



HAL
open science

Excitations collectives à basse énergie: Etude microscopique de la rotation, de la vibration et de leur couplage dans les noyaux pair-pairs

Isabelle Deloncle

► **To cite this version:**

Isabelle Deloncle. Excitations collectives à basse énergie: Etude microscopique de la rotation, de la vibration et de leur couplage dans les noyaux pair-pairs. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Paris 6, 1989. Français. NNT: . tel-01075873

HAL Id: tel-01075873

<https://theses.hal.science/tel-01075873>

Submitted on 20 Oct 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.

THESE de DOCTORAT de l'UNIVERSITE PARIS 6

Spécialité :

Physique Théorique

présentée

par M^{elle} Isabelle Deloncle

pour obtenir le titre de DOCTEUR DE L'UNIVERSITE PARIS 6

Sujet de la thèse :

Excitations collectives à basse énergie : Etude microscopique
de la rotation, de la vibration et de leur couplage dans les noyaux
pair-pairs.

soutenue le 23 Octobre 1989

devant le jury composé de :

M M. Vénéroni, Président
M K. Dietrich, Rapporteur
M H. Sergolle, Rapporteur
M A. Comtet
M P. Quentin
M H. Flocard
M J. Libert
M J. Meyer

Auréliano le second était plongé dans la lecture d'un livre. L'ouvrage ne portait pas de couverture et son titre n'apparaissait nulle part; mais cela n'empêcha pas l'enfant de dévorer avec le plus grand plaisir l'histoire de cette femme qui se mettait à table pour ne manger que des grains de riz qu'elle piquait avec des épingles, et l'histoire de ce pêcheur qui emprunta du lest pour son filet à son voisin, et remercia ce dernier par la suite, avec un poisson qui avait un diamant dans l'estomac, les histoires de lampe qui exauce tous les désirs et de tapis volants. Stupéfait il demanda à Ursula si tout cela était vrai, et elle lui répondit qu'en effet, bien des années auparavant, les gitans étaient venus à Macondo avec ces lampes merveilleuses et ces tapis volants.

- "Ce qu'il y a, soupira-t-elle, c'est que le monde va finissant peu à peu, et ces choses-là n'arrivent plus."

"Cent ans de solitude"

Gabriel Garcia Marquez

Remerciements

J'aimerais remercier ici tous ceux qui, cachés derrière ces pages, ont contribué à l'histoire de cette thèse. J'ai reçu au CSNSM un accueil chaleureux je tiens à en remercier Harry Bernas, et tous ceux qui ont gardé leur porte sur le couloir ouverte à mes questions, mes doutes, mes états d'âme ou mes joies. Il y a ceux de mon couloir, J.Libert, Ch.Briançon, C.Shuck et Z. Méliani, M.G. Porquet et F. Hannachi, le groupe d'Astrophysique Nucléaire; ceux du couloir d'en dessous, M^{me} Bastin qui a de plus accepté de corriger cette thèse, tout le secrétariat et, en particulier M.Perrin qui m'a bien aidée dans l'élaboration de ce texte; ceux du couloir perpendiculaire au mien, J.Sauvage et tout son groupe dont l'apport pour les problèmes de Physique m'a été très précieux, l'équipe de L.Valentin avec laquelle j'ai bien souvent déjeuné et parlé d'autre chose.

Plus loin géographiquement mais beaucoup plus près de ce travail mon directeur de thèse P.Quentin m'a appris énormément, conseillée, lue et relue, soutenue et conduite par un chemin droit éclairé de ses lumières pendant ces deux années. Toujours très près de ce travail, et dans le même bureau, contre vents et marées, dans les brouillards ou les éclaircies, dans les coups de tabac ou les calmes deltas, il y a aussi J.Libert dont l'enthousiasme, la générosité, la solidité m'ont été comme un sémaphore.

En face de moi un jour, il y a eu six autres personnes qui m'ont tout d'abord lue, ont corrigé ce texte, m'ont fait part de leurs idées, suggestions et questions. Je tiens à en remercier Messieurs M.Vénéroni, qui a accepté de présider ce jury, H.Sergolle et K.Dietrich qui ont été les rapporteurs de ce travail, A.Comtet, H.Flocard et J.Meyer dont les remarques ont été très fructueuses.

Enfin, je ne peux oublier ceux que je n'ai jamais vu, qui ont pourtant travaillé avec moi, à l'autre bout du fil de ma console ; aussi je remercie chaleureusement toute l'équipe du CCPN.

Chapitre I

Introduction

Depuis 1952, le Modèle Unifié de Bohr-Mottelson [I-1,2] a fourni un cadre théorique adéquat pour la description des excitations à basse énergie de noyaux non rigidement sphériques. D'autre part, la compréhension microscopique des propriétés de structure en couches des noyaux s'est développée dans le même temps au moyen d'interactions effectives définies dans un cadre se référant de façon plus ou moins lointaine à l'approche de Brueckner-Hartree-Fock. Actuellement, l'usage de telles interactions, purement phénoménologiques, conduit à une reproduction très satisfaisante des propriétés statiques et des mouvements harmoniques de noyaux sur toute la table des isotopes (voir par exemple la référence [I-3]).

Le thème majeur de ce travail est l'utilisation de telles interactions, qui ont fait leur preuve dans des calculs statiques, pour fonder microscopiquement l'approche dynamique de Bohr et Mottelson. Plus particulièrement, il s'agit de calculer le hamiltonien collectif quadrupolaire - dit de Bohr - pour des noyaux pair-pairs. Afin de se convaincre de la validité de l'ensemble d'une telle démarche, il convient de l'appliquer à des cas très différents de ceux déjà étudiés, à savoir les mouvements collectifs de grande amplitude. C'est pourquoi les calculs ont été effectués pour des noyaux transitionnels - ou noyaux mous - pour lesquels on s'attend à une grande extension de la fonction d'onde collective dans l'espace des déformations.

S'appuyant sur des travaux théoriques postérieurs - notamment pour des systèmes qui contrairement à ceux étudiés ici sont sans corrélations d'appariement - le problème dynamique à la limite adiabatique est ramené à un problème statique sous contraintes impaires par le renversement du sens du temps (champs

externes de "cranking"). Ignorant les corrections de self-consistance à la Thouless-Valatin, on est conduit à des calculs similaires à ceux de la méthode du cranking d'Inglis [I-4] (ou plutôt de Belayev [I-5] compte tenu de la présence de corrélations d'appariement), mais, et c'est une différence capitale, où les champs de contrainte de cranking sont définis de façon cohérente avec le choix du chemin adiabatique. Enfin, le calcul des sept fonctions scalaires de la déformation définissant le hamiltonien de Bohr, a été rendu praticable par l'emploi de solutions semi-classiques self-consistantes d'où l'on a déduit les solutions statiques quantiques sous-jacentes.

Le présent mémoire développe les diverses étapes de l'approche théorique et discute les premiers résultats obtenus pour quatre noyaux mous : ^{74}Ge , ^{76}Se , ^{110}Cd et ^{186}Pt .

Chapitre II

Formalisme général

I) Introduction :

Dans ce chapitre, nous discutons la limite adiabatique de l'approximation Hartree-Fock-Bogolyubov dépendant du temps (ATDHFB). Aussi, dans un premier temps, nous allons présenter le problème dynamique général à l'approximation de particules indépendantes, tout d'abord sans corrélations d'appariement (formalisme TDHF), puis avec corrélations (formalisme TDHFB). Dans un deuxième temps, nous nous placerons à la limite adiabatique dans les deux cas (ATDHF et ATDHFB).

Comme nous allons le montrer, le formalisme ATDHFB conduit à un hamiltonien classique, le hamiltonien de Bohr, pour lequel une quantification est nécessaire. Il existe plusieurs façons de quantifier ce hamiltonien parmi lesquelles la prescription de Schrödinger-Pauli que nous utilisons ici. Le hamiltonien de Bohr ainsi quantifié fait l'objet de la dernière partie de ce chapitre.

II) Approximations dynamiques de type Hartree-Fock Bogolyubov :

a) en l'absence de corrélations d'appariement :

Malgré la courte portée de l'interaction forte à la densité usuelle de la matière nucléaire, le principe de Pauli, qui augmente le libre parcours moyen d'un nucléon (jusqu'à l'ordre de grandeur des dimensions du noyau), rend possible l'approximation de particules indépendantes. Aussi, pour peu que les énergies d'excitation par nucléon restent très inférieures à celle du niveau de Fermi, nous pouvons, dans le cadre de cette hypothèse, étudier la dynamique collective des noyaux.

L'équation d'évolution du système s'écrit:

$$|\phi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\phi(0)\rangle, \quad (\text{Eq. II-1})$$

où $H = K + V$ est l'hamiltonien du système à A corps et V représente une interaction effective à 2 corps.

En imposant qu'à chaque instant la fonction d'onde du système soit représentée par un déterminant de Slater :

$$\langle\langle \vec{x}_1 \rangle\rangle |\phi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(t, \vec{x}_1) & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \varphi_A(t, \vec{x}_A) \end{vmatrix}, \quad (\text{Eq. II-2})$$

soit en écriture de seconde quantification :

$$|\phi(t)\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^+(t) |0\rangle, \quad (\text{Eq. II-3})$$

on obtient par minimisation de l'équivalent quantique de l'intégrale d'action :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_j(t, \vec{x}_j)}{\partial t} = h \varphi_j(t, \vec{x}_j) \quad (\text{Eq. II-4})$$

où h est le hamiltonien à 1 corps de Hartree-Fock associé à H et à ϕ .

L'introduction de l'opérateur densité à un corps :

$$\rho(t) = \sum_{i \text{ (occupés)}} |\varphi_i(t)\rangle \langle \varphi_i(t)|, \quad (\text{Eq. II-5})$$

permet d'exprimer h de la façon suivante, où l'on écrit explicitement sa dépendance par rapport à la solution ρ [II-0]:

$$h(\rho) = k + \text{Tr}_1 (V\rho) \quad (*) \quad (\text{Eq. II-6})$$

On obtient alors une réécriture de l'équation (Eq. II-4) sous la forme du système d'équations non linéaires dû à Dirac [II-1] :

$$i\hbar \dot{\rho} = [h(\rho), \rho] \quad (\text{Eq. II-7})$$

qui sont les équations du mouvement de TDHF (**).

L'évolution dans le temps d'un nucléon se faisant au travers de celle du champ moyen, ce formalisme approché peut s'appliquer à une large gamme de phénomènes collectifs tels que rotations, vibrations, fission, etc.

* Avec :

$$\text{Tr}_1 (\tilde{V}\rho) = \sum_{j1} \tilde{V}_{1jkl} \rho_{1j}$$

où :

$$\tilde{V}_{1jkl} = V_{1jkl} - V_{1jlk}$$

** Si ρ et V sont pairs par renversement du sens du temps à tout temps t , cette équation ne possède que la solution triviale $\dot{\rho} = 0$.

b) avec les corrélations d'appariement :

Dans l'approximation de TDHF sont inclus trois types de corrélations : les corrélations liées à la symétrie par permutation issues du principe de Pauli (puisque nous avons à faire à des fermions), celles provenant du caractère self-consistant du champ moyen et enfin, celles prises en compte dans la définition de l'interaction effective elle-même. Cependant, certains faits expérimentaux (tels par exemple une comparaison de données spectroscopiques de basse énergie des noyaux pairs et impairs ou encore les différences d'énergie de liaison entre les noyaux pairs-pairs et impairs-impairs) ne peuvent être expliqués que par l'adjonction de corrélations non déjà prises en compte dans l'approche Hartree-Fock, et ont donc montré la nécessité d'y inclure des corrélations à plus courte portée qu'on nomme corrélations d'appariement .

L'approximation de Hartree-Fock-Bogolyubov dépendant du temps (ou plus simplement TDHFB) permet de traiter ces corrélations de façon cohérente avec celles déjà contenues dans l'approximation Hartree-Fock (TDHF). Elle consiste à considérer la fonction d'onde du système, non plus comme un déterminant de Slater (vide de quasiparticules de type particule ou trou), mais comme un vide de quasiparticules $| 0 \rangle$ dont les opérateurs de création et d'annihilation sont donnés à partir de ceux de particules par la transformation linéaire canonique de fermions la plus générale appelée transformation de Bogolyubov [II-2,2a,2b] :

$$b_l = \sum_k u_{lk} a_k + v_{lk} a_k^+ \quad (\text{Eq. II-8})$$

L'état correspondant $|\phi(t)\rangle$ est alors défini par :

$$|\phi(t)\rangle = \prod_k b_k(t) | 0 \rangle. \quad (\text{Eq. II-9})$$

Alors que l'état TDHF était déterminé par la seule donnée de la matrice densité hermitique à un corps ρ , le vide de quasiparticules de TDHFB est, lui, défini par la donnée de deux matrices; l'une hermitique ρ définie comme précédemment par :

$$\rho_{ij}(t) = \langle \phi(t) | a_j^\dagger a_i | \phi(t) \rangle, \quad (\text{Eq. II-10})$$

et l'autre \mathcal{K} , et que l'on appelle densité anormale, qui est antisymétrique et définie comme suit :

$$\mathcal{K}_{ij}(t) = \langle \phi(t) | a_j a_i | \phi(t) \rangle. \quad (\text{Eq. II-11})$$

Dans le cas TDHF on a bien sûr :

$$\mathcal{K}(t) \equiv 0. \quad (\text{Eq. II-12})$$

La matrice densité ρ qui dans le cas TDHF vérifiait la propriété caractéristique d'idempotence d'un projecteur

$$\rho^2 - \rho = 0, \quad (\text{Eq. II-13})$$

satisfait à présent à l'équation :

$$\rho^2 - \rho = \mathcal{K} \mathcal{K}^* \quad (\text{Eq. II-14})$$

et à la relation :

$$\rho \mathcal{K} = \mathcal{K} \rho^*. \quad (\text{Eq. II-15})$$

Bogolyubov [II-2] a suggéré l'introduction de la matrice densité généralisée [II-4,5]:

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \mathcal{K} \\ -\mathcal{K}^* & 1-\rho^* \end{pmatrix}. \quad (\text{Eq. II-16})$$

Elle est hermitique et satisfait à la condition d'idempotence: c'est un projecteur .

On introduit également une matrice énergie :

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix}, \quad (\text{Eq. II-17})$$

où le champ Hartree-Fock est défini par :

$$h = t + \text{Tr}_1(\tilde{V} \rho) - \lambda, \quad (\text{Eq. II-18})$$

(λ étant le potentiel chimique).

Le champ d'appariement Δ est donné par * :

$$\Delta = -\frac{1}{2} \text{Tr}_2(\tilde{V} \mathcal{K}). \quad (\text{Eq. II-19})$$

Si l'on impose à la solution de rester à tout instant un vide de quasiparticules les équations du mouvement deviennent [II-5,6]:

$$i\hbar \dot{\mathcal{R}} = [\mathcal{H}, \mathcal{R}], \quad (\text{Eq. II-20})$$

qui est la généralisation de l'équation de Dirac (TDHF) au cas corrélé (TDHFB).

c) traitement approché des corrélations d'appariement:

Une approximation supplémentaire et fréquemment utilisée (sur laquelle nous reviendrons plus loin) consiste à décrire la fonction d'onde d'un noyau pair-pair de la même façon que celle employée par Bardeen-Cooper et Schrieffer [II-7] pour représenter l'état fondamental d'un supraconducteur :

* Avec :

$$\text{Tr}_2(\tilde{V} \mathcal{K}) = \sum_{I, J} \tilde{v}_{iklj} \mathcal{K}_{I, J}.$$

$$| \phi \rangle = | \text{BCS} \rangle = \sum_{k>0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger) | 0 \rangle. \quad (\text{Eq. II-21})$$

Où \bar{k} résulte de l'application de l'opérateur renversement du sens du temps sur l'état k (c'est là l'approximation), et où les u_k, v_k sont choisis réels et positifs.

Si on impose la normalisation et l'invariance par renversement du sens du temps à la fonction d'onde de BCS on obtient des relations sur les u_k, v_k . On choisit :

$$u_k = u_{\bar{k}} \quad , \quad v_k = -v_{\bar{k}} \quad , \quad (\text{Eq. II-22a})$$

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \quad (\text{Eq. II-22b})$$

L'état de BCS est d'ailleurs le vide de quasiparticules associées à une restriction de la transformation de Bogolyubov, appelée transformation de Bogolyubov-Valatin [II-2,8]:

$$b_k = u_k a_k + v_k a_{\bar{k}}^\dagger \quad . \quad (\text{Eq. II-23})$$

En définissant comme précédemment la matrice densité ρ sur l'état BCS on obtient :

$$\begin{aligned} \rho_{ij} &= \langle \text{BCS} | a_j^\dagger a_i | \text{BCS} \rangle \\ &= v_i^2 \delta_{ij} \quad , \end{aligned} \quad (\text{Eq. II-24})$$

ce qui donne à v_i^2 le sens d'une probabilité d'occupation de l'état i dans le vide de BCS.

La transformation de Bogolyubov la plus générale, tout comme celle de Bogolyubov-Valatin, mélange les opérateurs de création et d'annihilation de particules. Il en résulte (de façon évidente dans le cas de BCS où la fonction d'onde s'écrit comme somme de déterminants de Slater) que le vide de quasiparticules n'est pas un état propre du nombre de particules N . En pratique, pour décrire un noyau donné, nous contraindrons les solutions à garder la même valeur moyenne de l'opérateur N .

III) Limite adiabatique :

a) sans corrélations d'appariement :

Baranger et Vénéroni [II-9,10] ont montré que ρ , solution des équations de TDHF (projecteur hermitique non invariant sous le renversement du sens du temps) peut se mettre sous la forme :

$$\rho = e^{+iX} \rho_0(t) e^{-iX}, \quad (\text{Eq. II-25})$$

avec X et ρ_0 opérateurs hermitiques, T-pairs .

De plus, cette décomposition est unique si X vérifie :

$$i) \quad \rho_0 X \rho_0 = (1-\rho_0) X (1-\rho_0) = 0, \quad (\text{Eq. II-26})$$

(*)
soit $\rho_0 X + X \rho_0 = X.$

$$ii) \quad -\frac{\pi}{4} \leq X_\mu \leq \frac{\pi}{4} \quad (\text{Eq. II-27})$$

où X_μ est une valeur propre de X .

Sur la base de ce théorème, Baranger et Vénéroni [II-9,10] ont montré que l'hypothèse d'adiabaticité consiste (en partie) à supposer que ρ reste à tout instant voisine de ρ_0 , c'est-à-dire que les éléments de matrice de X demeurent petits. On peut alors développer ρ , en se limitant à l'ordre 2 en X :

$$\rho(t) = \rho_0(t) + \rho_1(t) + \rho_2(t), \quad (\text{Eq. II-28})$$

où le terme :

$$\rho_1 = i [X, \rho_0] \quad (\text{Eq. II-29})$$

est un opérateur hermitique, T-impair dont les seuls éléments de matrice non nuls sont de type p-t et t-p .

* Autrement dit, X n'a d'éléments de matrice non nuls, dans la base où ρ_0 est diagonale, que de type particule-trou (p-t) ou trou-particule (t-p). C'est ce que Baranger et Vénéroni appellent "choix naturel " de X .

Le terme :

$$\rho_2 = -\frac{1}{2} \left[X, \left[X, \rho_0 \right] \right], \quad (\text{Eq. II-30})$$

est également hermitique mais T-pair et n'a d'éléments de matrice non nuls que de type particule-particule (p-p) et trou-trou (t-t).

Lorsqu'on introduit ce développement de ρ en puissance de X dans les équations du mouvement TDHFB, on obtient les deux équations à l'ordre considéré^(*) respectivement T-impair et T-paire [II-9, 11a, 11b] :

$$i\hbar\dot{\rho}_0 = \left[h_0, \rho_1 \right] + \left[h_1, \rho_0 \right] \quad (\text{Eq. II-31})$$

$$i\hbar\dot{\rho}_1 = \left[h_0, \rho_0 \right] + \left[h_1, \rho_1 \right] + \left[h_2, \rho_0 \right]. \quad (\text{Eq. II-32})$$

Avec :

$$h_0 = t + \text{Tr}_1(\tilde{V}\rho_0), \quad (\text{Eq. II-33})$$

$$h_1 = \text{Tr}_1(\tilde{V}\rho_1), \quad (\text{Eq. II-34})$$

$$h_2 = \text{Tr}_1(\tilde{V}\rho_2). \quad (\text{Eq. II-35})$$

Une analyse [II-9] de $\dot{\rho}_0$ et $\dot{\rho}_1$ à grande amplitude, montre que $\dot{\rho}_0$ est d'ordre 1 en X et $\dot{\rho}_1$ d'ordre 2. On en déduit qu'il faut que le commutateur :

$$\left[h_0, \rho_0 \right] \cong 0 \quad (\text{Eq. II-36})$$

soit aussi d'ordre 2 en X (à grande amplitude). Par conséquent, à chaque instant le système est proche de l'équilibre statique, ce qui est une condition nécessaire et suffisante à l'existence d'un chemin adiabatique.

* Dans l'équation II-32 nous n'avons pas pris en compte le terme $[h_0, \rho_2]$. On peut en effet montrer [II-9] que la partie p-t de ce commutateur est d'ordre 3 en X et que d'autre part, les parties p-p, t-t de l'équation (Eq. II-32) sont annulées par ce terme.

On peut montrer [II-9,12] que les équations adiabatiques du mouvement (eq II-31,II-32) sont équivalentes à des équations canoniques de Hamilton où les éléments de matrice de ρ_0 et de X joueraient le rôle de coordonnées et d'impulsion respectivement. Ce rôle de ρ_0 et de X se trouve illustré lorsqu'on écrit [II-9] l'expression de l'énergie adiabatique totale qui s'exprime comme d'une part une énergie potentielle, ne dépendant que de ρ_0 :

$$E(\rho_0) = \text{Tr}(t \rho_0) + \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \text{Tr}_1 (\rho_0 \tilde{V} \rho_0), \quad (\text{Eq. II-37})$$

et d'une énergie cinétique d'autre part :

$$K(X) = \text{Tr}(h_0 \rho_2) + \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \text{Tr}_1 (\rho_1 \tilde{V} \rho_1) \quad (\text{Eq. II-38})$$

$$= \frac{\hbar}{2} \text{Tr} X \dot{\rho}_0 \quad (\text{Eq. II-39})$$

dépendant quadratiquement de X (puisque $\dot{\rho}_0$ dépend linéairement de X) .

b) en présence de corrélations d'appariement :

Dans le cas corrélé, nous pouvons également appliquer le théorème de Baranger-Vénéroni à la matrice densité généralisée $\mathcal{R}(t)$, solution des équations de TDFHB (écrites dans un espace dont les dimensions sont doublées par rapport au cas non corrélé) puisque la matrice \mathcal{R} est un projecteur hermitique du fait des relations (Eq. II- 14) et (Eq. II-15) .

