. Evers, M. Dasgupta, D. J. Hinde, et al. Cluster transfer in the reaction $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$ at energies well below the fusion barrier : A possible doorway to energy dissipation. *Phys. Rev. C*, 84 :054614, 2011.
- [125] G. Ripka and R. Padjen. Pairing vibrations of normal systems. *Nuclear Physics A*, 132(3) :489 – 511, 1969.
- [126] D.R. Bès and R.A. Broglia. Pairing vibrations. *Nuclear Physics*, 80(2) :289 – 313, 1966.
- [127] R.A. Broglia, C. Riedel, and B. Sørensen. Two-nucleon transfer and pairing phase transition. *Nuclear Physics A*, 107(1) :1 – 13, 1968.
- [128] R.A. Broglia, O. Hansen, and C. Riedel. Two-neutron transfer reactions and the pairing model. In Michel Baranger and Erich Vogt, editors, *Advances in Nuclear Physics*, pages 287–457. Springer US, 1973.
- [129] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, T. R. Werner, et al. Mean-field description of ground-state properties of drip-line nuclei : Pairing and continuum effects. *Phys. Rev. C*, 53 :2809–2840, 1996.
- [130] E. Khan, N. Sandulescu, Nguyen Van Giai, and M. Grasso. Two-neutron transfer in nuclei close to the drip line. *Phys. Rev. C*, 69 :014314, 2004.
- [131] G. Potel, A. Idini, F. Barranco, E. Vigezzi, and R. A. Broglia. Single cooper pair transfer in stable and in exotic nuclei. *arXiv :0906.4298 [nucl-th]*, 2009.
- [132] E. Khan, M. Grasso, and J. Margueron. Constraining the nuclear pairing gap with pairing vibrations. *Phys. Rev. C*, 80 :044328, 2009.
- [133] B. Mouginot, E. Khan, R. Neveling, et al. Search for the giant pairing vibration through (p,t) reactions around 50 and 60 MeV. *Phys. Rev. C*, 83 :037302, 2011.
- [134] H. Shimoyama and M. Matsuo. Anomalous pairing vibration in neutron-rich Sn isotopes beyond the N=82 magic number. *Phys. Rev. C*, 84 :044317, 2011.
- [135] G. Potel, F. Barranco, F. Marini, et al. Calculation of the transition from pairing vibrational to pairing rotational regimes between magic nuclei ^{100}Sn and ^{132}Sn via two-nucleon transfer reactions. *Phys. Rev. Lett.*, 107 :092501, 2011.
- [136] E. Pllumbi, M. Grasso, D. Beaumel, et al. Probing the pairing interaction through two-neutron transfer reactions. *Phys. Rev. C*, 83 :034613, 2011.
- [137] M. Grasso, D. Lacroix, and A. Vitturi. Pair-transfer probability in open- and closed-shell Sn isotopes. *Phys. Rev. C*, 85 :034317, 2012.
- [138] V. E. Oberacker, A. S. Umar, J. A. Maruhn, and P.-G. Reinhard. Microscopic study of the $^{132,124}\text{Sn}+^{96}\text{Zr}$ reactions : Dynamic excitation energy, energy-dependent heavy-ion potential, and capture cross section. *Phys. Rev. C*, 82 :034603, 2010.