A la limite adiabatique nous la développons en nous limitant à l'ordre 2 dans la matrice X (également de dimensions doublées) de la façon suivante :

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_0 + \mathcal{R}_1 + \mathcal{R}_2. \quad (\text{Eq. II-40})$$

Avec la matrice \mathcal{R}_1 T-impair, hermitique :

$$\mathcal{R}_1 = i \left[X, \mathcal{R}_0 \right], \quad (\text{Eq. II-41})$$

et la matrice \mathcal{R}_2 T-paire également hermitique :

$$\mathcal{R}_2 = -\frac{1}{2} \left[X, \left[X, \mathcal{R}_0 \right] \right]. \quad (\text{Eq. II-42})$$

De plus, \mathcal{R}_1 et \mathcal{R}_2 vérifient :

$$\mathcal{R}_1 = \mathcal{R}_0 \mathcal{R}_1 (1-\mathcal{R}_0) + (1-\mathcal{R}_0) \mathcal{R}_1 \mathcal{R}_0 \quad (\text{Eq. II-43})$$

$$\mathcal{R}_2 = \mathcal{R}_0 \mathcal{R}_2 \mathcal{R}_0 + (1-\mathcal{R}_0) \mathcal{R}_2 (1-\mathcal{R}_0). \quad (\text{Eq. II-44})$$

Quand on introduit le développement de \mathcal{R} dans les équations de TDHFB, nous obtenons [II-9] les deux équations du mouvement à l'approximation Hartree-Fock-Bogolyubov dépendant du temps à la limite adiabatique (ATDHFB) :

$$i \hbar \dot{\mathcal{R}}_0 = \left[\mathcal{H}_0, \mathcal{R}_1 \right] + \left[\mathcal{H}_1, \mathcal{R}_0 \right] \quad (\text{T-impair}) \quad (\text{Eq. II-45})$$

$$i \hbar \dot{\mathcal{R}}_1 = \left[\mathcal{H}_0, \mathcal{R}_0 \right] + \left[\mathcal{H}_1, \mathcal{R}_1 \right] + \left[\mathcal{H}_2, \mathcal{R}_0 \right] \quad (\text{T-pair}). \quad (\text{Eq. II-46})$$

Pour les raisons invoquées dans le cas ATDHF, la première est tronquée à l'ordre 1 en X et la seconde à l'ordre 2. D'autre part, ces équations correspondent au chemin adiabatique \mathcal{R}_0 défini par :

$$\left[\mathcal{H}_0, \mathcal{R}_0 \right] \approx 0. \quad (\text{Eq. II-47})$$

De même, on obtient l'énergie totale ATDHFB sous la forme d'une énergie classique, somme d'une énergie potentielle dépendant de variables collectives et d'une énergie cinétique. Cependant, du fait de l'introduction des corrélations d'appariement, l'énergie potentielle dépend maintenant des densités normale et anormale (ρ_0 et \mathcal{K}_0) suivant [II-9,12,13] :

$$E(\rho_0, \mathcal{K}_0) = \text{Tr} \left\{ \left(t + \frac{1}{2} \text{tr}(\rho_0 \tilde{V}) \right) \rho_0 + \frac{1}{4} \left(\mathcal{K}_0 \Delta_0^* + \mathcal{K}_0^* \Delta_0 \right) \right\} \quad (\text{Eq. II-48})$$

qui n'est autre que l'énergie Hartree-Fock-Bogolyubov associée à la solution \mathcal{R}_0 .

L'énergie cinétique :

$$\begin{aligned} K(\mathcal{R}_0, X) &= \frac{\hbar}{4} \text{Tr} X \dot{\mathcal{R}}_0 \quad (\text{Eq. II-49}) \\ &= \frac{i\hbar}{4} \text{Tr} \mathcal{R}_1 \left[\dot{\mathcal{R}}_0, \mathcal{R}_0 \right], \end{aligned}$$

s'exprime en fonction de \mathcal{K}_0 , $\dot{\mathcal{K}}_0$ et \mathcal{K}_1 (cf équation II-16):

$$\begin{aligned} K(\mathcal{R}_0, X) &= \frac{i\hbar}{2} \text{Tr} \left\{ \dot{\rho}_0 \left(\left[\rho_0, \rho_1 \right] + \mathcal{K}_1 \mathcal{K}_0^* - \mathcal{K}_0 \mathcal{K}_1^* \right) \right. \\ &\quad \left. - \dot{\mathcal{K}}_0 \left(2 \left(\rho_1 \mathcal{K}_0 - \mathcal{K}_1 \rho_0^* \right) + \mathcal{K}_1 \right)^* \right\}. \end{aligned} \quad (\text{Eq. II-50})$$

IV) Approximations supplémentaires :

a) réduction à une variable :

On suppose maintenant que l'évolution de $\mathcal{R}(t)$, solution des équations du mouvement de ATDHFB contenant tous les degrés de liberté, peut être décrite seulement par quelques variables collectives .

Faisons, pour commencer, l'hypothèse qu'une description est possible avec une seule variable, q . Nous devons alors considérer un chemin adiabatique (défini par \mathcal{R}_0) dépendant seulement de q . Au chapitre suivant, nous discuterons d'un choix parmi d'autres pour ce chemin qui correspond à une hypothèse à priori raisonnable sur la solution de l'équation du mouvement adiabatique T-paire. On écrit par conséquent :

$$\dot{\mathcal{R}}_0(t) = \frac{\partial \mathcal{R}_0(t)}{\partial q} \dot{q}(t). \quad (\text{Eq. II-51})$$

L'énergie cinétique :

$$K(\mathcal{R}_0, X) = \frac{\hbar}{4} \dot{q} \text{Tr} \left(\frac{\partial \mathcal{R}_0}{\partial q} X \right), \quad (\text{Eq. II-52})$$

est quadratique en \dot{q} (X étant linéaire en \dot{q}). Elle s'écrit :

$$K = \frac{1}{2} \dot{q}^2 \left(\frac{\hbar}{2} \frac{1}{\dot{q}} \text{Tr} \left(\frac{\partial \mathcal{R}_0}{\partial q} X \right) \right). \quad (\text{Eq. II-53})$$

En définissant le paramètre de masse $M(q)$ associé à la variable q par :

$$K = \frac{1}{2} M(q) \dot{q}^2. \quad (\text{Eq. II-54})$$

On obtient :

$$M(q) = \frac{\hbar}{2} \text{Tr} \left(\frac{\partial \mathcal{R}_0}{\partial q} \frac{X}{\dot{q}} \right) \quad (\text{Eq. II-55})$$

$$= \frac{i\hbar}{2 \dot{q}} \text{Tr} \mathcal{R}_1 \left[\frac{\partial \mathcal{R}_0}{\partial q}, \mathcal{R}_0 \right]. \quad (\text{Eq. II-56})$$

b) approximation du cranking d'Inglis :

Dans ce qui suit (cf chapitre III) on supposera que le chemin adiabatique $\mathcal{R}_0(q)$ est donné par un calcul Hartree-Fock sous contrainte. On peut dans ce cas montrer que l'équation T-impair (Eq. II-45) de ATDHFB se ramène à une équation Hartree-Fock doublement contrainte dont l'une des contraintes est T-paire (et est celle qui a servi à déterminer $\mathcal{R}_0(q)$) et l'autre est T-impair et dépend de \dot{q} [II-13]. La résolution de cette équation se fait par itérations : à partir d'une valeur non nulle de \dot{q} , la première itération nous donne : $\mathcal{R} = \mathcal{R}_0 + \mathcal{R}_1^{(0)}$. La perturbation T-impair $\mathcal{R}_1^{(0)}$ modifie à son tour le champ moyen qui passe de \mathcal{H}_0 à $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1^{(0)}$, et ainsi de suite jusqu'à convergence. Quand on néglige les champs self-consistants h_1 et Δ_1 (ce qui revient à s'arrêter à la première itération), l'équation T-impair se réduit à :

$$i \hbar \dot{\mathcal{R}}_0 = \left[\mathcal{H}_0, \mathcal{R}_1 \right] \quad (\text{Eq. II-57})$$

que l'on peut inverser analytiquement pour obtenir les éléments de matrice de \mathcal{R}_1 en fonction de ceux de ρ_0 , $(\partial \rho_0 / \partial q)$ et \mathcal{H}_0 [II-13]. Pour ce faire, nous utilisons la base canonique [II-14] définie par :

$$\langle \mu | \rho_0 | \nu \rangle = \delta_{\mu\nu} v_\mu^2 \quad (\text{Eq. II-58})$$

$$\langle \mu | \mathcal{H}_0 | \nu \rangle = \delta_{\mu\nu} u_\mu v_\mu \quad (\text{Eq. II-59})$$

où les μ sont les états de la base, $\bar{\nu}$ leurs renversés du sens du temps et u_μ, v_μ , des paramètres réels vérifiant :

$$u_\mu^2 + v_\mu^2 = 1 . \quad (\text{Eq. II-60})$$

Nous ferons de plus l'hypothèse d'une force de séniorité pour le champ d'appariement:

$$(\Delta_0)_{\mu\nu} = \delta_{\mu\bar{\nu}} \Delta_0 . \quad (\text{Eq. II-61})$$

Nous obtenons alors dans cette base les relations suivantes [II-13]:

$$\langle \mu | \rho_1 | \nu \rangle = - \frac{i \hbar \dot{q}}{e_\mu + e_\nu} \langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q} | \nu \rangle \frac{v_\mu^2 - v_\nu^2}{(u_\mu v_\nu + u_\nu v_\mu)^2} \quad (\text{Eq. II-62})$$

$$\langle \mu | \kappa_1 | \bar{\nu} \rangle = - \frac{i \hbar \dot{q}}{e_\mu + e_\nu} \langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q} | \nu \rangle \frac{u_\mu v_\mu + u_\nu v_\nu}{(u_\mu v_\nu + u_\nu v_\mu)^2} \quad (\text{Eq. II-63})$$

où l'on a défini l'énergie e_ν de la quasiparticule ν :

$$e_\nu = \sqrt{(E_\nu - \lambda)^2 + \Delta_0^2} . \quad (\text{Eq. II-64})$$

en fonction de l'énergie Hartree-Fock correspondante E_ν .

Le paramètre de masse adiabatique s'exprime dans ce cas comme :

$$M(q) = \hbar^2 \sum_{\mu\nu} \frac{1}{e_\mu + e_\nu} \frac{\left| \langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q} | \nu \rangle \right|^2}{(u_\mu v_\nu + u_\nu v_\mu)^2}, \quad (\text{Eq. II-65})$$

qui est la formule du cranking d'Inglis [II-15] avec corrélations d'appariement [II-16,9,11a]; où cependant, l'opérateur de cranking $(\partial\rho_0/\partial q)$ est déterminé de façon self-consistante par rapport au chemin adiabatique .

Si l'on effectuait le processus itératif sur la partie impaire de \mathcal{R} jusqu'à convergence, le paramètre de masse correspondrait à ce qui est obtenu par Thouless et Valatin [II-17] pour la rotation. Cette approche généralise donc le cranking self-consistant au mode le plus général (c'est-à-dire à d'autres modes que la rotation étudiée par Thouless et Valatin). Il a été montré [II-13] que la perte de la self-consistance pour la seule partie normale de l'énergie engendrait une erreur faible (pour les forces employées, de l'ordre de 5 à 10 %). Dans ce travail, nous ne considérons donc que l'approximation du cranking d'Inglis.

c) Cas de deux variables :

Ce résultat se généralise facilement dans le cas où deux variables indépendantes sont supposées décrire la dynamique collective. En effet, à partir de :

$$\dot{\mathcal{R}}_0(t) = \frac{\partial \mathcal{R}_0(t)}{\partial q_A} \Big|_{\dot{q}_B=0} \dot{q}_A(t) + \frac{\partial \mathcal{R}_0(t)}{\partial q_B} \Big|_{\dot{q}_A=0} \dot{q}_B(t); \quad (\text{Eq. II-66})$$

et sous les mêmes hypothèses que précédemment, les équations donnant les éléments de matrice de ρ_1 et de \mathcal{K}_1 s'écrivent :

$$\langle \mu | \rho_1 | \nu \rangle = - \frac{i \hbar}{e_\mu + e_\nu} \frac{v_\mu^2 - v_\nu^2}{(u_\mu v_\nu + u_\nu v_\mu)^2} \left\{ \dot{q}_A \langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q_A} | \nu \rangle + \dot{q}_B \langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q_B} | \nu \rangle \right\} \quad (\text{Eq. II-67})$$

et :

$$\langle \mu | \mathcal{K}_1 | \bar{\nu} \rangle = - \frac{i \hbar}{e_\mu + e_\nu} \frac{u_{\mu\nu} + u_{\nu\mu}}{(u_{\mu\nu} + u_{\nu\mu})^2} \left\{ \dot{q}_A \langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q_A} | \nu \rangle + \dot{q}_B \langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q_B} | \nu \rangle \right\}. \quad (\text{Eq. II-68})$$

On en déduit trois paramètres de masse: les deux premiers qu'on peut appeler "diagonaux" correspondent au cas discuté précédemment avec $q = q_A$ et $q = q_B$ respectivement :

$$M(q_A) = \hbar^2 \sum_{\mu\nu} \frac{1}{e_\mu + e_\nu} \frac{\left| \langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q_A} | \nu \rangle \right|^2}{(u_{\mu\nu} + u_{\nu\mu})^2}, \quad (\text{Eq. II-69})$$

avec une définition analogue pour $M(q_B)$.

Le troisième est un terme de couplage :

$$M(q_A, q_B) = \hbar^2 \sum_{\mu\nu} \frac{1}{e_\mu + e_\nu} \frac{\langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q_A} | \nu \rangle \langle \mu | \frac{\partial \rho_0}{\partial q_B} | \nu \rangle}{(u_{\mu\nu} + u_{\nu\mu})^2}. \quad (\text{Eq. II-70})$$

L'énergie cinétique collective s'écrit bien entendu comme [II-18]:

$$K = \frac{1}{2} M(q_A) \dot{q}_A^2 + \frac{1}{2} M(q_B) \dot{q}_B^2 + M(q_A, q_B) \dot{q}_A \dot{q}_B \quad (\text{Eq. II-71})$$

d) cas des rotations collectives :

Enfin, pour les rotations collectives, la variable associée est θ , l'angle de la rotation autour d'un axe i quelconque. La solution $\mathcal{R}_0(t)$ satisfaisant à la condition d'adiabaticité peut alors être choisie dans la famille $\mathcal{R}_0(\theta)$ des solutions de même énergie (à cause de l'invariance par rotation) que celle de la solution statique \mathcal{R}_{st} définie par :

$$\mathcal{R}_0(t) = \mathcal{R}_0(\theta(t)) = e^{-i\theta\mathfrak{J}_i} \mathcal{R}_{st} e^{i\theta\mathfrak{J}_i}. \quad (\text{Eq. II-72})$$

Avec :

$$\mathfrak{J}_i = \begin{pmatrix} J_i & 0 \\ 0 & J_i^* \end{pmatrix}. \quad (\text{Eq. II-73})$$

On en déduit :

$$\rho_0(t) = \rho_0(\theta(t)) = e^{-i\theta J_i} \rho_{st} e^{i\theta J_i}. \quad (\text{Eq. II-74})$$

L'opérateur de cranking s'obtient directement par dérivation de la dernière équation, ce qui nous donne :

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial \theta} = i \left[\rho_0(\theta), J_i \right]. \quad (\text{Eq. II-75})$$

Lorsqu'on l'introduit dans l'expression du paramètre de masse adiabatique $M(q)$ on détermine le moment d'inertie selon l'axe i qui est :

$$\mathfrak{I}_i = \hbar^2 \sum_{\mu\nu} \frac{(u_{\mu\nu} - u_{\nu\mu})^2}{e_{\mu} + e_{\nu}} \left| \langle \mu | J_i | \nu \rangle \right|^2, \quad (\text{Eq. II-76})$$

c'est-à-dire la formule du cranking d'Inglis [II-15] avec corrélation d'appariement [II-13,16,9,11a,19].

e) choix des variables collectives :

Les niveaux de basse énergie des noyaux pairs-pairs, qui ne peuvent être décrits en termes d'excitation de particules individuelles, ont des transitions électromagnétiques vers le fondamental d'une intensité bien supérieure à celle de niveaux individuels. On les interprète comme les effets d'un mouvement collectif (de rotation ou de vibration) auquel participent des nucléons de la surface qui oscille, provoquant des déformations du noyau (des changements de volume donneraient lieu en général à des énergies bien plus élevées).

Pour décrire la forme d'un noyau, on peut développer le rayon-vecteur définissant sa surface, en supposant une surface non diffuse (de type goutte liquide, c'est à dire à bord abrupt):

$$R(\theta, \varphi) = R_0 \left\{ 1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) \right\}. \quad (\text{Eq. II-77})$$

En arrêtant ce développement à l'ordre 0, la surface est sphérique, et α_0 est une modification de volume. L'ordre 1 correspond à des termes associés au mouvement du centre de masse.* Compte tenu de l'incompressibilité de la matière nucléaire, et en imposant au centre de masse de coïncider avec l'origine du repère, nous pouvons nous restreindre aux termes d'ordre $\lambda \geq 2$. En fait les termes $\lambda = 2$ apparaissent [II-20] comme étant les plus importants et seront seuls pris en compte. Pour des petites valeurs des paramètres $\alpha_{2\mu}$ ils correspondent à des formes ellipsoïdales.

On a donc à présent :

$$R(\theta, \varphi) = R_0 \left\{ 1 + \sum_{\mu=-2}^{+2} \alpha_{2\mu} Y_{2\mu}(\theta, \varphi) \right\}, \quad (\text{Eq. II-78})$$

ce qui revient à considérer 5 variables collectives $\alpha_{2\mu}$.

En nous plaçant dans le référentiel d'inertie, où les axes du

* Notons que pour assurer la conservation de volume R_0 dépend des paramètres $\alpha_{\lambda\mu}$.

repère coïncident avec les axes principaux d'inertie, ces 5 variables se décomposent en 2 variables réelles et indépendantes $a_0 = \alpha_{20}$ et $a_2 = \alpha_{22}$, décrivant la forme du noyau, auxquelles il faut ajouter les 3 angles d'Euler ξ_1 pour définir l'orientation du référentiel d'inertie.

Bohr [II-18,20] a introduit à la place de a_0 , a_2 deux variables β (positive) et γ qui leur sont reliées par :

$$a_0 = \beta \cos \gamma, \quad (\text{Eq. II-79})$$

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma. \quad (\text{Eq. II-80})$$

Si on ne spécifie pas la direction de l'axe de symétrie (espace non polarisé), un seul sextant (par exemple γ allant de 0° à 60°) suffit à décrire toutes les formes du noyau. En particulier, on note que les formes sont axiales pour $\gamma = 0^\circ, 60^\circ, 120^\circ$ (prolate si $\cos \gamma > 0$ et oblate si $\cos \gamma < 0$).

En faisant dépendre du temps les 5 variables collectives ($\alpha_{2\mu}$ ou β, γ, ξ_1), on montre [II-20] que l'énergie cinétique classique se met sous la forme suivante (avec des notations usuelles) dans le référentiel d'inertie:

$$K = \frac{1}{2} M_{\beta\beta} \dot{\beta}^2 + \frac{1}{2} M_{\gamma\gamma} \dot{\gamma}^2 + M_{\beta\gamma} \dot{\beta}^2 \dot{\gamma}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \mathcal{I}_i \omega_i^2.$$

(Eq. II-81)

Nous obtenons par conséquent l'expression de l'énergie totale sous la forme du hamiltonien classique de Bohr [II-18] (qui ne contient que des termes en puissances au plus deux des dérivées premières par rapport au temps puisque nous avons supposé un mouvement collectif lent), où l'énergie HFB joue le rôle de l'énergie potentielle, et l'énergie cinétique s'exprime à partir des 6 paramètres d'inertie que nous venons de déterminer. Afin d'obtenir une équation de Schrödinger il nous faut à présent quantifier le hamiltonien collectif puisque à l'opposé d'autres modèles tels la méthode de la coordonnée génératrice (GCM) [II-21] qui peuvent conduire directement à une telle équation, nous faisons une approximation de type classique.

V) Requantification du hamiltonien de Bohr :

La quantification du hamiltonien de Bohr selon la prescription de Schrödinger-Pauli [II-22] donne pour les énergies cinétiques de vibration T_{vib} et de rotation T_{rot} les expressions suivantes [II-23,24] (en fonction ici des coordonnées cartésiennes dans le sextant $b_0 = \beta \cos \gamma$ et $b_2 = \beta \sin \gamma$) avec $b_0 = a_0$ et $b_2 = \sqrt{2} a_2$ pour un espace de mesure $D db_0 db_2 d\Omega$:

$$T_{\text{vib}} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=0,2} D^{-1} \frac{\partial}{\partial b_j} D G^{\lambda\mu} \frac{\partial}{\partial b_i} \quad (\text{Eq. II-82})$$

$$T_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \frac{I_k^2}{\mathfrak{I}_k}, \quad (\text{Eq. II-83})$$

où I_k désigne ici les composantes du moment angulaire et \mathfrak{I}_k les moments d'inertie suivant les axes principaux k . Dans ce qui précède, la matrice G et la mesure $D db_0 db_2 d\Omega$ sont définies en fonction des paramètres de masses B_{00} , B_{02} , B_{22} (associés aux directions b_0 et b_2) et des moments d'inertie par :

$$G = \begin{pmatrix} B_{00} & B_{02} \\ B_{02} & B_{22} \end{pmatrix}^{-1} \quad (\text{Eq. II-84})$$

$$D = \left[(B_{00} B_{22} - B_{02}^2) \prod_k \mathfrak{I}_k \right]^{1/2} \quad (\text{Eq. II-85})$$

Les paramètres de masse associés aux variables b_0 , b_2 notés ici B_{mn} (où $m, n = 0, 2$) sont reliés par simple changement de variables à $B_{\beta\beta}$, $B_{\gamma\gamma}$ et $B_{\beta\gamma}$ par :

$$B_{00} = \cos^2 \gamma B_{\beta\beta} - \frac{2 \cos \gamma \sin \gamma}{\beta} B_{\beta\gamma} + \frac{\sin^2 \gamma}{\beta^2} B_{\gamma\gamma} \quad (\text{Eq. II-86})$$

$$B_{02} = \cos\gamma \sin\gamma B_{\beta\beta} + \frac{\cos^2\gamma - \sin^2\gamma}{\beta} B_{\beta\gamma} - \frac{\cos\gamma \sin\gamma}{\beta^2} B_{\gamma\gamma} \quad (\text{Eq. II-87})$$

$$B_{22} = \sin^2\gamma B_{\beta\beta} + \frac{2 \cos\gamma \sin\gamma}{\beta} B_{\beta\gamma} + \frac{\cos^2\gamma}{\beta^2} B_{\gamma\gamma} . \quad (\text{Eq. II-88})$$

Nous pouvons ici remarquer que la séparation de la partie cinétique du hamiltonien en termes de rotation et de vibration n'est que formelle : rotation et vibration sont couplées au travers de D, de la dépendance en déformation de D, G et des paramètres d'inertie.

VI) Conclusion :

L'énergie totale ATDHFB s'exprime comme la somme d'une énergie potentielle (qui n'est autre que l'énergie HFB) ne dépendant que de la matrice densité généralisée paire par renversement du sens du temps $\mathcal{R}_0(t)$, et d'une énergie cinétique dépendant de \mathcal{R}_0 et de X . Elle est identifiable au hamiltonien (classique) phénoménologique de Bohr [II-18].

Le choix des degrés de liberté quadrupolaires comme variables collectives dynamiques permet d'obtenir une expression de la partie cinétique comme somme de termes de vibration et de termes de rotation. Les paramètres de masse et moments d'inertie sont calculés à l'approximation du cranking d'Inglis de façon self-consistante par rapport au chemin adiabatique.

La résolution de l'équation de Schrödinger obtenue par la quantification du Hamiltonien de Bohr sera exposée dans le chapitre IV. Dans le chapitre III nous exposerons la méthode approchée que nous avons employée pour déterminer l'énergie potentielle et plus généralement les solutions $\mathcal{R}_0(t)$.

Chapitre III

Méthodes semi-classiques

I) Introduction :

On veut résoudre l'équation T-paire qui définit le chemin adiabatique. Compte tenu de ce que dans ce travail nous voulons décrire au mieux la partie de basse énergie de la "force" (strength function) associée aux opérateurs collectifs concernés Q_i , nous ferons ici l'hypothèse d'un chemin adiabatique résultat de calculs CHFB (où les champs T-pairs de contrainte sont proportionnels aux Q_i). Ce choix est justifié par des théorèmes bien connus (cf. par exemple la discussion de [II-11a,b]) sur les règles de somme qui relient la description du mouvement collectif à basse énergie avec de telles solutions self-consistantes.

On est donc conduit à résoudre une équation du type :

$$\left[\mathcal{H}_0 - \sum_i \lambda_i Q_i, \mathcal{R}_0 \right] \approx 0. \quad (\text{Eq. III-1})$$

qui se réduit quand on traite les corrélations d'appariement sous une hypothèse de BCS avec force de séniorité [II-61], aux deux équations suivantes :

$$\left[h_0 - \sum_i \lambda_i Q_i, \rho_0 \right] \approx 0 \quad (\text{Eq. III-2})$$

$$h_0 \mathcal{K}_0 + \mathcal{K}_0 h_0 + \Delta_0 - \Delta_0 \rho_0 - \rho_0 \Delta_0 \approx 0 \quad (\text{Eq. III-3})$$

(où la dernière est l'équation usuelle du gap [III-1]).

Pour la dynamique collective quadrupolaire, l'équation CHF correspondante serait donc :

$$\left[h_0 - \lambda_1 Q_{20} - \lambda_2 Q_{22}, \rho_0 \right] \approx 0. \quad (\text{Eq. III-4})$$

où Q_{20} et Q_{22} sont les moments quadrupolaires axial et non axial (avec des notations usuelles).

De tels calculs triaxiaux ont été réalisés selon des méthodes itératives avec des interactions soit de type Skyrme [III-4] soit de type Gogny [III-5,6]. Ils sont assez lourds numériquement.

Le présent chapitre expose une méthode qui, à partir d'un développement semi-classique de la densité, permet d'approcher de façon simple* la solution statique ρ_0 ainsi que son énergie, et ce sous les mêmes hypothèses, c'est-à-dire :

- une interaction effective de type Skyrme
(ici on utilise SIII [III-7])
- le traitement des corrélations d'appariement sous une hypothèse de BCS (utilisant en outre une force de séniorité)
- un chemin adiabatique correspondant à une équation CHF avec corrélations d'appariement sous contraintes quadrupolaires.

II) Méthodes semi-classiques :

a) Théorème de Strutinsky :

L'énergie de liaison d'un noyau peut s'écrire comme une somme de deux termes. Le premier est l'énergie moyenne au sens de l'approximation semi-classique et correspond à l'énergie de goutte liquide, le second terme contient, lui, les oscillations dues à des fluctuations quantiques, les effets de couches. (Le spectre des états individuels d'un noyau ne présente pas en effet des niveaux régulièrement espacés mais des "paquets" de niveaux regroupés en couches.)

Pour calculer l'énergie totale, Strutinsky a proposé d'ajouter à l'énergie de goutte liquide ces effets de couches qui sont des corrections quantiques calculées à partir du modèle en couches, en décomposant la densité nucléaire comme :

$$\rho = \tilde{\rho} + \delta\rho, \quad (\text{Eq. III-5})$$

où $\tilde{\rho}$ est la partie moyenne de la densité (au sens de moyennée sur les effets de couches) résultant d'un lissage. Et $\delta\rho$ la partie associée aux effets de couches.

* Cette approximation s'avère utile en pratique quand il s'agit de calculer en plus de la solution statique les dérivées pour déterminer les opérateurs de cranking (cf chapitre IV).

Cette détermination phénoménologique de l'énergie est fondée microscopiquement. En effet, il a été montré [III-8,9] que l'énergie Hartree-Fock peut s'écrire comme la somme d'une partie moyenne correspondant au résultat de la goutte liquide (et à l'énergie moyenne de Strutinsky) et d'une partie oscillante qu'on peut identifier à la correction de couches calculée par la méthode de Strutinsky. Lorsqu'on développe l'énergie HF :

$$E_{\text{HF}}(\rho) = \text{Tr}(t\rho) + \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \text{Tr}_1(\rho \tilde{V}\rho) \quad (\text{Eq. III-6})$$

autour de $\tilde{\rho}$ on obtient l'équation :

$$E_{\text{HF}}(\rho) = \tilde{E} + E_{\text{osc}}(\delta\rho) + O(\delta\rho^2) \quad (\text{Eq. III-7})$$

connue sous le nom de théorème de Strutinsky .

Avec :

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \text{Tr}(t\tilde{\rho}) + \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \text{Tr}_1(\tilde{\rho} \tilde{V}\tilde{\rho}) \\ &= E_{\text{HF}}(\tilde{\rho}) \end{aligned} \quad (\text{Eq. III-8})$$

et

$$\begin{aligned} E_{\text{osc}}(\delta\tilde{\rho}) &= \text{Tr} \left\{ (k + \text{Tr}_1 \tilde{V}\tilde{\rho}) \delta\rho \right\} \\ &= \text{Tr} (h_{\text{HF}}(\tilde{\rho}) \delta\rho). \end{aligned} \quad (\text{Eq. III-9})$$

Ce développement converge rapidement [III-9,10,11]: pour un noyau du milieu de la table des noyaux, le premier terme \tilde{E} vaut typiquement 1000 Mev, le second 10 Mev et tous les autres termes contribuent pour moins de 1 Mev.

Ce qui précède nous fournit une justification de l'utilisation de méthodes semi-classiques [III-12]. En effet, on peut montrer que la matrice densité moyennée à la Strutinsky $\tilde{\rho}$ est équivalente à un développement semi-classique en puissances de \hbar (tronqué à l'ordre 4) [III-13]. On peut scinder l'énergie Hartree-Fock en deux parties : l'une \tilde{E} associée à la densité moyenne $\tilde{\rho}$ (équivalente à l'énergie moyenne de Strutinsky), découle d'un principe variationnel [III-14], l'autre qui est une énergie de correction de couches peut être ajoutée perturbativement. Cette dernière peut être calculée avec une très bonne précision [III-14] à partir de $\tilde{\rho}$ comme on le verra au §-II de ce chapitre.

Autrement dit, la self-consistance n'est importante que pour la densité moyenne que l'on peut obtenir par des méthodes semi-classiques avec principe variationnel.

La méthode EVM (expectation value method) [III-15] qui a été l'outil de ce travail met en oeuvre ces différents points théoriques. Elle consiste, comme on le verra par la suite, en la définition à partir d'une densité moyenne déterminée de façon self-consistante par un calcul variationnel ETF (extended Thomas-Fermi), de l'énergie totale comme l'énergie du déterminant de Slater construit sur les fonctions propres de $h(\rho_{\text{ETF}})$ ce qui correspond à une seule itération d'une procédure Hartree-Fock.

b) Interaction effective de Skyrme, hamiltonien HF de Skyrme :

Les interactions effectives de type Skyrme [III-16,17] sont des interactions phénoménologiques (qui peuvent être comprises comme des paramétrisations simples de la matrice G de Brueckner [III-18]) de portée nulle mais, comportant des termes dépendant des vitesses pour simuler une portée finie de l'interaction effective.

Elles s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 V_{\text{sky}}(1,2) = & t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_{12}) \\
 & + \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_\sigma) (k'^2 \delta(\vec{r}_{12}) + \delta(\vec{r}_{12}) k^2) \\
 & + t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \overleftarrow{k'} \delta(\vec{r}_{12}) \overrightarrow{k} + \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \rho^\alpha(\vec{R}) \delta(\vec{r}_{12}) \\
 & + iW_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) (\overleftarrow{k'} \wedge \overrightarrow{k} \delta(\vec{r}_{12})) , \qquad \qquad \qquad \text{(Eq. III-10)}
 \end{aligned}$$

où :

$$\vec{k} = \frac{\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2}{2i} \quad \vec{k}' = - \frac{\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2}{2i} \quad (\text{Eq. III-11})$$

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \quad \vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (\text{Eq. III-12})$$

et,

$$P_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (\text{Eq. III-13})$$

est l'opérateur d'échange de spin.

Plusieurs jeux de valeurs ont été proposés pour les 10 paramètres de cette force, dont celui appelé SIII [III-7] retenu dans ce travail** et qui correspond à :

$$\begin{array}{lll} t_0 = -1128.75 \text{ Mev.fm}^3 & x_0 = 0.45 & \\ t_1 = 395.00 \text{ Mev.fm}^5 & x_1 = 0.00 & \alpha = 1.00 \\ t_2 = -95.00 \text{ Mev.fm}^5 & x_2 = 0.00 & W_0 = 120.00 \text{ Mev.fm}^5 \\ t_3 = 14000.00 \text{ Mev.fm}^{3+3\alpha} & x_3 = 1.00 & \end{array}$$

De telles interactions de type Skyrme (notamment SIII) ont permis de réaliser des calculs self-consistants microscopiques à l'approximation HF avec succès tant pour les énergies de liaison et les moments multipolaires que pour les rayons et même les barrières de fission [III-20,21].

L'intérêt majeur de la forme analytique de l'interaction de Skyrme réside dans l'écriture possible de l'énergie HF comme intégrale d'une densité d'énergie où les parties non locales de la densité sont exprimées par des densités locales [III-17].

* L'orientation des flèches indique le côté où agit l'opérateur ∇ .

** Le choix de cette interaction est motivé en particulier par les bons résultats spectroscopiques obtenus par les descriptions en termes de rotor+qp dans les noyaux impairs et impair-impairs bien déformés [III-19,1].

Cette énergie s'écrit :

$$E_{\text{HF}} = \int d^3\vec{r} \left[\mathcal{H}_{\text{sky}}(\rho(\vec{r}), \tau(\vec{r}), \vec{J}(\vec{r})) + \mathcal{H}_{\text{coul}}(\vec{r}) \right] . \quad (\text{Eq. III-14})$$

Les densités ρ, τ, \vec{J} s'expriment (cf plus bas) à partir des fonctions propres $\varphi_{\alpha}^{\tau}(\vec{r})$ de l'hamiltonien à 1 corps h_{sky}^{τ} (τ étant l'isospin) qui intervient dans l'équation différentielle (équation de Schrödinger) que l'on obtient en minimisant l'énergie :

$$\begin{aligned} h_{\text{sky}}^{\tau} \varphi_{\alpha}^{\tau}(\vec{r}) &= \left[-\vec{\nabla} \frac{\hbar}{2m_{\tau}^*(\vec{r})} \vec{\nabla} + V_{\tau}(\vec{r}) - i \vec{W}_{\tau}(\vec{r}) \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{\sigma} \right) \right] \varphi_{\alpha}^{\tau}(\vec{r}) \\ &= e_{\alpha} \varphi_{\alpha}^{\tau}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (\text{Eq. III-15})$$

où le potentiel local $V_{\tau}(\vec{r})$, la masse effective $m_{\tau}^*(\vec{r})$ et le potentiel de spin-orbite $\vec{W}_{\tau}(\vec{r})$ sont donnés par :

$$V_{\tau}(\vec{r}) = \frac{\partial(\mathcal{H}_{\text{sky}} + \mathcal{H}_{\text{coul}})}{\partial \rho_{\tau}(\vec{r})} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \rho_{\tau}(\vec{r})} \quad (\text{Eq. III-16})$$

$$\frac{\hbar}{2m_{\tau}^*(\vec{r})} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau_{\tau}(\vec{r})} \quad (\text{Eq. III-17})$$

$$\vec{W}_{\tau}(\vec{r}) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{J}_{\tau}(\vec{r})} \quad (\text{Eq. III-18})$$

On a de plus :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\tau} \sum_{\alpha=1}^{N_{\tau}} |\varphi_{\alpha}^{\tau}(\vec{r})|^2 \quad (\text{Eq. III-19})$$

$$\tau(\vec{r}) = \sum_{\tau} \sum_{\alpha=1}^{N_{\tau}} |\vec{\nabla} \varphi_{\alpha}^{\tau}(\vec{r})|^2 \quad (\text{Eq. III-20})$$

$$\vec{J}(\vec{r}) = \sum_{\tau} \left(-i \sum_{\alpha=1}^{N_{\tau}} \varphi_{\alpha}^{\tau}(\vec{r})^* \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{\sigma} \right) \varphi_{\alpha}^{\tau}(\vec{r}) \right). \quad (\text{Eq. III-21})$$

c) Méthode ETF :

La méthode ETF repose sur le développement semi-classique en puissances de \hbar introduit par Wigner [III-22] et Kirkwood [III-23] que nous allons présenter dans le cas simple d'une interaction locale et en ne considérant qu'une seule espèce de nucléons pour simplifier l'exposé.

A partir des e_α déterminés par :

$$\hbar \varphi_\alpha(\vec{r}) = (t + V(\vec{r})) \varphi_\alpha(\vec{r}) = e_\alpha \varphi_\alpha(\vec{r}) \quad (\text{Eq. III-22})$$

on définit la matrice densité de Bloch :

$$C(\vec{r}, \vec{r}', \beta) = \sum_\alpha \varphi_\alpha(\vec{r}')^* \varphi_\alpha(\vec{r}) e^{-\beta e_\alpha}. \quad (\text{Eq. III-23})$$

La matrice densité $\rho(\vec{r}, \vec{r}', \lambda)$ où λ est l'énergie du niveau de Fermi déterminé par la condition:

$$\int \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} = N \quad (\text{Eq. III-24})$$

s'obtient par transformation de Laplace inverse de $\frac{C(\vec{r}, \vec{r}', \beta)}{\beta}$.

Les densités locales sont obtenues en prenant les parties diagonales :

$$\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r}) \quad (\text{Eq. III-25})$$

$$\tau(\vec{r}) = \nabla_{\vec{r}} \cdot \nabla_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (\text{Eq. III-26})$$

Wigner et Kirkwood ont proposé de développer $C(\vec{r}, \vec{r}', \beta)$ autour de la matrice obtenue à l'approximation Thomas-Fermi :

$$C(\vec{r}, \vec{r}', \beta) = C_{TF}(\vec{r}, \vec{r}', \beta) \left[1 + \hbar X_1 + \hbar^2 X_2 + \dots + \hbar^n X_n + \dots \right], \quad (\text{Eq. III-27})$$

où :

$$C_{TF}(\vec{r}, \vec{r}', \beta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} e^{-\beta V\left(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}\right)} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta} (\vec{r}-\vec{r}')^2} \quad (\text{Eq. III-28})$$

et les X_n sont des fonctions de \vec{r}, \vec{r}' et β , contenant des combinaisons des dérivées jusqu'à l'ordre n du potentiel local $V(\vec{r})$.

En introduisant ce développement (Eq. III-27) dans les équations donnant les densités (Eq. III-25, III-26) on obtient les développements des densités locales en série de \hbar :

$$\rho(\vec{r}) = \rho_{TF}(\vec{r}) + \rho_2(\vec{r}) + \dots + \rho_n(\vec{r}) \quad (\text{Eq. III-29})$$

$$\tau(\vec{r}) = \tau_{TF}(\vec{r}) + \tau_2(\vec{r}) + \dots + \tau_n(\vec{r}) . \quad (\text{Eq. III-30})$$

Ces séries sont asymptotiques; en effet, les contributions séparées à n donné avec $n \geq 6$, divergent. On n'utilise par conséquent que les parties séparément convergentes $n \leq 4$ qu'on appelle $\rho_{ETF}(\vec{r})$ et $\tau_{ETF}(\vec{r})$.

Ecrivons ces densités locales à l'ordre 2 en \hbar pour alléger l'exposé :

$$\rho_{ETF}(\vec{r}) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (\lambda - V(\vec{r}))^{3/2} \theta(\lambda - V(\vec{r})) \left\{ 1 - \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{2m} \left[\Delta V (\lambda - V)^{-2} + \frac{1}{4} (\nabla V)^2 (\lambda - V)^{-3} \right] \right\}, \quad (\text{Eq. III-31})$$

* Pour un potentiel analytique, les contributions d'ordre impair en \hbar sont nulles [III-12].

et :

$$\tau_{\text{ETF}}(\vec{r}) = \frac{1}{5\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{5/2} (\lambda - V(\vec{r}))^{5/2} \theta(\lambda - V(\vec{r}))$$

$$\left\{ 1 - \frac{5}{8} \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{5}{3} \Delta V (\lambda - V)^{-2} - \frac{3}{4} (\nabla V)^2 (\lambda - V)^{-3} \right] \right\}.$$

(Eq. III-32)

où $\theta(x)$ est la fonction de Heavyside.

Il est à noter que ces quantités ne sont définies que dans la région (classiquement accessible) : $V(\vec{r}) \leq \lambda$. Au-delà des points tournants classiques, les quantités ρ_2 , τ_2 divergent (il en serait de même bien sûr pour ρ_4 et τ_4).

Pour résoudre le problème posé par ces divergences deux méthodes sont possibles: l'une consiste à resommer certains termes du développement de Wigner-Kirkwood [III-24], la seconde, retenue pour ce travail, consiste à exprimer la densité τ_{ETF} par ρ_{ETF} de façon à obtenir la fonctionnelle $\tau_{\text{ETF}}(\rho)$ pour laquelle on utilise un prolongement analytique au point tournant classique [III-12].

En effet, en éliminant les quantités λ , V et ses dérivées à l'aide des équations (Eq. III-31,32), et en ne conservant que les termes en \hbar^n , on obtient la fonctionnelle $\tau_{\text{ETF}}(\rho)$ à l'ordre n considéré.

Ainsi, à l'ordre 2 elle s'exprime comme :

$$\tau_{\text{ETF}}(\rho) = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \rho^{5/3} + \frac{1}{36} \frac{(\nabla\rho)^2}{\rho} + \frac{1}{3} \nabla^2 \rho.$$

(Eq. III-33)

Dans le cas d'une interaction de type Skyrme, on peut généraliser la fonctionnelle $\tau_{\text{ETF}}(\rho)$ qui reçoit alors une contribution de la partie non locale et obtenir la fonctionnelle $\mathcal{J}_{\text{ETF}}(\rho)$ pour la partie spin-orbite [III-27].

A l'ordre 2 en \hbar on trouve ainsi :

$$\begin{aligned} \tau_{\text{ETF}}^{\tau}(\rho) = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \left[\rho_{\tau}^{5/3} + \frac{1}{36} \frac{(\vec{\nabla}\rho_{\tau})^2}{\rho_{\tau}} + \frac{1}{3} \frac{\nabla^2 \rho_{\tau}}{\rho_{\tau}} + \frac{1}{6} \frac{\vec{\nabla}\rho_{\tau} \cdot \vec{\nabla}f_{\tau}}{f_{\tau}} \right. \\ \left. + \frac{1}{6} \rho_{\tau} \frac{\vec{\nabla}f_{\tau}}{f_{\tau}} - \frac{1}{12} \rho_{\tau} \left(\frac{\vec{\nabla}f_{\tau}}{f_{\tau}} \right)^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \rho_{\tau} \left(\frac{\vec{W}_{\tau}}{f_{\tau}} \right)^2 \right] \quad (\text{Eq. III-34}) \end{aligned}$$

$$\text{où l'on a noté : } f_{\tau} = \frac{m}{m_{\tau}^*(\vec{r})}, \quad (\text{Eq. III-35})$$

q étant l'isospin (\vec{W}_{τ} a été défini en (III-18)).

La densité \vec{J}_{ETF} au même ordre en \hbar s'écrit

$$\vec{J}_{\text{ETF}}^{\tau}(\rho) = - \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \frac{1}{f_{\tau}} \rho_{\tau} \vec{W}_{\tau}. \quad (\text{Eq. III-36})$$

Les expressions à l'ordre 4 sont nettement plus compliquées et peuvent être trouvées dans les références [III-12,27]. Dans ce travail l'énergie ETF a été calculée en utilisant les fonctionnelles τ_{ETF} et \vec{J}_{ETF} développées jusqu'à l'ordre 4 en \hbar . La prise en considération de l'ordre 4 est essentielle pour obtenir des énergies de déformation correctes [III-12]. A l'aide de ces relations entre τ_{ETF} et \vec{J}_{ETF} d'une part et ρ_{ETF} d'autre part, on voit que la densité d'énergie ne dépend plus que de ρ_{ETF} :

$$\mathcal{H}(\rho_{\text{ETF}}, \tau_{\text{ETF}}, \vec{J}_{\text{ETF}}) = \mathcal{H}(\rho_{\text{ETF}}(\vec{r})). \quad (\text{Eq. III-37})$$

La minimisation de l'énergie :

$$E_{\text{ETF}} = \int d^3\vec{r} \mathcal{H}(\rho_{\text{ETF}}(\vec{r})), \quad (\text{Eq. III-38})$$

avec les contraintes sur les bons nombres de particules conduit au calcul variationnel suivant :

$$\left(\frac{\partial}{\partial \rho_\tau} \int d^3\vec{r} \left[\mathcal{H}(\rho(\vec{r})) - \lambda_\tau \rho_\tau(\vec{r}) \right] \right)_{\text{ETF}} = 0 \quad (\text{Eq. III-39})$$

qui conduit à un système d'équations différentielles d'ordre 4 non linéaires couplées pour ρ_n et ρ_p dont la résolution s'avère difficile. Pour cette raison, nous avons choisi de restreindre l'espace variationnel des densités ρ_n et ρ_p à celui de fonctions de Fermi généralisées [III-12]:

$$\rho_\tau(r) = \frac{\rho_{0\tau}}{\left[1 + e^{\left\{ \frac{l(\vec{r})}{\alpha_\tau} \right\}} \right]^{\gamma_\tau}} \quad (\text{Eq. III-40})$$

où la fonction l est définie, dans le cas sphérique, par :

$$l(\vec{r}) = r - R_{0\tau}$$

Elle est donc dans ce cas la distance d'un point à la surface effective du noyau. Dans le cas de déformations quelconques :

$$l(\vec{r}) = \frac{\Phi(x, y, z)}{\left| \vec{\nabla}_{xyz} \Phi(x, y, z) \right|}$$

Dans la formule (III-40) le paramètre γ_τ est appelé asymétrie de surface. Dans ce travail, on a pris $\gamma_\tau = 1$ (cf chapitre V).

Dans ce qui précède, on définit :

$$\Phi(x, y, z) = \sqrt{\pi(x, y, z) - \pi_{\min}} - \sqrt{-\pi_{\min}} \quad (\text{Eq. III-41})$$

où $\pi(x, y, z) = 0$ est la surface de référence, et π_{\min} le minimum absolu de la fonction π .

On voit donc que la densité retenue est de type Fermi suivant la normale à la surface de référence.

Si on se restreint aux formes ellipsoïdales on a :

$$\pi(x,y,z) = \frac{x^2}{R_x^2} + \frac{y^2}{R_y^2} + \frac{z^2}{R_z^2} - 1 = 0. \quad (\text{Eq. III-42})$$

Et, donc dans le cas sphérique :

$$\pi(x,y,z) = (x^2 + y^2 + z^2) / R_{0\tau}^2 - 1 = 0. \quad (\text{Eq. III-43})$$

Les paramètres $\rho_{0\tau}$, α_τ et les rayons de la densité sont déterminés par la minimisation de l'énergie semi-classique (Eq. III-40) et les conditions sur les nombres de nucléons. Cependant, des calculs portant sur un grand nombre de noyaux et sur un grand domaine de déformations ($0 \leq \beta \leq 0.6$, $0 \leq \gamma \leq 60^\circ$) ont montré [III-28]* que les paramètres $\rho_{0\tau}$ et α_τ sont pratiquement constants. Il suffit par conséquent d'optimiser les paramètres au point sphérique ($\pi(x,y,z)$ donnée par III-42) et d'ajuster le rayon $R_{0\tau}$ pour tout autre déformation par la condition de normalisation de la densité (Eq. III-24).

d) Méthode EVM :

L'inclusion des effets de couches peut être réalisée de deux manières différentes. Dans la première on ajoute à l'énergie ETF (partie moyenne de l'énergie) les corrections de couches calculées par la méthode de Strutinsky [III-11] à partir des e_α donnés par :

$$\begin{aligned} & h_{\text{s ky}}^\tau (\rho_{\text{ETF}}) \varphi_\alpha^\tau(\vec{r}) \\ &= \left[-\vec{\nabla} \frac{\hbar}{2m_\tau^*(\vec{r})_{\text{ETF}}} \vec{\nabla} + V_\tau(\vec{r})_{\text{ETF}} - i W_\tau(\vec{r})_{\text{ETF}} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{\sigma} \right) \right] \hat{\varphi}_\alpha^\tau(\vec{r}) \\ &= e_\alpha \hat{\varphi}_\alpha^\tau(\vec{r}) . \end{aligned} \quad (\text{Eq. III-44})$$

* cf. aussi chapitre V.