-
- [139] Y. Iwata, T. Otsuka, J. A. Maruhn, and N. Itagaki. Suppression of charge equilibration leading to the synthesis of exotic nuclei. *Phys. Rev. Lett.*, 104 :252501, 2010.
- [140] C. Golabek and C. Simenel. Collision dynamics of two ^{238}U atomic nuclei. *Phys. Rev. Lett.*, 103 :042701, 2009.
- [141] K. Washiyama and D. Lacroix. Energy dependence of the nucleus-nucleus potential close to the Coulomb barrier. *Phys. Rev. C*, 78 :024610, 2008.
- [142] C. Simenel, Ph. Chomaz, and G. de France. Fusion process studied with a preequilibrium giant dipole resonance in time-dependent Hartree-Fock theory. *Phys. Rev. C*, 76 :024609, 2007.
- [143] K. Sekizawa and K. Yabana. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes in $^{40,48}\text{Ca}+^{124}\text{Sn}$, $^{40}\text{Ca}+^{208}\text{Pb}$, and $^{58}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$ reactions. *Phys. Rev. C*, 88 :014614, 2013.
- [144] D. J. Montanari, L. Corradi, S. Szilner, et al. Heavy-ion transfer reactions at large inter-nuclear distances using the PRISMA magnetic spectrometer. *EPJ Web of Conferences*, 63 :02006, 2013.
- [145] K. Siwek-Wilczyńska and J. Wilczyński. Empirical nucleus-nucleus potential deduced from fusion excitation functions. *Phys. Rev. C*, 69 :024611, 2004.
- [146] B. Yilmaz, S. Ayik, D. Lacroix, and K. Washiyama. Nucleon exchange mechanism in heavy-ion collisions at near-barrier energies. *Phys. Rev. C*, 83 :064615, 2011.
- [147] V. V. Sargsyan, G. Scamps, G. G. Adamian, N. V. Antonenko, and D. Lacroix. Neutron-pair transfer in the sub-barrier capture process. *Phys. Rev. C*, 88 :064601, 2013.
- [148] D. Lacroix, D. Gambacurta, and S. Ayik. Quantal corrections to mean-field dynamics including pairing. *Phys. Rev. C*, 87 :061302, 2013.
- [149] G. Puddu. A time-dependent multi-determinant approach to nuclear dynamics. *International Journal of Modern Physics E*, 22(06) :1350040, 2013.
- [150] V.N. Fomenko. Projection in the occupation-number space and the canonical transformation. *Journal of Physics A : General Physics*, 3(1) :8, 1970.
- [151] J.A. Sheikh and P. Ring. Symmetry-projected Hartree-Fock-Bogoliubov equations. *Nuclear Physics A*, 665(1-2) :71 – 91, 2000.
- [152] N. Onishi and S. Yoshida. Generator coordinate method applied to nuclei in the transition region. *Nuclear Physics*, 80(2) :367 – 376, 1966.
- [153] G. F. Bertsch and L. M. Robledo. Symmetry restoration in Hartree-Fock-Bogoliubov based theories. *Phys. Rev. Lett.*, 108 :042505, 2012.
- [154] L. M. Robledo. Sign of the overlap of Hartree-Fock-Bogoliubov wave functions. *Phys. Rev. C*, 79 :021302, 2009.

- [155] B. Avez and M. Bender. Evaluation of overlaps between arbitrary fermionic quasiparticle vacua. *Phys. Rev. C*, 85 :034325, 2012.
- [156] C. González-Ballester, L.M. Robledo, and G.F. Bertsch. Numeric and symbolic evaluation of the pfaffian of general skew-symmetric matrices. *Computer Physics Communications*, 182(10) :2213 – 2218, 2011.
- [157] P. Bonche, S. Levit, and D. Vautherin. Properties of highly excited nuclei. *Nuclear Physics A*, 427(2) :278 – 296, 1984.
- [158] R. Balian and M. Vénéroni. Time-dependent variational principle for the expectation value of an observable : Mean-field applications. *Annals of Physics*, 164(2) :334 – 410, 1985.