Dans la seconde méthode appelée EVM [III-15,12], à partir des $\hat{\varphi}_\alpha$ solutions de (Eq.III-44), on construit un déterminant de Slater dont on calcule l'énergie :

$$E_{EVM} = \langle \hat{\Phi} | H | \hat{\Phi} \rangle$$

$$= \int d^3\vec{r} \mathcal{H}(\rho, \tau, \vec{j}), \quad (\text{Eq. III-45})$$

avec les densités définies comme en (Eq. III-19,21), qui contiennent bien entendu des effets de couches.

Ces deux méthodes d'inclusion des effets de couches seront comparées sur la base de résultats numériques dans le chapitre VI.

Deux restrictions de notre approche sont à noter. D'une part on se limite aux surfaces nucléaires ellipsoïdales (Eq.III-42) ce qui exclut tout autre mode de déformation (à la différence d'un calcul CHF). D'autre part, pour simplifier le calcul du hamiltonien à un corps $h_{sky}^\tau(\rho_{ETF})$, nous n'avons pris en considération que les expressions analytiques reliant $\tau_{ETF}, \vec{j}_{ETF}$ à ρ_{ETF} évaluées à l'ordre 2 en \hbar . Il demeure que les densités locales $\rho_{ETF}^\tau(\vec{r})$ ont été évaluées de façon self-consistante par minimisation de l'énergie semi classique calculée à l'ordre 4 en \hbar .

Ce calcul non self-consistant correspond donc en pratique à une itération Hartree-Fock, c'est à dire à la résolution de :

$$\left[h(\tilde{\rho}), \rho \right] = 0 \quad (\text{Eq. III-46})$$

pour un "hamiltonien de HF " fixé.

* Dans le calcul de l'énergie ETF on utilise des intégrations par parties qui permettent de ne pas employer explicitement les expressions très lourdes [III-27] au 4^{ème} ordre en \hbar des densités pour une interaction de Skyrme.

III) Prise en compte approchée de certaines corrélations :

a) Corrélations d'appariement à l'approximation de BCS :

L'énergie totale du noyau s'écrit à l'approximation de BCS :

$$\begin{aligned}
 E &= \langle \text{BCS} | H | \text{BCS} \rangle \\
 &= \sum_{\alpha=1}^{\infty} \langle \alpha | t | \alpha \rangle v_{\alpha}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^{\infty} \langle \alpha \beta | \tilde{V}^{\text{eff}} | \alpha \beta \rangle v_{\alpha}^2 v_{\beta}^2 \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta=1} \langle \alpha \bar{\alpha} | \tilde{V}^{\text{eff}} | \beta \bar{\beta} \rangle u_{\alpha} v_{\alpha} u_{\beta} v_{\beta} \quad , \quad (\text{Eq. III-47})
 \end{aligned}$$

le dernier terme étant l'énergie de condensation de paires.

On obtient alors l'équation variationnelle supplémentaire provenant de la minimisation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial v_{\alpha}} \langle \text{BCS} | H | \text{BCS} \rangle = 0. \quad (\text{Eq. III-48})$$

On en déduit, avec les conditions (II-22), les relations suivantes sur les u et les v :

$$u_{\alpha}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{e^{-\lambda}}{\sqrt{(e^{-\lambda})^2 + \Delta_{\alpha}^2}} \right] \quad (\text{Eq. III-49})$$

$$v_{\alpha}^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-\lambda}}{\sqrt{(e^{-\lambda})^2 + \Delta_{\alpha}^2}} \right] \quad (\text{Eq. III-50})$$

où Δ_{α} est donné à partir de la même interaction effective que pour le champ self-consistant à un corps h par:

$$\Delta_{\alpha} = - \sum_{\beta > 0} \langle \alpha \bar{\alpha} | \tilde{V}^{\text{eff}} | \beta \bar{\beta} \rangle u_{\beta} v_{\beta} . \quad (\text{Eq. III-51})$$

Une approximation de ce formalisme consiste à prendre une force de séniorité, c'est à dire que l'on considère l'élément de matrice $\langle \alpha\bar{\alpha} | \tilde{V}^{eff} | \beta\bar{\beta} \rangle$ constant dans le voisinage du niveau de Fermi λ et nul ailleurs soit:

$$\langle \alpha\bar{\alpha} | \tilde{V}^{eff} | \beta\bar{\beta} \rangle = -G \quad (\text{Eq. III-52})$$

avec $G > 0$ à cause du caractère attractif de l'interaction dans le canal $S = 0, T = 1$.

On en déduit :

$$\Delta_{\alpha} = \Delta_0 = G \sum_{\beta > 0} u_{\beta} v_{\beta} \quad (\text{Eq. III-53})$$

où \sum est une somme restreinte aux états voisins de λ .

En pratique, nous introduisons une coupure e_{coup} telle que la somme \sum ne prenne en compte que les états d'énergie $|e - \lambda| \leq e_{\text{coup}}$ (typiquement on prendra 5 Mev pour e_{coup}). Cette approximation est justifiée par la constatation qu'à l'approximation de BCS seuls les niveaux proches de Fermi donnent une contribution non négligeable au champ Δ (équations III-52, 53) à cause du terme uv .

Le fait d'utiliser une interaction différente pour les corrélations d'appariement peut être en principe justifié par des calculs microscopiques effectués pour dériver HFB de la même façon qu'on utilise la matrice G de Brueckner pour dériver HF [III-29, 30, 31], qui montrent que les interactions effectives pour le champ d'appariement Δ et pour le champ self-consistant h doivent être différentes.

Bien entendu, ces considérations ne justifient pas la constance de G , qui est introduite seulement pour des raisons de simplicité des calculs.

On tient compte des corrélations d'appariement dans la définition

des densités ρ , τ , \vec{J} , en les généralisant selon les équations (Eq. III-19, 20, 21) :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\tau} \sum_{\alpha=1}^{N_{\tau}} |\hat{\varphi}_{\alpha}^{\tau}(\vec{r})|^2 v_{\alpha}^2 \quad (\text{Eq. III-54})$$

$$\tau(\vec{r}) = \sum_{\tau} \sum_{\alpha=1}^{N_{\tau}} |\vec{\nabla} \hat{\varphi}_{\alpha}^{\tau}(\vec{r})|^2 v_{\alpha}^2 \quad (\text{Eq. III-55})$$

$$\vec{J}(\vec{r}) = \sum_{\tau} \left(-i \sum_{\alpha=1}^{N_{\tau}} \hat{\varphi}_{\alpha}^{\tau}(\vec{r})^* \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{\sigma} \right) \hat{\varphi}_{\alpha}^{\tau}(\vec{r}) \right) v_{\alpha}^2. \quad (\text{Eq. III-56})$$

On ajoute enfin à l'énergie obtenue en (Eq. III-45) l'énergie de condensation de paires qui s'écrit à présent :

$$E_{\text{pair}} = - \frac{G}{4} \left[\sum_{\alpha=1}^{\prime} v_{\alpha} \left(1 - v_{\alpha}^2 \right)^{1/2} \right]^2. \quad (\text{Eq. III-57})$$

où \sum^{\prime} signifie que dans cette somme n'interviennent que les états tels que $|e - \lambda| \leq e_{\text{coup}}$.

b) Correction du centre de masse :

Le hamiltonien nucléaire :

$$H = \sum_{i=1}^A \frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^A V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \quad (\text{Eq. III-58})$$

qui dépend des $3A$ coordonnées du système peut se mettre sous la forme :

$$H = H_{\text{INT}}(\xi_i) + \frac{P_{\text{CM}}^2}{2mA}, \quad (\text{Eq. III-59})$$

où

$$P_{\text{CM}} = \sum_{i=1}^A \vec{p}_i, \quad (\text{Eq. III-60})$$

et H_{INT} ne dépend plus que des $3(A - 1)$ coordonnées intrinsèques.

Le terme $(P_{\text{CM}}^2 / 2mA)$ induit dans H une énergie indésirable E_s due au mouvement du centre de masse :

$$\begin{aligned} E_s &= \frac{1}{2mA} \langle \hat{\Phi} | P_{\text{CM}}^2 | \hat{\Phi} \rangle \\ &= \frac{1}{2mA} \langle \hat{\Phi} | \sum_{i=1}^A \vec{p}_i^2 | \hat{\Phi} \rangle + \frac{1}{2mA} \langle \hat{\Phi} | \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^A \vec{p}_i \cdot \vec{p}_j | \hat{\Phi} \rangle \end{aligned} \quad (\text{Eq. III-61})$$

qu'on peut soustraire à l'énergie obtenue en (Eq.III-45) de manière à corriger de façon non self-consistante les résultats HF+BCS.

Cependant, l'interaction de Skyrme utilisée ayant été ajustée sans le terme à deux corps de \vec{p}^2 , seul le premier terme (à un corps) de l'énergie E_s sera pris en compte ici. En pratique, la correction du centre de masse se fait en remplaçant le terme $(\hbar^2 / 2m)$ par $[(1 - 1/A)\hbar^2 / 2m]$ aussi bien dans le hamiltonien à un corps h_{SKY} que dans l'énergie totale (Eq.III-46).

III) Conclusion :

La méthode EVM permet d'obtenir dans le temps d'une seule itération Hartree-Fock l'énergie de liaison des noyaux. Elle repose sur la détermination self-consistante semi-classique de la densité moyenne que rend possible l'utilisation d'interactions de type Skyrme. La densité moyenne est supposée être une fonction de Fermi généralisée et restreinte aux formes ellipsoïdales. Cette approximation limite notre étude dans son état actuel à celle des modes ellipsoïdaux. L'approche EVM va de plus nous permettre de calculer les opérateurs statiques de cranking ($\partial\rho_0 / \partial q$) en des temps de calcul raisonnables.

Les détails de calcul de la méthode EVM sont exposés dans le chapitre suivant.

Chapitre IV

Compléments analytiques

I) Introduction :

Lorsqu'on projette l'équation aux valeurs propres :

$$h_{\text{SKY}}^{\tau}(\rho_{\text{ETF}}) \hat{\varphi}_{\alpha}^{\tau}(\vec{r}) = e_{\alpha} \hat{\varphi}_{\alpha}^{\tau}(\vec{r}) \quad (\text{Eq. IV-1})$$

où τ est l'isospin, sur une base orthonormée de dimension finie M telle que :

$$|\hat{\varphi}_{\alpha}^{\tau}\rangle = \sum_{i=1}^M C_i^{\alpha} |i\rangle \quad (\text{Eq. IV-2})$$

on obtient l'équation matricielle suivante :

$$\sum_j \langle i | h_{\text{SKY}} | j \rangle C_j^{\alpha} = e_{\alpha} C_i^{\alpha} . \quad (\text{Eq. IV-3})$$

La connaissance des symétries du hamiltonien nucléaire H peut beaucoup nous aider dans le choix d'une base adaptée à la résolution de (eq. IV-3). En effet, si U est un opérateur unitaire de symétrie commutant avec H :

$$[H, U] = 0 \quad (\text{Eq. IV-5})$$

et qui de plus laisse invariant l'espace des états associés aux

orbites occupées, alors il commute également avec le hamiltonien à un corps h_{HF} [IV-1]. Par conséquent, partant de la densité ETF qui possède les symétries voulues, la solution (ρ, τ, \vec{J}) que nous cherchons satisfait les mêmes règles de commutation que $h_{SKY}(\rho_{ETF})$ et ρ_{ETF} .

Pour obtenir les équations Hartree-Fock, nous n'avons pas supposé d'autre symétrie du hamiltonien H que l'invariance par renversement du sens du temps. Dans l'étude que nous allons faire, nous imposons en plus au hamiltonien à un corps h d'être invariant par réflexion par rapport aux plans xoy , yoz et zox . (Ce choix est cohérent avec l'étude dynamique des modes ellipsoïdaux entreprise ici.) Pour ces symétries (triaxiales) une base d'oscillateur harmonique à trois dimensions est adaptée car elle permet de traiter séparément les trois directions de l'espace dans un repère cartésien.

L'invariance par rotation du hamiltonien de Bohr entraîne, autant sur les fonctions d'inertie $B_{mn}(\beta, \gamma)$ et $\mathfrak{I}_1(\beta, \gamma)$ que sur les fonctions propres, certaines relations de symétrie. Celles-ci vont nous aider dans le choix d'une base qui soit adaptée à la diagonalisation. L'étude de ces symétries et la méthode de diagonalisation seront rapidement présentées dans la dernière partie de ce chapitre.

II) Symétries triaxiales et de renversement du sens du temps :

a) Détermination de la base d'états propres :

Les trois opérateurs unitaires de symétrie (qui ne commutent pas entre eux) associés aux réflexions par rapport aux trois plans xoy, yoz et zox s'écrivent :

$$\Pi_i = P \cdot R_i(\pi) \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{Eq. IV-6})$$

où P est l'opérateur de parité et $R_i(\pi)$ est l'opérateur de rotation de π autour de l'axe i (agissant sur les parties d'espace comme de spin donné par) :

$$R_i(\pi) = R_i^{esp}(\pi) (-i \sigma_i). \quad (\text{Eq. IV-7})$$

A partir des Π_i on peut construire les observables suivantes qui, cette fois, commutent entre elles :

$$\Pi_{12} = i \Pi_1 \cdot \Pi_2 = \Pi_1^{esp} \cdot \Pi_2^{esp} \cdot \sigma_3 \quad (\text{Eq. IV-8})$$

$$\Pi_{123} = -\Pi_1 \cdot \Pi_2 \cdot \Pi_3 = \Pi_1^{esp} \cdot \Pi_2^{esp} \cdot \Pi_3^{esp} \quad (\text{Eq. IV-9})$$

Le premier opérateur correspond à une rotation de π autour de l'axe z, symétrie appelée signature, alors que le second n'est rien d'autre que l'opérateur parité ($\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$).

Les opérateurs Π_{12} et Π_{123} ainsi définis forment avec le hamiltonien à un corps h_{SKY} et \vec{S}^2 un ensemble complet d'observables qui commutent. Les fonctions propres solution de l'équation (Eq. IV-1) seront par conséquent notées :

$$|\hat{\varphi}_\alpha^\tau\rangle = |\alpha\rangle = |n \ q \ p \ \frac{1}{2}\rangle \quad (\text{Eq. IV-10})$$

où q et p sont les nombres quantiques associés aux opérateurs Π_{12} et P.

La forme de l'opérateur de renversement du sens du temps :

$$T = i \sigma_2 K_0 \quad (\text{Eq. IV-11})$$

(où K_0 est l'opérateur de conjugaison complexe)

conduit à faire le choix de phase suivant :

$$\Pi_2 T |n \ q \ p \ \frac{1}{2} \rangle = |n \ q \ p \ \frac{1}{2} \rangle, \quad (\text{Eq. IV-12})$$

qui assure la réalité des éléments de matrice de h_{SKY} dans la base α [IV-2,3] .

Puisque h_{SKY} commute avec T , les états $|\alpha\rangle$ et $|\bar{\alpha}\rangle = T |\alpha\rangle$ sont tous deux états propres de h avec la même valeur propre e_α . Par ailleurs, ils sont états propres de l'opérateur Π_{12} avec respectivement q et $-q$ comme valeur propre. En effet, les opérateurs Π_{12} et Π_2 vérifient la relation suivante :

$$\Pi_{12} \cdot \Pi_2 + \Pi_2 \cdot \Pi_{12} = 0. \quad (\text{Eq. IV-13})$$

En utilisant la commutation de $\Pi_2 T$ avec Π_{12} , et en faisant agir l'opérateur Π_2 à gauche, on obtient [IV-3]:

$$\Pi_{12} |\bar{\alpha}\rangle = -q |\bar{\alpha}\rangle \quad (\text{Eq. IV-14})$$

Il suffira donc d'effectuer le calcul des éléments de matrice et la diagonalisation pour $q = +1$ (avec $p = \mp 1$) et de multiplier par deux, pour chaque isospin, les contributions ainsi obtenues pour l'énergie totale .

b) Projection des états $|\alpha\rangle$ sur la base d'oscillateur :

Les états

$$|\alpha\rangle = |n\ q\ p\ \frac{1}{2}\rangle \quad (\text{Eq. IV-15a})$$

s'écrivent en fonction de ceux de l'oscillateur harmonique selon

$$|\alpha\rangle = \sum_{\substack{n_x\ n_y\ n_z \\ n_x\ n_y\ n_z}} C_{n_x\ n_y\ n_z\ \sigma_3}^\alpha |n_x\ n_y\ n_z\ \sigma_3\rangle \quad (\text{Eq. IV-15b})$$

où σ_3 vaut soit $+\frac{1}{2}$ soit $-\frac{1}{2}$.

Le choix de phase précédent (équation IV-11) conduit à définir les états de l'oscillateur de la façon suivante :

$$\langle \vec{r} | n_x\ n_y\ n_z \rangle = (i)^{n_y} \psi_{n_x}(\xi) \psi_{n_y}(\eta) \psi_{n_z}(\zeta) \quad (\text{Eq. IV-16})$$

où les ξ, η, ζ sont les coordonnées étirées définies par :

$$\xi = a_x x, \quad \eta = a_y y, \quad \zeta = a_z z. \quad (\text{Eq. IV-17a})$$

Avec :

$$a_x = \sqrt{\frac{m\ \omega_x}{\hbar}}, \quad a_y = \sqrt{\frac{m\ \omega_y}{\hbar}} \quad \text{et} \quad a_z = \sqrt{\frac{m\ \omega_z}{\hbar}}. \quad (\text{Eq. IV-17b})$$

Les ψ_n normalisées pour la mesure dx s'expriment en fonction des ξ, η, ζ comme :

$$\psi_{n_x}(\xi) = \sqrt{\frac{1}{a_x}} e^{-\xi^2/2} h_{n_x}(\xi), \quad (\text{Eq. IV-18})$$

où :

$$h_{n_x}(\xi) = \frac{1}{\left(\pi^{1/2} 2^{n_x} n_x!\right)^{1/2}} H_{n_x}(\xi) \quad (\text{Eq. IV-19})$$

et les $H_{n_x}(\xi)$ sont les polynômes de Hermite usuels.

La phase $(i)^y$ permet d'ailleurs d'obtenir des éléments de matrice de h_{sky} et des coefficients C réels.

Dans cette base, les nombres quantiques p et q s'expriment simplement. L'application de l'opérateur P sur un état

$$| i \rangle = | n_x n_y n_z \sigma_3 \rangle$$

nous donne :

$$p = (-1)^{n_x + n_y + n_z} \quad . \quad (\text{Eq. IV-20})$$

De même l'application de Π_{12} permet d'obtenir :

$$q = (-1)^{n_x + n_y} \sigma_3 \quad . \quad (\text{Eq. IV-21})$$

En fixant $q = +1$ on trouve que $\sigma_3 = +1$ (resp -1) si $n_x + n_y$ est pair (respectivement impair).

Pour tronquer la base d'oscillateur harmonique, nous avons utilisé la prescription sphérique :

$$n_x + n_y + n_z \leq N_0 \quad (\text{Eq. IV-22})$$

qui correspond à $(N_0 + 1)$ couches majeures à la sphéricité. Cette prescription est satisfaisante pour des noyaux peu déformés. Pour des déformations importantes il faudrait utiliser une prescription de troncature déformée:

$$\sum_{i=1}^3 \hbar \omega_i (n_i + \frac{1}{2}) \leq \hbar \omega_0 (N_0 + \frac{3}{2} + \frac{1}{2}) \quad (\text{Eq. IV-23})$$

avec la condition de conservation de volume :

$$\omega_0 = (\omega_x \cdot \omega_y \cdot \omega_z)^{1/3} \quad . \quad (\text{Eq. IV-24})$$

La troncature de la base entraîne cependant une dépendance de l'énergie en fonction des paramètres de la base a_x, a_y, a_z . Une prescription convenable [IV-2,4] consiste à relier ces paramètres à ceux qui caractérisent la déformation de la densité ellipsoïdale $\rho_{ETF}(\beta, \gamma)$.

Les valeurs maximales des composantes sur Ox, Oy, Oz sont assimilés aux demi-axes d'un ellipsoïde de référence qui s'expriment en fonction de β, γ comme:

$$R_x = \frac{R_0}{k} \left[1 + \beta \left(\frac{5}{4\pi} \right)^{1/2} \cos\left(\gamma - \frac{2}{3}\pi\right) \right] \quad (\text{Eq. IV-25a})$$

$$R_y = \frac{R_0}{k} \left[1 + \beta \left(\frac{5}{4\pi} \right)^{1/2} \cos\left(\gamma - \frac{4}{3}\pi\right) \right] \quad (\text{Eq. IV-25b})$$

$$R_z = \frac{R_0}{k} \left[1 + \beta \left(\frac{5}{4\pi} \right)^{1/2} \cos(\gamma) \right] \quad (\text{Eq. IV-25c})$$

où k garantit la conservation de volume : $R_x \cdot R_y \cdot R_z = R_0^3$.

On introduit pour la base d'oscillateur harmonique les paramètres de déformation p_0, q_0 et d'amplitude a_0 suivant :

$$p_0 = \frac{\sqrt{\langle y^2 \rangle}}{\sqrt{\langle x^2 \rangle}} = \frac{\omega_x}{\omega_y} = \frac{a_x^2}{a_y^2} \quad (\text{Eq. IV-26})$$

$$q_0 = \frac{\sqrt{\langle z^2 \rangle}}{\sqrt{\langle x^2 \rangle}} = \frac{\omega_x}{\omega_z} = \frac{a_x^2}{a_z^2} \quad (\text{Eq. IV-27})$$

$$a_0 = \left(a_x \cdot a_y \cdot a_z \right)^{1/3} \quad (\text{Eq. IV-28})$$

En identifiant les rapports des valeurs moyenne d'élongation $(\sqrt{\langle y^2 \rangle} / \sqrt{\langle x^2 \rangle})$ et $(\sqrt{\langle z^2 \rangle} / \sqrt{\langle x^2 \rangle})$ au rapport des demi-axes correspondants de l'ellipsoïde de référence, et par inversion des équations précédentes il vient :

$$p_0 = \frac{R_y}{R_x}, \quad q_0 = \frac{R_z}{R_x},$$

et :

$$a_x = a_0 (p_0 q_0)^{1/6} \quad (\text{Eq. IV-29})$$

$$a_y = a_0 \left(\frac{q_0}{p_0^2} \right)^{1/6} \quad (\text{Eq. IV-30})$$

$$a_z = a_0 \left(\frac{p_0}{q_0^2} \right)^{1/6} \quad (\text{Eq. IV-31})$$

En écrivant que a_0 se comporte en fonction de la déformation comme l'inverse de $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ pour une goutte liquide à volume constant, il vient :

$$a_0 = a_{\text{sph}} (p_0 q_0)^{1/3} \sqrt{\frac{3}{1 + p_0^2 + q_0^2}} \quad (\text{Eq. IV-32})$$

avec a_{sph} la valeur de a_0 au point sphérique qui sera déterminé par la minimisation de l'énergie EVM au point sphérique.

Sous ces hypothèses, le formulaire précédent permet alors de construire une base adaptée à tout (β, γ) de l'intervalle de déformation étudié.

III) Calcul de l'énergie totale EVM :

a) Calcul des éléments de matrice $\langle i | h_{\text{sky}}(\rho_{\text{ETF}}) | j \rangle$:

Le calcul des éléments de matrice des différents termes du hamiltonien :

$$h_{\text{sky}}^{\tau}(\rho_{\text{ETF}}) = \left[-\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2 m_{\tau}^*(\vec{r}_{\text{ETF}})} \vec{\nabla} + V_{\tau}(\vec{r}_{\text{ETF}}) - i W_{\tau}(\vec{r}_{\text{ETF}}) \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{\sigma} \right) \right] \quad (\text{Eq. IV-33})$$

(diagonal dans chacun des 8 blocs $q = \mp 1$, $p = \mp 1$, $\tau = \mp 1/2$) est assez long [IV-2]. Nous ne donnerons ici que les résultats finaux.

Pour le potentiel local (incluant le terme coulombien dans le cas des protons) on obtient :

$$\langle n'_x n'_y n'_z | V_{\text{ETF}} | n_x n_y n_z \rangle = \delta_{\sigma', \sigma} \langle n'_x n'_y n'_z | V_{\text{ETF}} | n_x n_y n_z \rangle \quad (\text{Eq. IV-34})$$

avec :

$$\begin{aligned} \langle n'_x n'_y n'_z | V_{\text{ETF}} | n_x n_y n_z \rangle &= (i) \int_{-\infty}^{n_y - n'_y} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi d\eta d\zeta e^{-(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)} \\ &\times \left[h_{n_x}(\xi) h_{n'_x}(\xi) h_{n_y}(\eta) h_{n'_y}(\eta) h_{n_z}(\zeta) h_{n'_z}(\zeta) V\left(\frac{\xi}{a_x}, \frac{\eta}{a_y}, \frac{\zeta}{a_z}\right)_{\text{ETF}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{Eq. IV-35})$$

Pour la contribution cinétique, en notant :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} f_{\text{ETF}} \vec{\nabla} = -\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2 m_{\tau}^*(\vec{r}_{\text{ETF}})} \vec{\nabla} = T, \quad (\text{Eq. IV-36})$$

on a :

$$\langle n'_x n'_y n'_z | T | n_x n_y n_z \rangle = \delta_{\sigma', \sigma} \sum_{i=x,y,z} \frac{\hbar \omega_i}{4} T_i \quad (\text{Eq. IV-37a})$$

avec :

$$\begin{aligned}
 T_x = & \left[\sqrt{(n_x + 1)(n'_x + 1)} \langle n'_x + 1 \ n'_y n'_z | f_{\text{ETF}} | n_x + 1 \ n_y n_z \rangle \right. \\
 & + \sqrt{n_x \ n'_x} \langle n'_x - 1 \ n'_y n'_z | f_{\text{ETF}} | n_x - 1 \ n_y n_z \rangle \\
 & - \sqrt{n'_x (n_x + 1)} \langle n'_x - 1 \ n'_y n'_z | f_{\text{ETF}} | n_x + 1 \ n_y n_z \rangle \\
 & \left. - \sqrt{n_x (n'_x + 1)} \langle n'_x + 1 \ n'_y n'_z | f_{\text{ETF}} | n_x - 1 \ n_y n_z \rangle \right], \quad (\text{Eq. IV-37b})
 \end{aligned}$$

et pour déterminer les expressions de T_y et T_z on effectue une permutation circulaire.

Quant au terme spin-orbite, il peut s'écrire comme [IV-2,3] :

$$-i \vec{W}_\tau(\vec{r})_{\text{ETF}} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{\sigma} \right) = -i \vec{\nabla} S_\tau(\vec{r}) \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{\sigma} \right). \quad (\text{Eq. IV-38})$$

Avec :

$$S_\tau(\vec{r}) = \frac{1}{2} W_0 (\rho(\vec{r}) + \rho_\tau(\vec{r})), \quad (\text{Eq. IV-39})$$

où W_0 est une des constantes de l'interaction de Skyrme (III-10).

En définissant les quantités :

$$B_j = -i (\vec{\nabla} S \wedge \vec{\nabla})_j \quad \text{où } j=x, y \text{ ou } z \quad (\text{Eq. IV-40})$$

$$B_\mp = B_x \mp B_y. \quad (\text{Eq. IV-41})$$

On obtient alors :

$$\begin{aligned}
 & \langle n'_x n'_y n'_z \sigma' | H_{\text{SO}} | n_x n_y n_z \sigma \rangle \\
 & = \langle \sigma' | \sigma_3 | \sigma \rangle \langle n'_x n'_y n'_z | B_z | n_x n_y n_z \rangle \\
 & + \frac{1}{2} \langle \sigma' | \sigma_- | \sigma \rangle \langle n'_x n'_y n'_z | B_+ | n_x n_y n_z \rangle \\
 & + \frac{1}{2} \langle \sigma' | \sigma_+ | \sigma \rangle \langle n'_x n'_y n'_z | B_- | n_x n_y n_z \rangle. \quad (\text{Eq. IV-42})
 \end{aligned}$$

Les éléments de matrice de B_x sont donnés par :

$$\begin{aligned}
 & \langle n'_x n'_y n'_z | B_x | n_x n_y n_z \rangle \\
 &= a_y a_z \left[\sqrt{n'_z (n'_z + 1)} \langle n'_x n'_y n'_z - 1 | S | n_x n_y + 1 n_z \rangle \right. \\
 & \quad + \sqrt{n'_z (n'_z + 1)} \langle n'_x n'_y + 1 n'_z | S | n_x n_y n_z - 1 \rangle \\
 & \quad - \sqrt{n'_y (n'_y + 1)} \langle n'_x n'_y n'_z + 1 | S | n_x n_y - 1 n_z \rangle \\
 & \quad \left. - \sqrt{n'_y (n'_y + 1)} \langle n'_x n'_y - 1 n'_z | S | n_x n_y n_z + 1 \rangle \right], \quad (\text{Eq. IV-43})
 \end{aligned}$$

les éléments de matrice de B_y et de B_z sont obtenus par permutation circulaire des x, y, z , avec toutefois, pour B_z un facteur (dû au choix de phase IV-16) qui est :

$$\frac{(n_y + n'_y - 1)}{i}. \quad (\text{Eq. IV-44})$$

b) Relations de récurrence et intégration numérique :

Le calcul des éléments de matrice $\langle i | h_{sky}(\rho_{ETF}) | j \rangle$ est réalisé à partir de la méthode d'intégration numérique de Gauss-Hermite à 20 points (et une intégration sur un réseau plus étendu quand la partie coulombienne le nécessite) pour lesquels les bornes d'intégration sont données par [IV-2]:

$$\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2 \leq R_{\max}^2. \quad (\text{Eq. IV-45})$$

Cette méthode qui consiste à sommer sur les points de Gauss se trouvant à l'intérieur d'une sphère permet un gain de temps

appréciable et donne des résultats semblables à ceux obtenus par une intégration sur un réseau cubique [IV-2,3]. C'est également cette méthode qui est utilisée dans le calcul de l'énergie totale (III-46) .

De plus, la relation de récurrence qui relie les polynômes d'Hermite :

$$x h_n(x) = \left[- \left(\frac{n+1}{2} \right)^{1/2} h_{n+1}(x) + \left(\frac{n}{2} \right)^{1/2} h_{n-1}(x) \right] \quad (\text{Eq. IV-46})$$

conduit à :

$$\begin{aligned} & \sqrt{(n+1)} h_{n+1} h_n + \sqrt{n} h_{n-1} h_n \\ & = \sqrt{(n'+1)} h_n h_{n'+1} + \sqrt{n'} h_n h_{n'-1}. \end{aligned} \quad (\text{Eq. IV-47})$$

Cette dernière équation entraîne la relation suivante entre les éléments de matrice des potentiels (avec $U = V_{\text{ETF}}, f_{\text{ETF}}$ ou S) :

$$\begin{aligned} & \sqrt{n_x+1} \langle n'_x n'_y n'_z | U | n_x+1 n_y n_z \rangle + \sqrt{n_x} \langle n'_x n'_y n'_z | U | n_x-1 n_y n_z \rangle \\ & = \sqrt{n'_x+1} \langle n'_x+1 n'_y n'_z | U | n_x n_y n_z \rangle + \sqrt{n'_x} \langle n'_x-1 n'_y n'_z | U | n_x n_y n_z \rangle. \end{aligned} \quad (\text{Eq. IV-48})$$

On obtient pour z la même relation de récurrence. Cependant, pour la direction y , le facteur de phase conduit à [IV-3] :

$$\begin{aligned} & \sqrt{n_y+1} \langle n'_x n'_y n'_z | U | n_x n_y+1 n_z \rangle - \sqrt{n_y} \langle n'_x n'_y n'_z | U | n_x n_y-1 n_z \rangle \\ & = - \sqrt{n'_y+1} \langle n'_x n'_y+1 n'_z | U | n_x n_y n_z \rangle + \sqrt{n'_y} \langle n'_x n'_y-1 n'_z | U | n_x n_y n_z \rangle. \end{aligned} \quad (\text{Eq. IV-49})$$

Ainsi, à partir des éléments de matrice des premiers vecteurs, on détermine sans intégration tous les autres ce qui diminue le temps de calcul.

c) Construction des densités dans la base $|i\rangle$:

Il s'agit ici d'exprimer sur la base de l'oscillateur harmonique les densités ρ , τ , \vec{J} (III-58 à 60) construites à partir des états propres $|\alpha\rangle$ qui interviennent dans la densité d'énergie finale (III-46). Une fois de plus, l'obtention des résultats étant assez longue, nous ne donnerons ici que les résultats finaux (le calcul complet peut être trouvé dans la référence [IV-2]).

La densité $\rho(\vec{r})$ est donnée par :

$$\rho(\vec{r}) = 2 \sum_{\tau} \sum_{\alpha=1}^{N_{\tau}} \sum_{\sigma=\mp 1/2} \left| \varphi_{\alpha\sigma}^{\tau}(\vec{r}) \right|^2 v_{\alpha}^2, \quad (\text{Eq. IV-50})$$

($q > 0$)

le facteur 2 provenant des contributions des états de signature $q < 0$.

La projection de ρ sur la base de l'oscillateur harmonique nous donne :

$$\rho_{\tau}(\vec{r}) = a_x a_y a_z e^{-\left(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2\right)} \sum_{i,j} \left[\rho_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} h_{n_x}(\xi) h_{n_x}(\xi) \right. \\ \left. h_{n_y}(\eta) h_{n_y}(\eta) h_{n_z}(\zeta) h_{n_z}(\zeta) i^{\binom{n_y+n'_y}{y}} \left[(-1)^{n_y} + (-1)^{n'_y} \right] \right]. \quad (\text{Eq. IV-51})$$

La densité d'énergie cinétique $\tau(\vec{r})$:

$$\tau(\vec{r}) = 2 \sum_{\tau} \sum_{\alpha=1}^{N_{\tau}} \sum_{\sigma=\mp 1/2} \left| \nabla \varphi_{\alpha\sigma}^{\tau}(\vec{r}) \right|^2 v_{\alpha}^2 \quad (\text{Eq. IV-52})$$

($q < 0$)

s'écrit:

$$\tau(\vec{r}) = a_x a_y a_z e^{-\frac{1}{2}(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)} \sum_{\substack{i, j \\ (q > 0)}} \rho_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} i^{\binom{n+n'}{y}} \left[(-1)^y + (-1)^{y'} \right] \sum_{k=x}^z G_k \quad (\text{Eq. IV-53a})$$

avec:

$$G_x = \left[a_x^2 \tilde{h}_{n_x}(\xi) \tilde{h}_{n_x}(\xi) h_{n_y}(\eta) h_{n_y}(\eta) h_{n_z}(\zeta) h_{n_z}(\zeta) \right], \quad (\text{Eq. IV-53b})$$

et pour G_y , G_z des définitions analogues en effectuant la permutation circulaire. De plus, les \tilde{h}_n vérifient l'équation :

$$\begin{aligned} e^{-\frac{x^2}{2}} \tilde{h}_n(x) &= \frac{d}{dx} \left(e^{-\frac{x^2}{2}} h_n(x) \right) \\ &= e^{-\frac{x^2}{2}} \left[-\left(\frac{n+1}{2}\right)^{1/2} h_{n+1} + \left(\frac{n}{2}\right)^{1/2} h_{n-1} \right]. \end{aligned} \quad (\text{Eq. IV-54})$$

Dans la densité d'énergie (III-46), la contribution spin-orbite provient de termes en $\vec{v} \cdot \vec{J}$. $\vec{v} \cdot \vec{J}$ s'écrit sur la base d'oscillateur harmonique de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \vec{v} \cdot \vec{J} &= 2a_x a_y a_z e^{-\frac{1}{2}(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)} \sum_{\substack{i, j \\ (q > 0)}} \rho_{ij} \left[i^{\binom{n+n'-1}{y}} \left[(-1)^y + (-1)^{y'} \right] \right. \\ &\quad \left. \left\{ 2a_x a_y \sigma_i \delta_{\sigma_i \sigma_j} \tilde{h}_{n_x}(\xi) h_{n_x}(\xi) h_{n_y}(\eta) \tilde{h}_{n_y}(\eta) h_{n_z}(\zeta) h_{n_z}(\zeta) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left| \sigma - \sigma' \right| a_y a_z h_{n_x}(\xi) h_{n_x}(\xi) \tilde{h}_{n_y}(\eta) h_{n_y}(\eta) h_{n_z}(\zeta) \tilde{h}_{n_z}(\zeta) \right\} \right. \\ &\quad \left. + (\sigma - \sigma') i^{\binom{n+n'}{y}} \left[(-1)^y + (-1)^{y'} \right] a_x a_z \right. \\ &\quad \left. h_{n_x}(\xi) \tilde{h}_{n_x}(\xi) h_{n_y}(\eta) h_{n_y}(\eta) \tilde{h}_{n_z}(\zeta) h_{n_z}(\zeta) \right]. \end{aligned} \quad (\text{Eq. IV-55})$$

Enfin, le terme $\nabla^2 \rho$, qui intervient également dans l'expression de la densité d'énergie (III-46), s'écrit sur la base d'oscillateur harmonique comme :

$$\nabla^2 \rho = 2\tau(\vec{r}) + a_x a_y a_z e^{-(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)} \sum_{\substack{i,j \\ (q>0)}} \rho_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} i^{\binom{n_y+n'_y}{n_y}} \left\{ (-1)^{n_y} + (-1)^{n'_y} \right\} \left\{ \left(D_i + D_j \right) h_{n_x}(\xi) h_{n_x}(\xi) h_{n_y}(\eta) h_{n_y}(\eta) h_{n_z}(\zeta) h_{n_z}(\zeta) \right\}. \quad (\text{Eq. IV-56})$$

Avec:

$$D_m = a_x^2 \left(\xi^2 - (2n_x^m + 1) \right) + a_y^2 \left(\eta^2 - (2n_y^m + 1) \right) + a_z^2 \left(\zeta^2 - (2n_z^m + 1) \right). \quad (\text{Eq. IV-57})$$

IV) Calcul des opérateurs de cranking :

a) Calcul des 3 paramètres de masse :

Dans les expressions des paramètres de masse triaxiaux obtenus dans le chapitre II, intervient l'opérateur de cranking ($\partial\rho_0/\partial q$). La dérivation par rapport aux variables collectives nécessaire pour la détermination de cet opérateur est faite à partir d'une formule à trois points dans chaque direction collective (β et γ). Ceci conduit à obtenir la solution statique ρ_0 aux cinq points suivants* : (β_0, γ_0) , $(\beta_0 + d\beta, \gamma_0)$, $(\beta_0 - d\beta, \gamma_0)$, $(\beta_0, \gamma_0 + d\gamma)$, $(\beta_0, \gamma_0 - d\gamma)$. Les dérivées de ρ_0 sont alors données par :

$$\left(\frac{\partial\rho_0}{\partial\beta} \right) = \frac{\rho_0(\beta_0 + d\beta, \gamma_0) - \rho_0(\beta_0 - d\beta, \gamma_0)}{2d\beta} \quad (\text{Eq. IV-58})$$

$$\left(\frac{\partial\rho_0}{\partial\gamma} \right) = \frac{\rho_0(\beta_0, \gamma_0 + d\gamma) - \rho_0(\beta_0, \gamma_0 - d\gamma)}{2d\gamma}. \quad (\text{Eq. IV-59})$$

Pour chacun de ces points, on détermine par la méthode EVM les éléments de matrice de la solution ρ_0^{**} sur une base d'oscillateur harmonique. Ces cinq bases ont le même paramètre a_{sph} (Eq. IV-32), mais ont des ω_x , ω_y , ω_z différents.

Les paramètres de masse font intervenir les éléments de matrice de l'opérateur de cranking dans la base des états propres $|\alpha\rangle$.

* Sauf pour le point sphérique $\beta_0 = 0$, $\gamma_0 = 0$ où, pour des raisons de symétrie (exposées plus loin) les paramètres de masse $B_{\gamma\gamma}$ et $B_{\beta\gamma}$ sont nuls et pour lequel les 3 points $(0,0)$, $(d\beta, 0)$, $(-d\beta, 0)$ suffisent.

** Le calcul peut être effectué séparément dans chacun des blocs ($p = \mp 1$, $q = \mp 1$) pour chaque isospin, puisque ρ_0 possède les symétries du hamiltonien. De plus il suffit d'effectuer le calcul pour $q = 1$ et de multiplier par 2 pour obtenir ainsi la contribution totale.

Par conséquent, il faut d'abord projeter chaque solution ρ_0 sur la base d'oscillateur optimisée au point central (c'est à dire correspondant à β_0, γ_0). A l'aide de la matrice de passage A (réelle, unitaire) déterminée par la diagonalisation de l'hamiltonien en ce dernier point, on projette une seconde fois, mais cette fois-ci, sur la base des états de quasi-particule $|\alpha\rangle$ (notés ici μ et ν):

$$M(q) = \sum_{\mu\nu} \frac{1}{e_{\mu} + e_{\nu}} \frac{\left| \sum_{ij} A(i, \mu) A(j, \nu) \langle i | \left(\frac{\partial \rho_0}{\partial q} \right) | j \rangle \right|^2}{(u_{\mu\nu} + u_{\nu\mu})^2} \quad (\text{Eq. IV-60})$$

Pour la projection des fonctions d'onde :

$$|n_x n_y n_z\rangle = |n_x\rangle |n_y\rangle |n_z\rangle \quad (\text{Eq. IV-61})$$

sur la base d'oscillateur du point central (β_0, γ_0), nous avons utilisé le développement suivant qui converge rapidement [IV-5,6]:

$$\langle n'_t(\omega_c) | n_t(\omega) \rangle = \delta_{n'_t - n_t, \text{pair}} B_{n'_t, n_t}(\omega, \omega_c), \quad (\text{Eq. IV-62})$$

où ω_c est la fréquence au point central, et t note x, y ou z.

On a en outre :

$$\begin{aligned} B_{n,p}(\omega, \omega_c) &\equiv B_{n,p}(r = \frac{\omega}{\omega_c}) \\ &= \left[2^{n-p} \frac{n!}{p!} \right]^{1/2} \left(\frac{r-1}{r+1} \right)^{\frac{p-n}{2}} \left(\frac{2\sqrt{r}}{r+1} \right)^{\frac{n+1}{2}} \\ &\quad \sum_{\nu=\frac{n-p}{2}}^{n/2} \frac{(-1)^{\nu} 2^{-2\nu}}{\nu! \left[\nu + \frac{1}{2}(p-n) \right]! (n-2\nu)!} \left(\frac{r-1}{2\sqrt{r}} \right)^{2\nu}. \end{aligned} \quad (\text{Eq. IV-63})$$

Il est à noter que dans les expressions des paramètres de masse les taux d'occupation et les énergies de quasiparticules doivent être ceux du point central (β_0, γ_0).

Le choix des pas $d\beta$ et $d\gamma$ dans les équations (Eq.IV-58,59) est discuté au chapitre suivant.

b) Calcul des moments d'inertie :

Du fait des symétries du problème, les moments d'inertie s'expriment à partir des éléments de matrice des opérateurs J_i dans la base des états propres $|\alpha\rangle$ (associés bien sur au point central). Une fois de plus, nous calculons dans la base d'oscillateur harmonique et nous projetons ensuite par la matrice de passage provenant de la diagonalisation sur la base des $|\alpha\rangle$.

Les opérateurs L_x , L_y et L_z s'écrivent en fonction des opérateurs de création et d'annihilation a_i^+ , a_i ($i = x, y$ ou z) de l'oscillateur harmonique des états de base.

On obtient pour L_x :

$$L_x = \frac{i\hbar}{2} \left[\left(\sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_y}} - \sqrt{\frac{\omega_y}{\omega_z}} \right) (a_y^+ a_z^+ - a_y a_z) - \left(\sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_y}} + \sqrt{\frac{\omega_y}{\omega_z}} \right) (a_y^+ a_z - a_y a_z^+) \right] \quad (\text{Eq. IV-64})$$

et des expressions analogues pour L_y et L_z en faisant les permutations circulaires sur (x,y,z) .

De ces expressions on déduit en faisant $x \rightarrow y$, $x \rightarrow z$ que les seuls éléments de matrice non nuls de L_x ou L_y et L_z sont :

$$\langle n_x n_y n_z \sigma | L_x | n_x n_y - 1 n_z - 1 \sigma \rangle \quad (\text{Eq. IV-65})$$

$$\langle n_x n_y n_z \sigma | L_x | n_x n_y + 1 n_z + 1 \sigma \rangle \quad (\text{Eq. IV-66})$$

$$\langle n_x n_y n_z \sigma | L_x | n_x n_y - 1 n_z + 1 \sigma \rangle \quad (\text{Eq. IV-67})$$

$$\langle n_x n_y n_z \sigma | L_x | n_x n_y + 1 n_z - 1 \sigma \rangle. \quad (\text{Eq. IV-68})$$

Par construction de la base, on a pour chaque $q > 0$ donné une valeur de spin déduite de la parité de $n_x + n_y$. Par conséquent, pour les éléments de matrice de L_x et de L_y (qui font intervenir un facteur $\delta_{\sigma, \sigma'}$), les vecteurs situés à droite des opérateurs appartiennent à l'espace $q < 0$ (espace des renversés du sens du temps des vecteurs ayant les mêmes composantes n_x, n_y, n_z avec $q > 0$). (Pour L_z les expressions ne font intervenir que des variations sur les n_x et n_y ne changeant pas la parité de leur somme).

Le calcul de ces éléments de matrice, compte tenu du choix de phase fait dans la définition des états obtenus par renversement du sens du temps (équation IV-16) conduit à :

$$\begin{aligned}
 \langle n_x n_y n_z \sigma | L_x | n'_x n'_y n'_z \sigma' \rangle = \\
 \phi \times \left[\left(\sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_y}} - \sqrt{\frac{\omega_y}{\omega_z}} \right) \left(\sqrt{(n'_y+1)(n'_z+1)} \delta_{n_z, n'_z+1} \delta_{n_y, n'_y+1} \right. \right. \\
 \left. \left. - \sqrt{n'_y n'_z} \delta_{n_z, n'_z-1} \delta_{n_y, n'_y-1} \right) \right. \\
 \left. - \left(\sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_y}} + \sqrt{\frac{\omega_y}{\omega_z}} \right) \left(\sqrt{(n'_y+1)n'_z} \delta_{n_z, n'_z-1} \delta_{n_y, n'_y+1} \right. \right. \\
 \left. \left. - \sqrt{n'_y (n'_z+1)} \delta_{n_z, n'_z+1} \delta_{n_y, n'_y-1} \right) \right] \quad (\text{Eq. IV-69a})
 \end{aligned}$$

avec :

$$\phi = \frac{\hbar}{2} (-1)^{\frac{n_y + n'_y}{2} + \sigma'} \delta_{n_x, n'_x} \delta_{\sigma, -\sigma'} \quad (\text{Eq. IV-69b})$$

On obtient les expressions des éléments de matrice de L_y et L_z par permutation circulaire de (x, y, z) . Seul change cependant le facteur ϕ devant les expressions entre crochets. Il est pour L_y :

$$\phi = i \frac{\hbar}{2} (-1)^{n'_y + \frac{1}{2} + \sigma'} \delta_{n'_y, n'_y} \delta_{\sigma, -\sigma'} \quad (\text{Eq. IV-70})$$

et pour L_z :

$$\phi = \frac{\hbar}{2} (n'_y - n_y) \delta_{n'_z, n'_z} \delta_{\sigma, \sigma'} \quad (\text{Eq. IV-71})$$

En procédant de la même façon pour la partie de spin on obtient :
(en omettant la valeur propre $\hbar/2$)

$$\langle n_x n_y n_z \sigma | S_x | n'_x n'_y n'_z \sigma' \rangle = (-1)^{\frac{1}{2} + \sigma + n'_y} \delta_{n'_x, n'_x} \delta_{n'_y, n'_y} \delta_{n'_z, n'_z} \delta_{\sigma, -\sigma'} \quad (\text{Eq. IV-72})$$

$$\langle n_x n_y n_z \sigma | S_y | n'_x n'_y n'_z \sigma' \rangle = (-1)^{n'_y + 1} \delta_{n'_x, n'_x} \delta_{n'_y, n'_y} \delta_{n'_z, n'_z} \delta_{\sigma, -\sigma'} \quad (\text{Eq. IV-73})$$

$$\langle n_x n_y n_z \sigma | S_z | n'_x n'_y n'_z \sigma' \rangle = \sigma \delta_{n'_x, n'_x} \delta_{n'_y, n'_y} \delta_{n'_z, n'_z} \delta_{\sigma, \sigma'} \quad (\text{Eq. IV-74})$$

Le calcul des éléments de matrice intervenant dans le calcul des moments d'inertie est effectué par bloc de parité ∓ 1 avec $q > 0$ pour chaque isospin. Les contributions $q < 0$ introduisent un facteur 2^* . Ainsi, pour \mathfrak{I}_x et \mathfrak{I}_y (pour lesquelles \vec{L} et \vec{S} font intervenir des états appartenant à l'espace des renversés du sens du temps) on obtient l'expression suivante :

$$\mathfrak{I}_t = 2 \sum_{\mu\tilde{\nu}} \frac{(u_{\mu\nu} - u_{\nu\mu})^2}{e_{\mu} + e_{\nu}} \left| \sum_{ij} \varphi_j A(i, \mu) A(j, \nu) \langle i | J_t | \tilde{j} \rangle \right|^2 \quad (\text{Eq. IV-75})$$

où t réfère à l'axe de rotation Ox ou Oy .