Publications issues de cette thèse

- G. Scamps, D. Lacroix, G. F. Bertsch, K. Washiyama, *Pairing dynamics in particle transport*, Phys. Rev. C **85**, 034328, 2012.
- G. Scamps, D. Lacroix, *Effect of pairing on one- and two-nucleon transfer below the Coulomb barrier : a time-dependent microscopic description*, Phys. Rev. C **87**, 014605, 2013.
- G. Scamps, D. Lacroix, *Effect of pairing on nuclear dynamics*, PoS (Bormio 2013) **048**, 2013.
- G. Scamps, D. Lacroix, *Systematic of isovector and isoscalar giant quadrupole resonances in normal and superfluid spherical nuclei*, Phys. Rev. C **88**, 044310, 2013.
- V. V. Sargsyan, G. Scamps, G. G. Adamian, N. V. Antonenko, and D. Lacroix, *Neutron pair transfer in sub-barrier capture process*, Phys. Rev. C **88**, 064601, 2013.
- G. Scamps, D. Lacroix, G. G. Adamian, N. V. Antonenko, *Polarization of the nuclear surface in deformed nuclei*, Phys. Rev. C **88**, 064327, 2013.
- G. Scamps, D. Lacroix, *Systematic effect of deformation on giant quadrupole resonances*, Phys. Rev. C **89**, 034314, 2014.
- G. Scamps, D. Lacroix, *Effect of pairing on transfer and fusion reactions*, proceeding of the IV international conference FUSION14, 2014

Résumé

L'appariement est une composante indispensable à la description des noyaux atomiques. Ses effets sur les propriétés statiques du noyau sont à présent bien connus. Dans ce mémoire, l'effet de l'appariement sur la dynamique nucléaire est étudié. Différentes théories qui incluent l'appariement sont comparées dans un cas modèle. La théorie TDHF+BCS qui apparaît comme un bon compromis entre la richesse de la physique qu'elle contient et son coût numérique est retenue pour les applications aux noyaux. L'introduction de l'appariement dans cette approximation pose de nouveaux problèmes liés à (1) la brisure de la symétrie associée au nombre de particules, (2) la non-conservation de l'équation de continuité. Ces difficultés sont analysées en détail et des solutions pratiques sont proposées.

Dans cette thèse, un programme TDHF+BCS en 3 dimensions permettant de simuler la dynamique des noyaux a été développé. L'application de cette théorie aux résonances géantes a montré que l'appariement n'affecte que les états excités de basse énergie. La composante collective de haute énergie n'étant modifiée que par les conditions initiales. Une étude complète des résonances géantes quadrupolaires a été réalisée pour plus de 700 noyaux sphériques ou déformés. Un bon accord est alors trouvé avec les données expérimentales pour l'énergie collective de la résonance. Cette théorie a ensuite été appliquée à l'étude des réactions de transfert de nucléons lors des collisions noyau-noyau. Une nouvelle méthode de détermination des probabilités de transfert est proposée. Il est montré que l'appariement augmente de manière significative les probabilités de transférer deux nucléons.

Effect of pairing on nuclear dynamics

Abstract

Pairing correlations is an essential component for the description of the atomic nuclei. The effects of pairing on static property of nuclei are now well known. In this thesis, the effect of pairing on nuclear dynamics is investigated. Theories that includes pairing are benchmarked in a model case. The TDHF+BCS theory turns out to be a good compromise between the physics taken into account and the numerical cost. This TDHF+BCS theory was retained for realistic calculations. Nevertheless, the application of pairing in the BCS approximation may induce new problems due to (1) the particle number symmetry breaking, (2) the non-conservation of the continuity equation. These difficulties are analysed in detail and solutions are proposed.

In this thesis, a 3 dimensional TDHF+BCS code is developed to simulate the nuclear dynamic. Applications to giant resonances show that pairing modify only the low lying peaks. The high lying collective components are only affected by the initial conditions. An exhaustive study of the giant quadrupole resonances with the TDHF+BCS theory is performed on more than 700 spherical or deformed nuclei. It is shown that the TDHF+BCS theory reproduces well the collective energy of the resonance. After validation on the small amplitude limit problem, the approach was applied to study nucleon transfer in heavy ion reactions. A new method to extract transfer probabilities is introduced. It is demonstrated that pairing significantly increases the two-nucleon transfer probability.

Mots clés : Dynamique nucléaire, Corrélations d'appariement, Théorie du champ moyen, Hartree-Fock dépendant du temps, Théorie BCS, Résonance géante (physique nucléaire), Réaction de transfert de nucléons, Fusion nucléaire