*

Le calcul est également simplifié par la relation suivante entre les éléments de matrice de \vec{J} :

$$\langle n_x n_y n_z \sigma | \vec{J} | n'_x n'_y n'_z \sigma' \rangle = \langle n'_x n'_y n'_z \sigma' | \vec{J} | n_x n_y n_z \sigma \rangle .$$

Dans ce qui précède, les états $\tilde{\nu}$ et \tilde{i} sont donnés par :

$$|\tilde{\mu}\rangle = \sum_i A(i, \mu) |\tilde{i}\rangle \quad (\text{Eq. IV-76})$$

$$|\tilde{i}\rangle = \varphi_i |(n_x, n_y, n_z)_i, -\sigma_i\rangle, \quad (\text{Eq. IV-77})$$

où φ_i est la phase issue de l'application de K sur l'état i

$$\text{soit : } \varphi_i = (-i)^{n_y} (-1)^{\frac{1}{2} - \sigma}. \quad (\text{Eq. IV-78})$$

Pour ce qui est de \tilde{x}_z , on a :

$$\tilde{x}_z = 2 \sum_{\mu\nu} \frac{(u_{\mu\nu} - u_{\nu\mu})}{e_{\mu} + e_{\nu}} \left| \sum_{ij} A(i, \mu) A(j, \nu) \langle i | J_z | j \rangle \right|^2 \quad (\text{Eq. IV-79})$$

V) Diagonalisation du hamiltonien de Bohr :

a) Symétries du hamiltonien de Bohr:

Les résultats physiques ne pouvant dépendre des labels (1, 2 ou 3), et de l'orientation des demi-axes, le hamiltonien doit être invariant par les transformations suivantes [IV-7] : R_1 , rotation d'angle π autour de l'axe 3 ; R_2 rotation d'angle $\pi/2$ autour du même axe et R_3 la permutation circulaire des axes intrinsèques 1,2,3. Leurs actions sur un point $(\beta, \gamma, \theta, \varphi, \phi)$ de l'espace collectif s'écrivent respectivement :

$$R_1(\beta, \gamma, \theta, \varphi, \phi) = (\beta, \gamma, \pi - \theta, \varphi + \pi, -\phi) \quad (\text{Eq. IV-80})$$

$$R_2(\beta, \gamma, \theta, \varphi, \phi) = (\beta, -\gamma, \pi - \theta, \varphi, \phi - \frac{\pi}{2}) \quad (\text{Eq. IV-81})$$

$$R_3(\beta, \gamma, \theta, \varphi, \phi) = (\beta, \gamma - 2\frac{\pi}{3}, \theta', \varphi', \phi') \quad (\text{Eq. IV-82})$$

où θ', φ', ϕ' sont trois nouveaux angles d'Euler définis dans la référence [IV-8].

Pour l'énergie potentielle, quantité scalaire ne dépendant que des variables de déformation (β, γ) , l'invariance par R_1, R_2 et R_3 se réduit à l'invariance sous les transformations $\gamma \rightarrow \mp \gamma$, $\gamma \rightarrow \gamma \mp 120^\circ$. Dans l'espace des fonctions analytiques de a_0 et a_2 , les invariants scalaires associés sont β^2 et $\beta^3 \cos 3\gamma$.

Les propriétés d'invariance de la partie cinétique, qui ont des conséquences sur les paramètres d'inertie, ont fait l'objet d'une étude très détaillée [IV-8,9]. Nous ne donnerons ici que les conclusions de ces auteurs appliquées aux fonctions $\mathfrak{I}_x, \mathfrak{I}_y, \mathfrak{I}_z, B_{\beta\beta}, B_{\gamma\gamma}, B_{\beta\gamma}$ que nous considérons.

Les paramètres de masse $B_{\beta\beta}$ et $B_{\gamma\gamma}$ doivent être des fonctions paires de γ , alors que $B_{\beta\gamma}$ doit être impair. De plus, ces paramètres vérifient tous la condition:

$$B_{mn}(\gamma \mp 2\frac{\pi}{3}) = B_{mn}(\gamma) \quad . \quad (\text{Eq. IV-83})$$

Des hypothèses d'analyticité et d'univocité ainsi que des relations précédentes, on extrait les conditions suivantes [IV-8]:

$$\left. \frac{\partial B_{mn}}{\partial \gamma} \right|_{\beta=0} = 0, \quad \forall m, n. \quad (\text{Eq. IV-84a})$$

$$B_{\beta\gamma}(\beta = 0) = B_{\gamma\gamma}(\beta = 0) = 0. \quad (\text{Eq. IV-84b})$$

$$B_{\beta\beta}(-\gamma) = B_{\beta\beta}(\gamma); \quad B_{\beta\beta}\left(\frac{\pi}{3} + \gamma\right) = B_{\beta\beta}\left(\frac{\pi}{3} - \gamma\right). \quad (\text{Eq. IV-84c})$$

$$B_{\gamma\gamma}(\gamma) = B_{\gamma\gamma}(-\gamma); \quad B_{\gamma\gamma}\left(\frac{\pi}{3} + \gamma\right) = B_{\gamma\gamma}\left(\frac{\pi}{3} - \gamma\right). \quad (\text{Eq. IV-84d})$$

$$B_{\beta\gamma}(\gamma) = -B_{\beta\gamma}(-\gamma); \quad B_{\beta\gamma}\left(\frac{\pi}{3} + \gamma\right) = -B_{\beta\gamma}\left(\frac{\pi}{3} - \gamma\right), \quad (\text{Eq. IV-84e})$$

soit :

$$B_{\beta\gamma}(\gamma = 0) = B_{\beta\gamma}\left(\gamma = \frac{\pi}{3}\right) = 0. \quad (\text{Eq. IV-84f})$$

Les moments d'inertie (nuls au point sphérique) obéissent à une règle de permutation dans les différents sextants, qui permet de les exprimer en fonction du seul moment \mathfrak{I}_3 pair en γ et nul en $\gamma = 0$ et $\gamma = \pi$:

$$\mathfrak{I}_k = \mathfrak{I}_3(\gamma_k) \quad \text{où} \quad \gamma_k = \gamma - k \cdot 2 \frac{\pi}{3}, \quad (\text{Eq. IV-85})$$

avec $k=1, 2, 3$.

On en déduit les propriétés suivantes * :

$$\mathfrak{I}_1 = \mathfrak{I}_2, \quad \mathfrak{I}_3(\gamma = 0) = 0; \quad \mathfrak{I}_1 = \mathfrak{I}_3, \quad \mathfrak{I}_2\left(\gamma = \frac{\pi}{3}\right) = 0. \quad (\text{Eq. IV-86})$$

*

On notera que la métrique D qui contient le produit $(\mathfrak{I}_1 \mathfrak{I}_2 \mathfrak{I}_3)$ s'annule au point sphérique et le long des demi-axes $\gamma = 0$ et $\frac{\pi}{3}$.

A ($\gamma = 0, \pi$) le couplage des degrés de liberté angulaire et de déformation se traduit par la condition :

$$\lim_{\gamma \rightarrow \pi} \frac{\mathfrak{I}_3}{4 \beta^2 \sin^2 \gamma} = B_{\gamma\gamma} (\gamma = 0) . \quad (\text{Eq. IV-87})$$

Grâce à cette relation et à une hypothèse supplémentaire de constance des paramètres de masses et de la fonction d'inertie ($\mathfrak{I}_3 / 4 \beta^2 \sin^2 \gamma$), divers groupes ont développé [IV-10] des approches phénoménologiques n'utilisant qu'un seul paramètre $B_{\beta\beta} = B$. (Dans ces travaux, le paramètre B définit donc à lui seul la partie cinétique du hamiltonien de Bohr).

b) Symétries des solutions et choix d'une base :

Les solutions du hamiltonien de Bohr ont été déterminées par projection sur une base polynômiale construite suivant la méthode de la référence [IV-11] qui a été appliquée dans le cadre de diverses hypothèses microscopiques [IV-12]*. On utilise la séparation formelle du hamiltonien en termes de rotation et de vibration pour construire des solutions générales de la façon suivante :

$$\Phi_{\alpha IM}(\beta, \gamma, \theta, \varphi, \phi) = \sum_{K, \alpha} C_{\alpha IK}(\beta, \gamma) \mathcal{D}_{MK}^I(\Omega = (\theta, \varphi, \phi)), \quad (\text{Eq. IV-88})$$

où les $\mathcal{D}_{MK}^I(\Omega)$ sont les matrices usuelles de rotation de Wigner et les $C_{\alpha IK}(\beta, \gamma)$ des fonctions de la seule déformation.

I est le moment angulaire total, M la projection de I sur l'axe Oz et K la projection sur l'axe de rotation.

* L'équivalence de cette méthode avec celle des différences finies [IV-7] est aujourd'hui établie sur la base de nombreux résultats numériques [IV-13].

Parmi ces états, nous conservons seulement ceux qui vérifient les symétries de la solution (c'est à dire l'invariance sous R_1, R_2 et R_3). Ceux-ci sont définis de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \Psi_{1mn}^{IM} &= P_3 \left(e^{-\frac{Q}{2} \beta^n} P_{1m}(\gamma) \varphi_{MK}^{Im}(\Omega) \right) \\ &= e^{-\frac{Q}{2} \beta^n} \sum_{\substack{K \geq 0 \\ K \text{ pair} \\ K \neq 0 \text{ pour } I \text{ impair}}} C_{1K}^{IM} P_{Km}(\gamma) \varphi_{MK}^I(\Omega) \end{aligned} \quad (\text{Eq. IV-89})$$

Dans ce qui précède, $P_{1m}(\gamma)$ (ou $P_{Km}(\gamma)$) est défini pour l (ou K) pair par:

$$P_{Km}(\gamma) = \delta_{\frac{K}{2}, \text{pair}} \cos(m\gamma) + \delta_{\frac{K}{2}, \text{impair}} \sin(m\gamma) \quad (\text{Eq. IV-90})$$

En outre, les fonctions $\varphi_{MK}^I(\Omega)$ sont les combinaisons normalisées des matrices de Wigner d'indice $\pm K$ respectant l'invariance par R_1

$$\varphi_{MK}^I(\Omega) = \left(\frac{2I+1}{16\pi^2} \right)^{1/2} \left[D_{MK}^I(\Omega) + (-1)^I D_{M,-K}^I(\Omega) \right] \quad (\text{Eq. IV-91})$$

Par suite de l'invariance par R_2 les valeurs de K doivent être paires et strictement positives quand I est impair (ceci interdit donc $I = 1$). La même invariance induit des propriétés de parité en $K/2$ des fonctions $P_{Km}(\gamma)$. L'opérateur P_3 introduit en (IV-89) est le symétriseur par rapport à l'opérateur R_3 donné par :

$$P_3 = 1 + R_3 + R_3^2 \quad (\text{Eq. IV-92})$$

Il permet de définir des coefficients géométriques C_{1K}^{IM} assurant à l'état de base Ψ_{1mn}^{IM} toutes les propriétés d'invariance requises. Enfin, le terme exponentiel $e^{-Q/2}$ de la fonction d'onde assure l'évanescence de cette dernière à grande déformation. Il s'exprime à partir des invariants comme :

$$Q = \mu_4 \beta^4 + \nu_3 \beta^3 \cos 3\gamma + \mu_2 \beta^2. \quad (\text{Eq. IV-93})$$

Par suite de la troncature de la base, l'énergie dépend des paramètres μ_4 , ν_3 et μ_2 . Leurs valeurs sont déterminées par la minimisation numérique de l'énergie de l'état fondamental.*

La base des Ψ_{lmn}^{IM} est réduite* et tronquée à l'aide des relations suivantes:

$$n = m + 2p, \quad (\text{Eq. IV-94})$$

où p est un entier, et :

$$n \leq N_0. \quad (\text{Eq. IV-95})$$

La valeur de N_0 est définie par agrandissements successifs jusqu'à l'obtention de solutions numériquement stables. Dans nos calculs, 12 est une valeur typique. Ce point sera discuté dans le chapitre suivant.

Les états Ψ_{lmn}^{IM} n'étant pas orthonormés pour la mesure $Dd\Omega da_2$, une orthonormalisation par la méthode de Schmidt est utilisée avant diagonalisation.

* Nous éliminons en effet les vecteurs nuls et ceux qui conduisent à une description surcomplète

VI) Conclusion :

Pour la diagonalisation de la matrice hamiltonienne h_{sky} , nous avons choisi une base d'oscillateur harmonique à trois dimensions. Cette base est tronquée par une prescription de troncature sphérique. Ses trois paramètres a_x , a_y et a_z sont déterminés à partir des rapports d'axes de la solution recherchée en imposant en outre la conservation du volume d'une goutte liquide représentant le noyau déformé. Par suite des symétries que nous avons imposées, les solutions propres du hamiltonien peuvent être indexées par deux nombres quantiques : la parité et la signature. Le calcul des éléments de matrice du hamiltonien et des paramètres d'inertie dans la base d'oscillateur se fait séparément pour chaque isospin dans les blocs de parité ∓ 1 et pour les signatures positives, les blocs de signature négative conduisant à des contributions identiques. De plus, grâce aux relations de récurrence entre les polynômes d'Hermite, le calcul des éléments de matrice ne doit être effectué par intégration numérique que pour quelques vecteurs seulement. Pour ces intégrations nous utilisons une méthode de Gauss-Hermite dans laquelle on ne tient compte que des points compris à l'intérieur d'une sphère. Cependant, l'intégration des parties coulombiennes, à longue portée, a parfois nécessité l'utilisation d'un réseau plus dense. Les tests et les résultats de ces calculs sont exposés dans le chapitre suivant.

Les symétries du hamiltonien de Bohr conduisent à des relations sur les paramètres d'inertie qui constituent un ensemble de tests préliminaires de nos fonctions microscopiques.

Pour diagonaliser le hamiltonien de Bohr enfin, nous utilisons une base polynômiale tronquée.

CHAPITRE V

Tests numériques

I) Introduction :

La méthode EVM nous fournit en des temps raisonnables des énergies potentielles de déformation et des fonctions d'onde individuelles à partir desquelles nous construisons les paramètres d'inertie de l'hamiltonien de Bohr à l'approximation du cranking d'Inglis.

Ce chapitre est consacré aux différents tests que nous avons réalisés pour nous assurer de la validité des diverses prescriptions employées dans nos calculs numériques.

II) Tests liés au calcul de \mathcal{R}_0 :

a) Tests d'intégration numérique :

Comme nous l'avons signalé dans le chapitre précédent, la prescription d'intégration sur les vingt points de Hermite-Gauss inclus à l'intérieur d'une sphère, s'est avérée insuffisante pour le calcul des termes coulombiens dans les noyaux lourds. Nous devons obligatoirement tenir compte du déficit d'énergie coulombienne résultant qui varie avec la déformation. (Pour ^{186}Pt par exemple l'erreur commise entre différentes déformations peut atteindre 1.5Mev). Ceci est dû au fait que nous intégrons par rapport aux variables étirées (eq. IV-17a,b) qui dépendent de la déformation. Pour corriger cette perte d'énergie nous avons effectué (dans les cas qui le nécessitent) une intégration par la méthode des trapèzes pour laquelle nous avons déterminé une densité de points et un rayon maximal (R_{\max} cf équation IV-45). Sur les figures V-1 et V-2 sont reportées les valeurs des énergies coulombienne et nucléaire obtenues soit par intégration sur les points de Hermite-Gauss (symbolisé par le zéro d'ordonnées), soit par la méthode des trapèzes avec différentes valeurs de la densité de points (fig V-1) et de la portée R_{\max} (fig V-1) pour ^{186}Pt (au minimum d'énergie EVM, soit $\beta = 0.1897$, $\gamma = 60^\circ$).

Dans ^{110}Cd , la solution avec intégration par la méthode de Hermite-Gauss (dont la valeur la plus élevée en variables étirées correspond à 5.5) convient pour la base à troncature sphérique* avec $N_0 = 8$: on obtient, entre la solution à 20 points d'Hermite-Gauss et la solution complètement stabilisée de 28** points de la méthode des trapèzes (avec un rayon maximal égal à 6 en coordonnées étirées), une différence d'énergie absolue inférieure à 300 KeV (au minimum d'énergie EVM, soit $\beta = 0.1638$, $\gamma = 0^\circ$).

* Le choix de la prescription sphérique $N_0 = 8$ sera discuté dans le prochain paragraphe de ce chapitre.

** Nous intégrons en fait sur 14 points du fait de l'invariance par parité des quantités à intégrer.

Ceci conduit à une erreur très faible en énergie : 100 KeV dans le plan (β, γ), soit une imprécision relative de l'ordre de 1/1000. Par contre dans le cas de ^{186}Pt la méthode de Hermite-Gauss entraîne un déficit d'énergie coulombienne important (fig V-1) (d'environ 6 MeV) par rapport au résultat exact. Afin de diminuer le temps machine, nous avons adopté une solution intermédiaire qui consiste à utiliser pour le calcul des éléments de matrice une intégration à 20 points de Hermite-Gauss et, pour le calcul de l'énergie totale, une intégration par la méthode des trapèzes à 26 points avec $R_{\text{max}} = 6.5$. La différence des énergies de la solution retenue et de celle où toutes les intégrations sont effectuées par la méthode des trapèzes est d'environ 200 KeV.

b) Stabilité de l'énergie en fonction des paramètres de la base:

i) Choix du paramètre N_0 :

Les bases d'oscillateur harmonique qui assurent la stabilité de l'énergie totale au point sphérique (cf figures V-3,4) comportent 9 et 11 couches majeures ($N_0 = 8$ et 10) pour les noyaux de ^{110}Cd et ^{186}Pt respectivement. (Pour les noyaux de ^{74}Ge , et de ^{76}Se qui comportent moins de nucléons, nous avons également adopté une base avec $N_0 = 8$.) En effet la figure V-3 montre dans le cas de ^{110}Cd une variation d'énergie au point sphérique égale à -70 MeV quand N_0 augmente de 6 à 8. Par contre, quand N_0 augmente de 8 à 10, l'énergie ne baisse que de 2 MeV. Pour ^{186}Pt nous obtenons des différences du même ordre de grandeur (pour $N_0 = 10 \mp 2$).

ii) Optimisation de a_{sph} :

La figure V-5 montre le résultat de l'optimisation de a_{sph} (cf équation IV-32) pour la solution sphérique du noyau ^{110}Cd et pour deux bases: $N_0 = 8$ et 10. Comme on peut s'y attendre, la dépendance indésirable de l'énergie en a_{sph} diminue au fur et à mesure que la dimension de la base augmente. Les valeurs de a_{sph} issues de la minimisation de l'énergie pour les différents noyaux étudiés sont données dans le tableau suivant :

	N_0	a_{sph}
^{110}Cd	8	0.57
^{74}Ge	8	0.55
^{76}Se	8	0.54
^{186}Pt	10	0.53

A partir des a_{sph} ainsi déterminés, les paramètres de la base seront pour toute déformation donnés par la prescription (IV-32).

iii) Choix de la troncature sphérique :

Sur la figure V-6 sont présentées les énergies de déformation nucléaire axiale du ^{110}Cd pour deux prescriptions de troncature (sphérique ou déformée cf équation) et pour deux tailles de base ($N_0 = 8$ et 10). Ces courbes ont pour abscisses les valeurs du moment quadrupolaire Q (c'est à dire $\langle 2z^2 - (x^2 + y^2) \rangle$), qui se transcrivent en fonction de β , $-\beta$ (pour le côté oblate) ainsi qu'il l'est montré sur la figure V-7.

Deux résultats importants apparaissent sur la figure V-6. L'énergie correspondant à la troncature déformée en base 8 présente des fluctuations et se place au dessus de l'énergie de troncature sphérique (comme en base 10). La troncature sphérique pour une taille de base 8 d'autre part, fournit une énergie qui se rapproche le plus de celle obtenue en base 10. Ceci s'explique

compte tenu de la prescription adoptée pour le comportement des paramètres de base en fonction de la déformation (et aux déformations auxquelles nous nous plaçons) par le fait qu'on devrait avec une prescription déformée effectuer point par point une optimisation des 2 ou 3 paramètres d'oscillateurs comme on va le discuter plus loin.

Les figures V-8a et b mettent en évidence ce point. Dans la première nous avons reporté, pour les deux prescriptions de troncutures, les valeurs de (a / a_0) où a est le paramètre de la base optimisé en chaque point et a_0 le paramètre usuel (équation IV-32). Alors que la valeur du paramètre optimisé en tout point est peu différente de la valeur a_0 quelle que soit la déformation pour la prescription sphérique; cette différence devient significative pour la prescription déformée et augmente dans la direction des déformations oblate. On retrouve cet effet sur les énergies dans la figure V-8b: pour la prescription sphérique la différence des énergies associées au paramètre a et a_0 est faible quelle que soit la déformation alors que, pour la prescription déformée, elle devient sensible jusqu'à valoir près de 2 MeV pour $\beta = 0.5$, $\gamma = 60^\circ$.

En pratique, nous avons retenu pour la base une prescription de troncuture sphérique avec l'ansatz (IV-32) pour l'évolution de a en fonction de la déformation. Alternativement on pourrait utiliser une prescription de troncuture déformée et réoptimiser le paramètre de base en différents points de déformation. Il va de soi que ceci serait plus coûteux en temps que la procédure retenue, et sans gain appréciable pour les énergies relatives.

III) Test des paramètres du calcul ETF:

a) Asymétrie de surface:

Sur la figure V-9 sont reportées les valeurs des énergies totales ETF obtenues soit avec un paramètre d'asymétrie de surface (γ_q cf Eq. III-41) constant et égal à 1, soit avec γ_q déterminé par la minimisation de l'énergie. Comme on peut s'y attendre, l'énergie ETF est abaissée (d'environ 1.5 MeV au point sphérique) dans le second cas puisque l'espace variationnel est plus grand (6 paramètres au lieu de 4). On ne peut prédire le comportement de l'énergie EVM vis-à-vis de l'introduction de l'asymétrie de surface. En effet les solutions EVM n'obéissent pas à un principe variationnel. De plus, les fonctionnelles $\tau(\rho)$, $\vec{J}(\rho)$ utilisées dans EVM ne contiennent pas les termes en \hbar^4 présents dans le calcul variationnel ETF. De fait (figure V-10), l'énergie EVM est augmentée par l'introduction de $\gamma_q \neq 1$, mais les différences d'énergie obtenues entre les cas $\gamma_q = 1$ et $\gamma_q \neq 1$ sont faibles, typiquement de l'ordre de la centaine de KeV et n'introduisent pas de distorsions de la surface d'énergie potentielle. Ce résultat justifie l'utilisation de la prescription la plus simple c'est à dire le choix de $\gamma_q = 1$.

b) Constance des paramètres ETF en fonction de la déformation:

La figure V-11 montre que les 4 paramètres ETF (cf équation III-41) varient très peu en fonction de β pour les déformations prolate et oblate. En effet, même pour les paramètres de diffusivité α_q au point $\beta = 0.5$, $\gamma = 60^\circ$ où la variation est la plus grande, le rapport (α_{0q} / α_q) (α_{0q} est le paramètre déterminé par la minimisation de l'énergie ETF au point sphérique et α_q celui provenant de la minimisation au point considéré) est encore égal à 1, à 1% près. Sur la figure V-12 nous avons reporté, aux mêmes déformations, les différences $[E(\alpha_{0q}, \rho_{0q}) - E(\alpha_q, \rho_q)]$ pour les méthodes ETF et EVM. On peut remarquer que l'abaissement

de l'énergie ETF par l'optimisation en chaque point de déformation ne dépasse jamais 40 KeV dans l'intervalle utile d'élongation ($|\beta| \leq 0.5$). Pour l'énergie EVM, et compte tenu des simplifications mentionnées plus haut, on obtient une élévation d'énergie. Cependant, cette variation n'excède pas 100 KeV (au point oblate $\beta = 0.5$). En pratique, les quatre paramètres libres de l'approche ETF seront donc déterminés variationnellement au seul point sphérique (rappelons en effet que les rayons de densité sont réévalués en toute déformation par la conservation du nombre de particules).

Les valeurs obtenues des paramètres ETF (pour l'interaction SIII) sont données dans le tableau ci-dessous:

	N_0	a_{sph}	α_{0p}	α_{0n}	ρ_{0p}	ρ_{0n}
^{110}Cd	8	0.57	0.3980	0.4412	.06461	.08205
^{74}Ge	8	0.55	0.3974	0.4427	.06547	.08316
^{76}Se	8	0.54	0.4013	0.4354	.06690	.08134
^{186}Pt	10	0.53	0.3921	0.4492	.06109	.08325

Les valeurs des éléments de matrice d'appariement G_p , G_n employées pour la détermination des solutions EVM seront présentés avec la discussion des résultats au chapitre VI (table VI-1).

IV) Stabilité numérique des paramètres d'inertie :

a) Choix des pas pour le calcul des dérivées numériques :

La courbe V-13 montre les valeurs du paramètre de masse $B_{\beta\beta}$ en fonction du pas $d\beta$ retenu, pour ^{110}Cd pour $\beta = -0.1$. La valeur du pas que nous avons choisi est de 0.001. Elle assure la stabilité de $B_{\beta\beta}$ pour la multiplication par 2 ou 0.5 du pas $d\beta$. Pour la stabilité en fonction du pas en γ , nous avons effectué des tests identiques et choisi $d\gamma = 0.25^\circ$ (fig V-14). La stabilité numérique du paramètre de masse $B_{\beta\gamma}$ est alors assurée, ce qui n'est pas surprenant puisque ce paramètre s'exprime à partir des mêmes dérivées.

Cependant, comme nous le verrons dans le prochain chapitre, au voisinage des pseudo-transitions de phase superfluide-normale ou plus généralement quand le phénomène d'appariement présente de rapides variations en fonction des déformations, des instabilités numériques peuvent apparaître qu'il faut alors traiter au cas par cas. La détermination numérique des opérateurs dérivées est évidemment plus simple pour les solutions EVM que pour des solutions complètement self-consistantes approchées par un processus itératif qui accroît le bruit numérique [V-1].

b) Stabilité en fonction de la taille N_0 de la base :

Il s'agit ici de vérifier que le nombre de couches majeures adopté pour assurer la convergence de l'énergie totale stabilise également les valeurs des paramètres d'inertie. Cette stabilité est mise en évidence par les courbes V-15 et V-16, où nous avons reporté les valeurs de 2 paramètres de masses $B_{\beta\beta}$ et $B_{\beta\gamma}$ (la stabilité de $B_{\beta\gamma}$ étant une conséquence de celle de ces derniers)

et d'un paramètre d'inertie, pour ^{110}Cd et pour ^{186}Pt en un point déformé ($\gamma = 60^\circ$), avec $N = N_0 \mp 2$.

c) Symétries des paramètres d'inertie:

Le caractère scalaire du hamiltonien de Bohr, et l'existence de symétries ellipsoïdales, conduisent aux diverses relations (IV-83 à IV-87) que doivent satisfaire les paramètres d'inertie. La vérification de ces relations fournit une estimation des incertitudes numériques liées à notre méthode. Nous avons effectué les calculs sur les paramètres de masse de ^{76}Se et obtenu les résultats suivants (en base sphérique $N_0 = 8$).

(β, γ)	$B_{\beta\beta}$	$B_{\gamma\gamma}$	$B_{\beta\gamma}$	\mathfrak{I}_1	\mathfrak{I}_2	\mathfrak{I}_3
$(0.25, -30^\circ)$	68.65	5.239	3.041	5.746	14.56	3.942
$(0, 0)$	81.30	0.000	0.000	$6 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-3}$
$(0.25, 0^\circ)$	63.77	10.67	$-6 \cdot 10^{-2}$	8.193	8.193	$8 \cdot 10^{-3}$
$(0.25, 30^\circ)$	68.59	5.276	- 3.068	14.56	5.726	3.942
$(0.25, 60^\circ)$	14.64	3.666	$3 \cdot 10^{-11}$	12.56	$8 \cdot 10^{-3}$	12.56
$(0.25, 90^\circ)$	68.30	5.276	3.065	3.943	5.721	14.55

Les valeurs attendues nulles pour des solutions à symétrie au moins axiale (équations IV-84b,f et IV-86) sont calculées inférieures à $6 \cdot 10^{-2}$. Les identités (équations IV-84c,d,e et IV-86) sont partout satisfaites à mieux que 0.4% .

Sur la figure V-17 nous montrons que l'évolution de $(\mathfrak{I}_3 / 4 \beta^2 \sin^2 \gamma)$ au voisinage de $\gamma = 0^\circ$ est conforme avec sa valeur limite théorique (équation IV-87) $B_{\gamma\gamma}(\gamma = 0)$. Cette limite apparait également satisfaite à une très bonne approximation.

V) Conclusion :

Compte tenu des prescriptions de calcul employées, une troncature sphérique de la base s'avère bien adaptée aux déformations considérées dans ce travail. Dans le chapitre suivant nous montrerons par ailleurs que les énergies ainsi obtenues se comparent bien avec les résultats de calculs Hartree-Fock plus BCS. Les paramètres de masse vérifient les symétries attendues avec une très bonne précision. Leur stabilité en fonction de N_0 met en évidence la convergence numérique des composantes des états individuels.

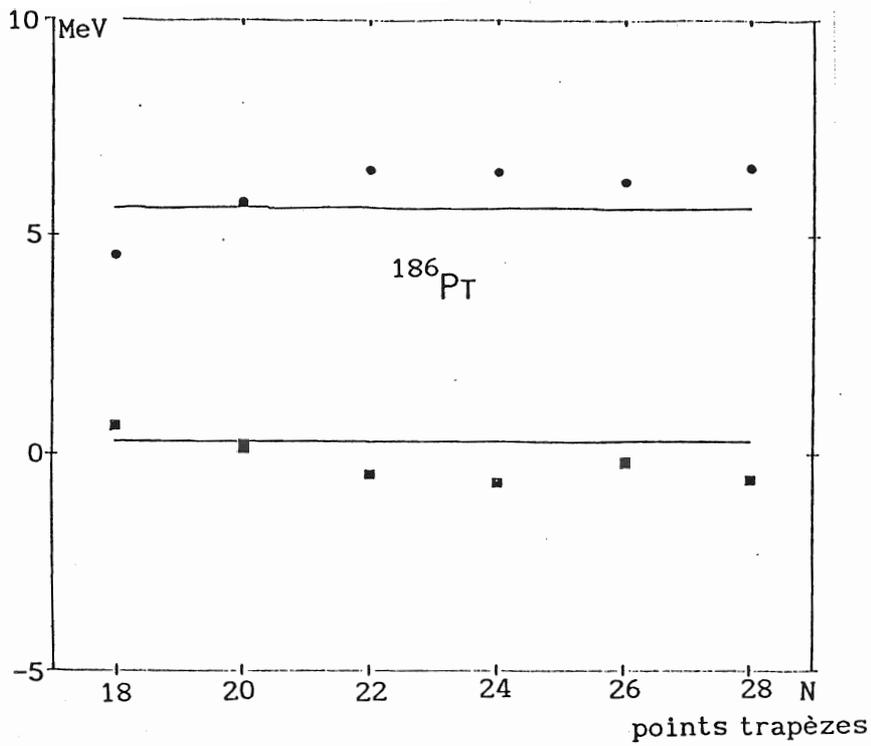


fig V-1:

Comportements de l'énergie coulombienne (carrés) et nucléaire (ronds) en fonction de la densité du réseau d'intégration. La solution intermédiaire est indiquée par les traits horizontaux. (Le résultat obtenu par la méthode de Hermite-Gauss correspond au zéro des ordonnées)

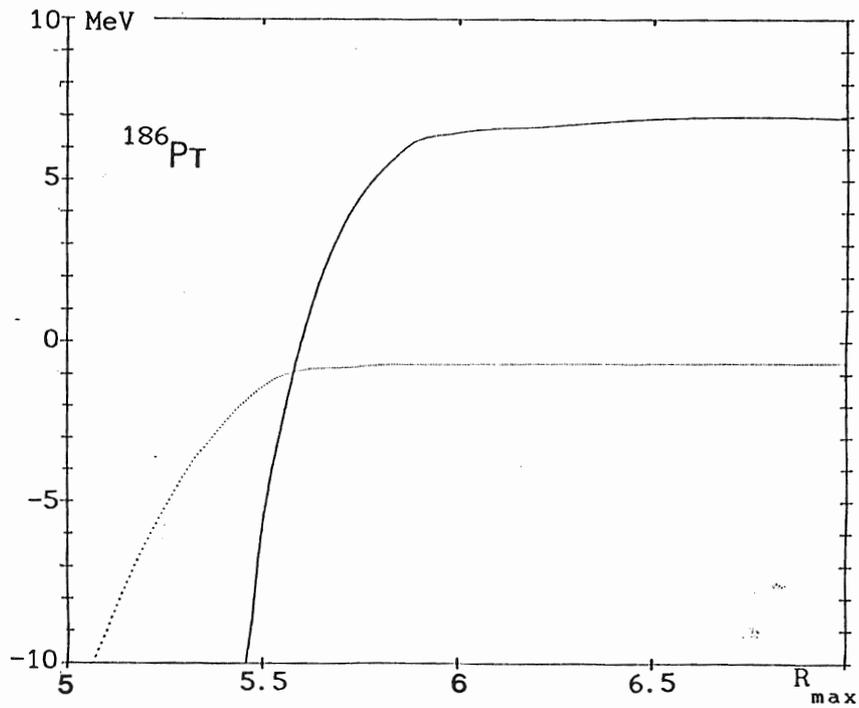


fig V-2:

Comportement des énergies coulombienne (trait plein) et nucléaire (en pointillés) en fonction de la portée R_{max} du réseau d'intégration.

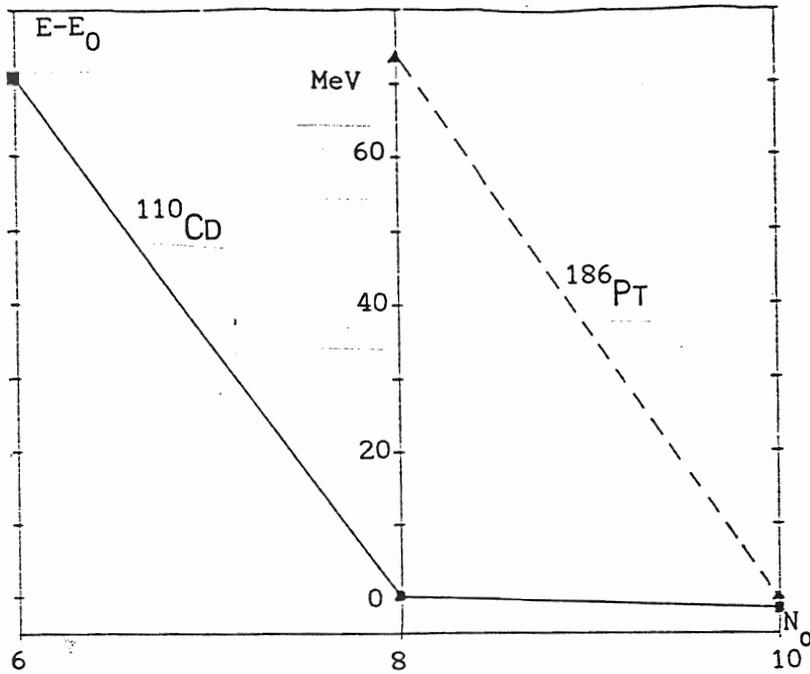


fig V-3:

Energies totales des ^{110}Cd (carrés) et ^{186}Pt (triangles) en fonction de N_0 (N_0 de 6 à 10). La valeur retenue est au zéro d'ordonnées.

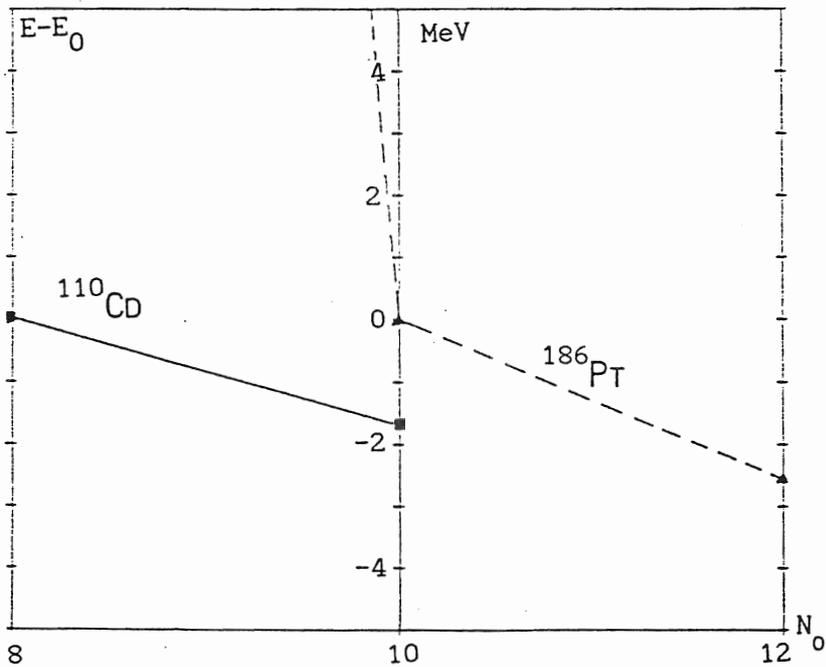


fig V-4:

Energies totales des ^{110}Cd (carrés) et ^{186}Pt (triangles) en fonction de N_0 (N_0 de 8 à 12). La valeur retenue est au zéro d'ordonnées.

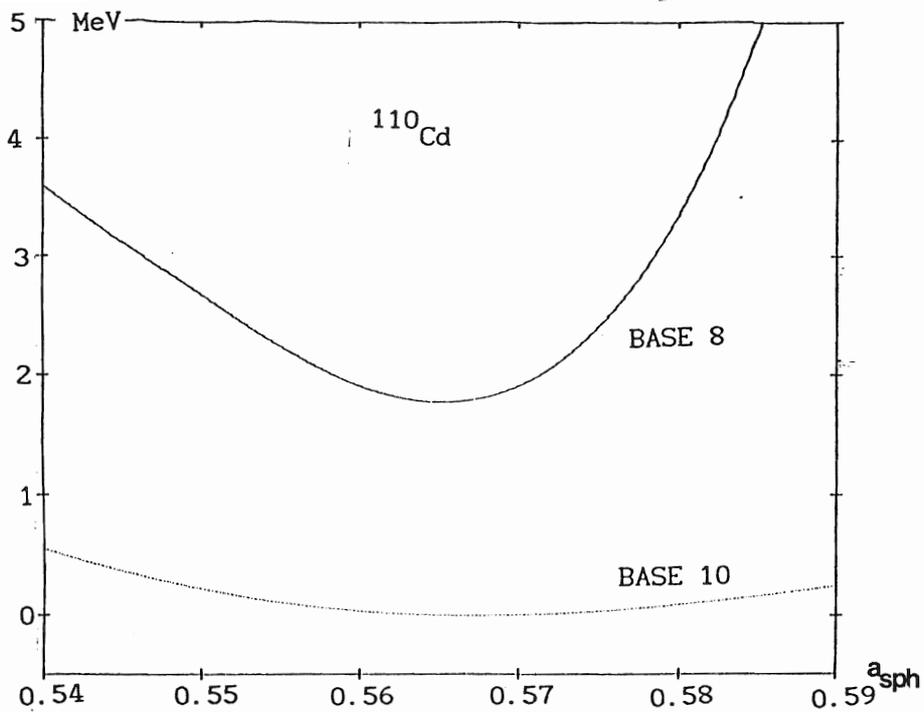


fig V-5:

Optimisation de a_{sph} pour ^{110}Cd . En trait plein $N_0 = 8$, en pointillé $N_0 = 10$.

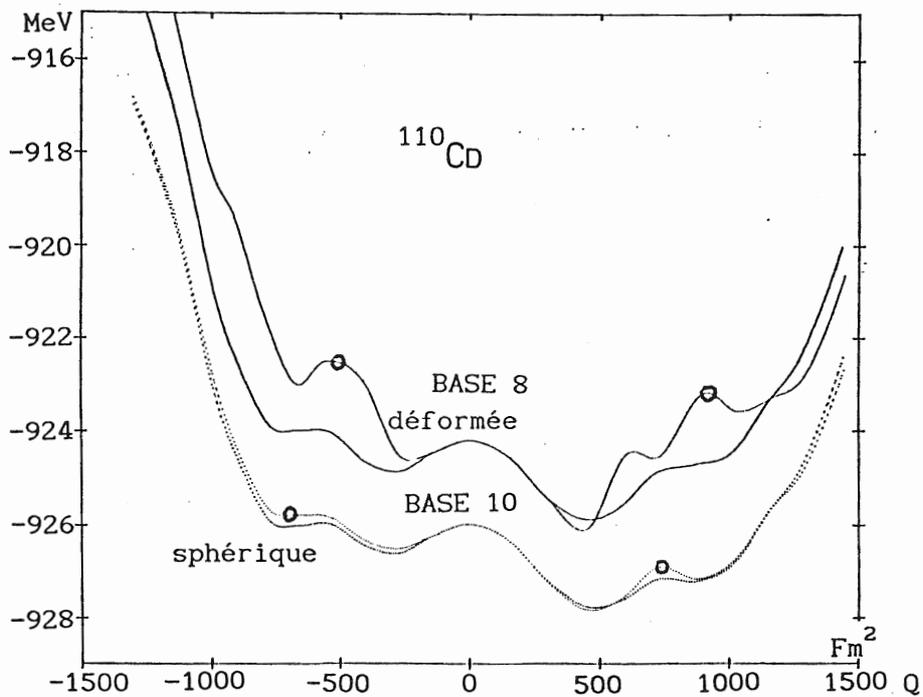


fig V-6:

Energie de déformation axiale de ^{110}Cd pour $N_0 = 8$ (trait plein) et 10 (trait pointillé) en fonction des troncatures sphérique et déformée (symbole rond).

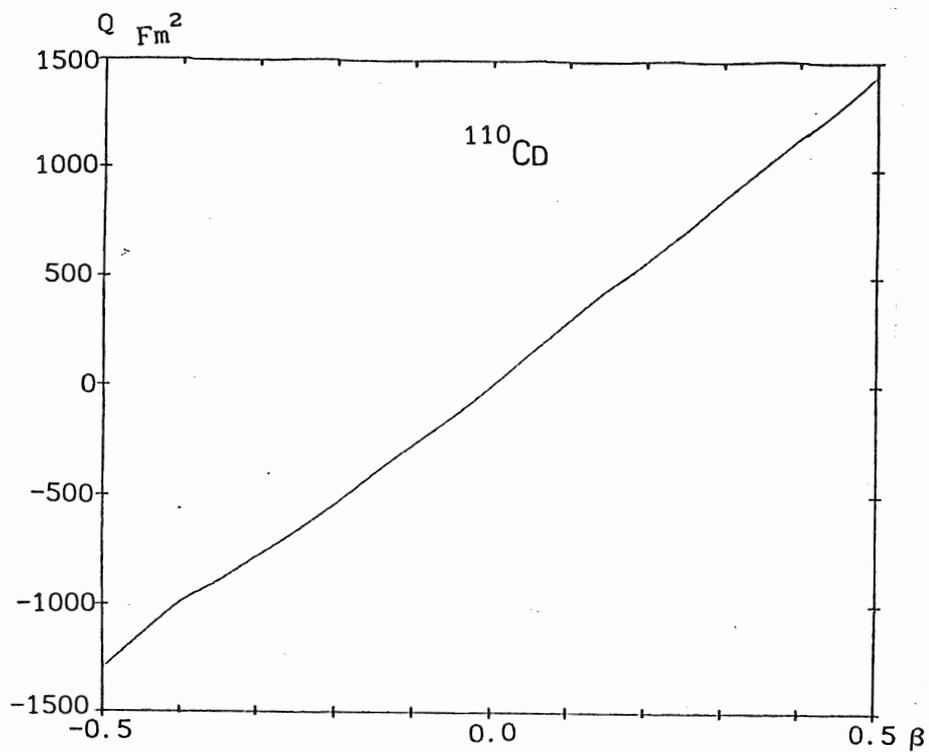


fig V-7:

Courbe de correspondance $\beta = f(Q)$.

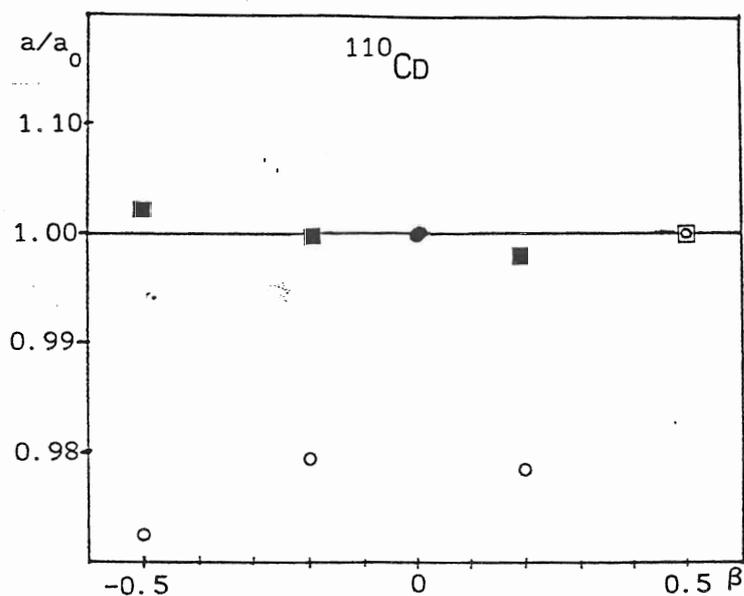


fig V-8a:

Rapport a/a_0 (voir texte) en fonction des troncatures sphérique (carrés) et déformée (ronds) et de la déformation pour ^{110}Cd en base 8.

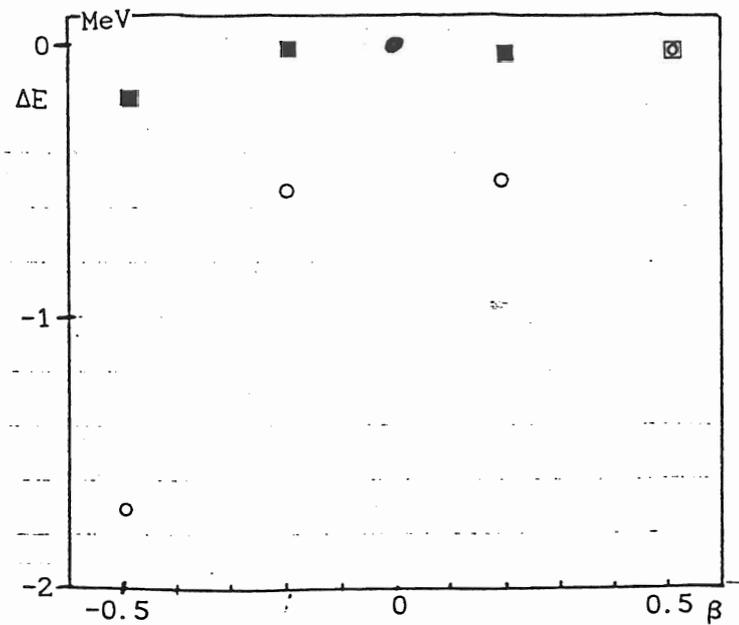


fig V-8b:

Différence des énergies $E(a_0) - E(a)$ pour ^{110}Cd en troncature sphérique (carrés) et déformée (ronds) en fonction de la déformation.

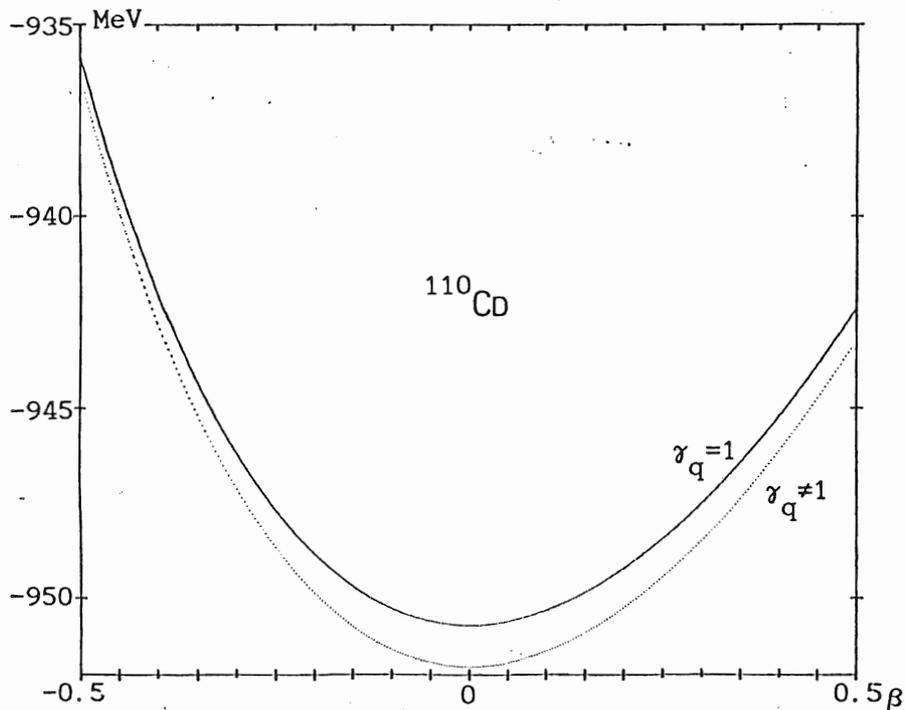


fig V-9:

Energie totale ETF de ^{110}Cd avec $\gamma = 1$ (trait plein) ou γ déterminé par minimisation de l'énergie (trait pointillé).

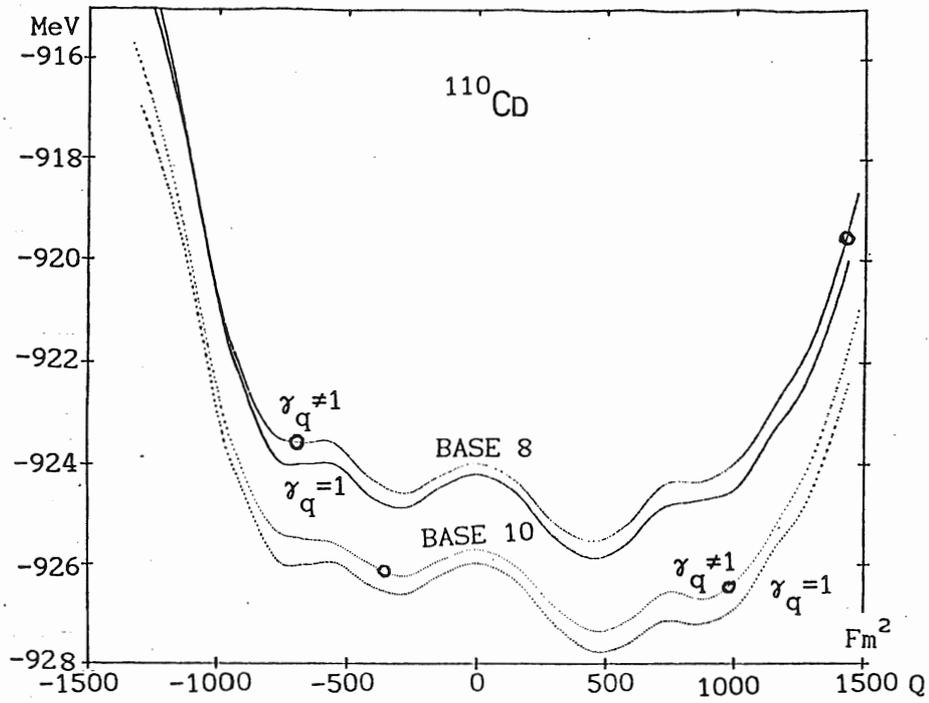


fig V-10:

Energie totale EVM (troncature sphérique) pour ^{110}Cd pour $N_0 = 8$ (trait plein) et 10, quand $\gamma = 1$ ou déterminé par minimisation de l'énergie (ronds).

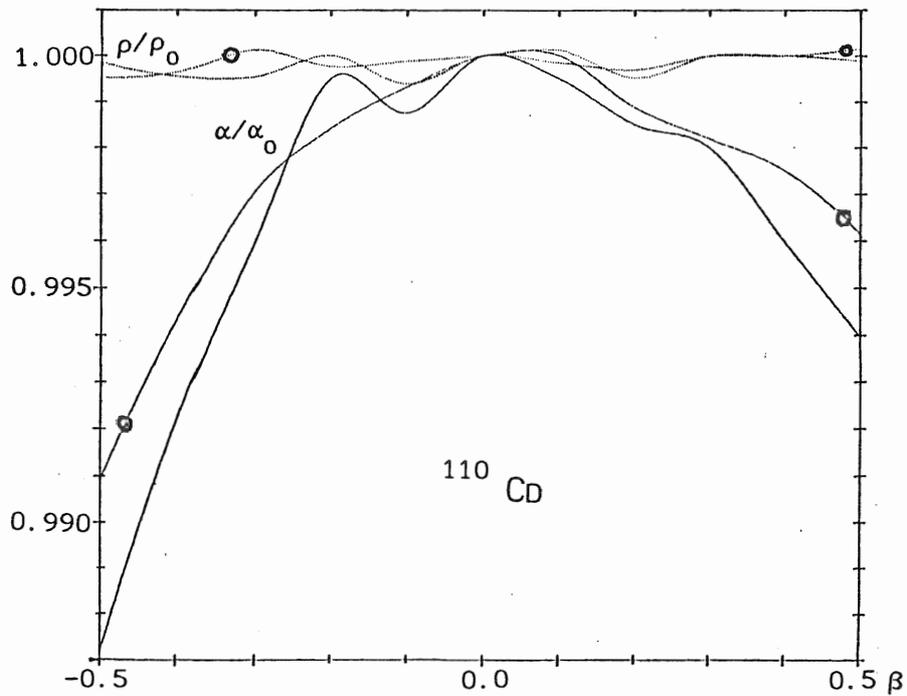


fig V-11:

Fluctuations des 4 paramètres ETF en fonction de la déformation axiale de ^{110}Cd . Les rapport des α sont en trait plein (neutrons indiqués par des ronds), ceux des ρ en trait pointillé.

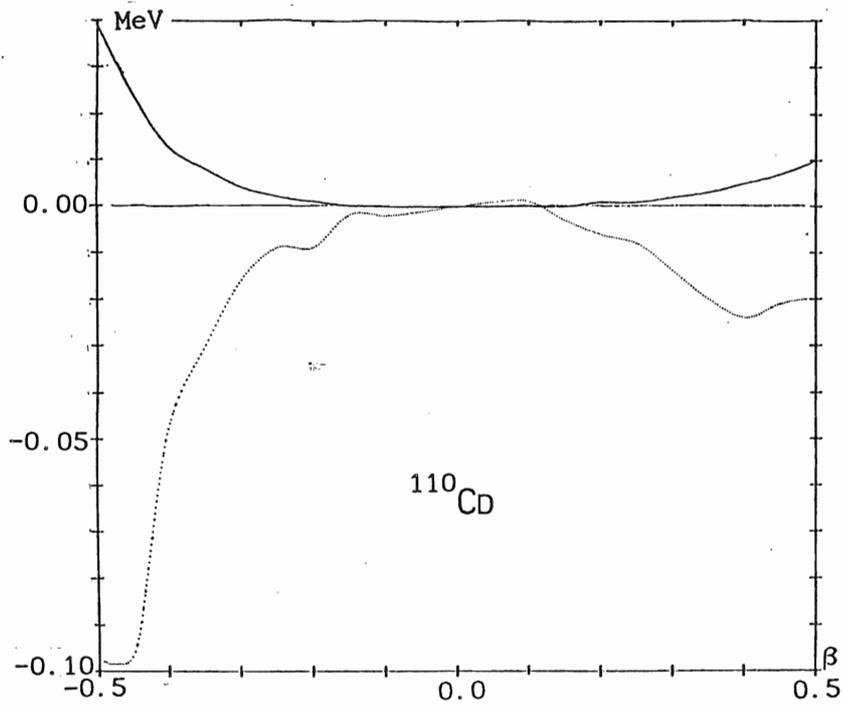


fig V-12:

Différence d'énergies $[E(\alpha_{0q}, \rho_{0q}) - E(\alpha_q, \rho_q)]$ pour ETF (trait plein) et EVM en fonction de la déformation.

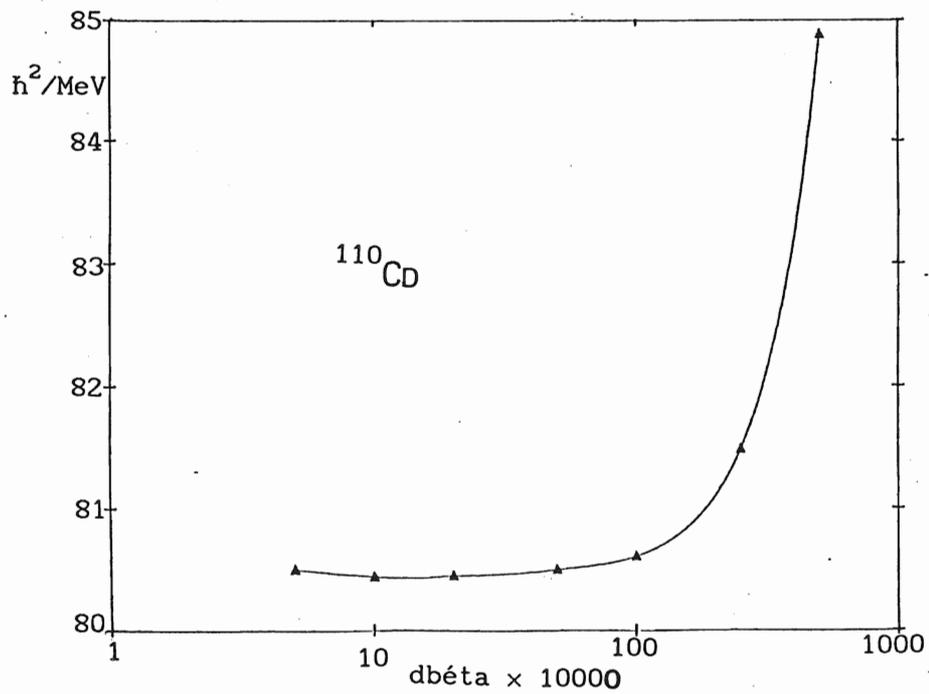


fig V-13:

Stabilité du paramètre $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd en fonction du pas $d\beta$.

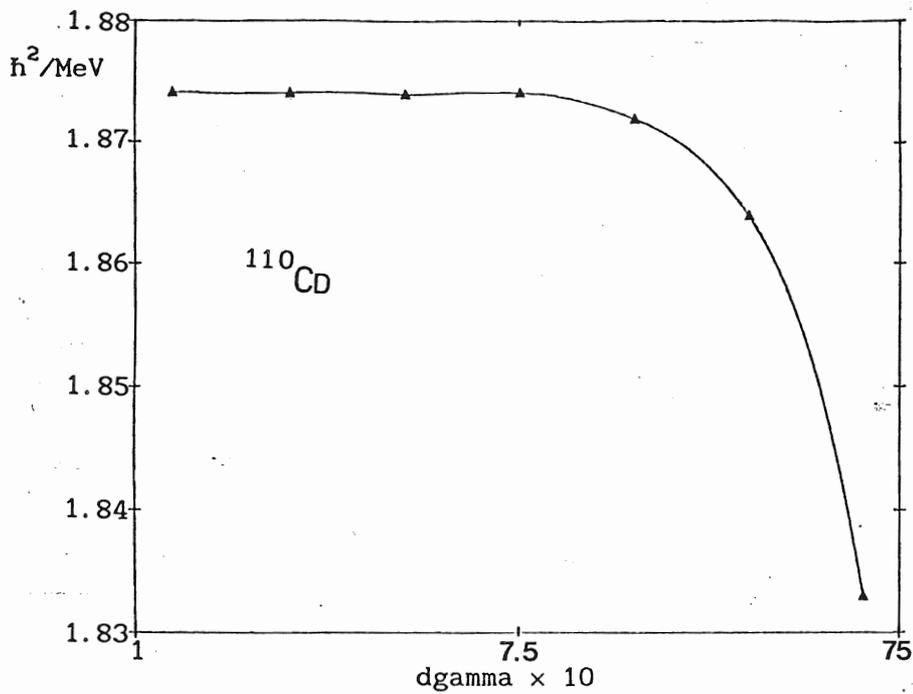


fig V-14:

Stabilité du paramètre $B_{\gamma\gamma}$ de ^{110}Cd en fonction du pas $d\gamma$.

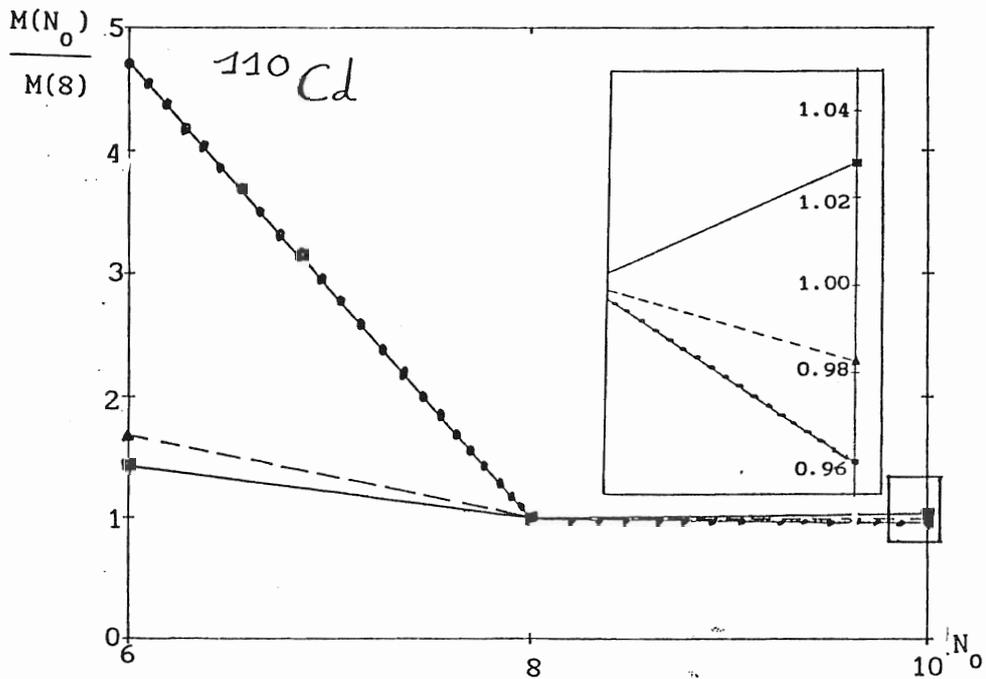


fig V-15:

Stabilité des paramètres $B_{\beta\beta}$ (trait plein et carrés), $B_{\gamma\gamma}$ (trait plein et ronds) et d'un moment d'inertie (trait pointillé) de ^{110}Cd en fonction de N_0 .

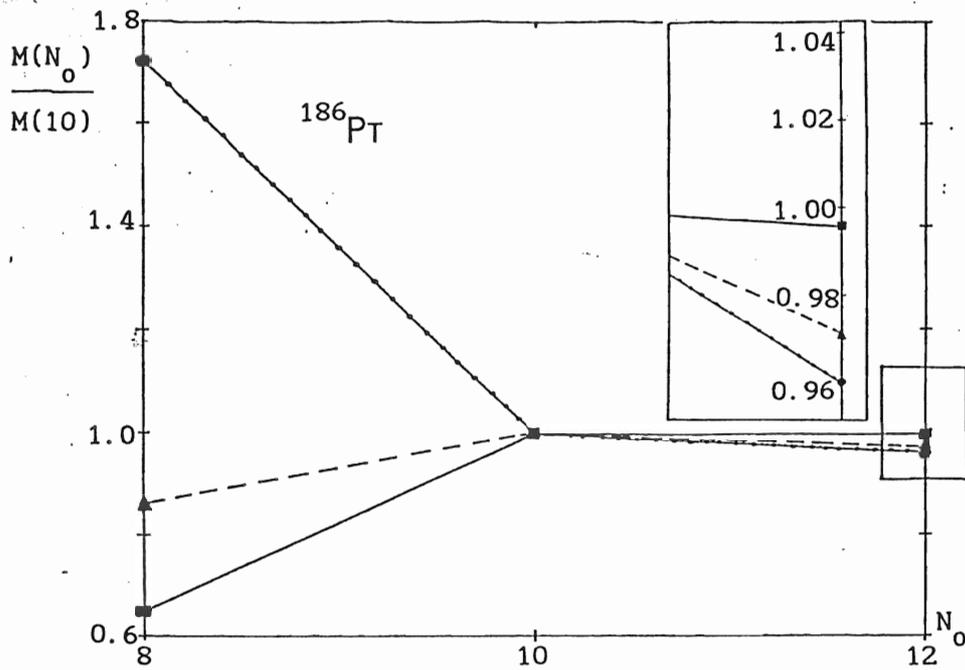


fig V-16:

Stabilité des paramètres $B_{\beta\beta}$ (trait plein et carrés), $B_{\gamma\gamma}$ (trait plein et ronds) et d'un moment d'inertie (trait pointillé) de ^{186}Pt en fonction de N_0 .

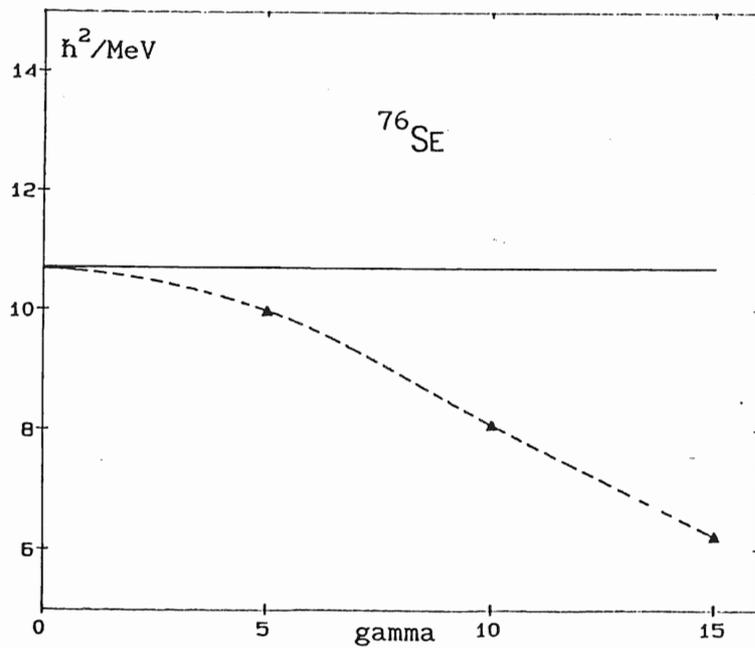


fig V-17:

Evolution de $[\xi_3 / 4\beta^2 \sin^2 \gamma]$ (en pointillés) au voisinage de $\gamma = 0$ et sa limite théorique $B_{\gamma\gamma}(\gamma = 0)$ (trait plein) dans ^{76}Se .

Chapitre VI

Résultats

I) Introduction:

Pour nous assurer de la validité numérique des approximations effectuées nous avons comparé, dans le cas de solutions possédant la symétrie axiale, les énergies potentielles et les paramètres de masse déterminés à partir de la méthode EVM à ceux obtenus par des calculs selfs-consistants Hartree-Fock non contraints et contraints (cf introduction du chapitre III). Les paramètres de masse présentent de fortes oscillations que nous discutons également dans la première partie de ce chapitre. Dans la seconde partie de ce chapitre, nous présenterons pour quatre noyaux ^{74}Ge , ^{76}Se , ^{110}Cd et ^{186}Pt les résultats concernant les cartes d'énergie potentielle et de paramètres d'inertie ainsi que les spectres et fonctions d'ondes collectives.

II) Validité de nos approximations:

a) Comparaison des approches EVM, ETF + Strutinsky et CHF:

De ces diverses approches (utilisant la même interaction effective SIII), nous allons tout d'abord comparer les résultats en énergie totale pour les solutions d'équilibre possédant les symétries axiales (prolate, sphérique et oblate) obtenues pour ^{110}Cd . Sur la figure VI-1a nous avons reporté les énergies totales résultant d'un calcul Hartree-Fock non contraint (calcul effectué pour le fondamental sur un réseau très serré: 5 points par fm, noté HF [VI-1] et placé sur l'axe $\beta = 0$). Nous avons porté en outre, les résultats de calculs contraints (sur un réseau plus lâche (de l'ordre de 1 point par Fm) noté CHF lattice [VI-2] ou sur une base d'oscillateur harmonique à 13 couches majeures noté CHF base 12 [VI-21]). Les solutions à l'approximation ETF sont indiquées également, sans corrections de couches (notées ETF) puis avec inclusion de ces corrections par la méthode de Strutinsky pour deux tailles de base (résultats notés ETF + SC base 8 et 10). De même, nous avons reporté les résultats de la méthode EVM pour ces deux bases (notés EVM base 8 et 10).

En ce qui concerne les énergies rapportées au fondamental, cette figure montre un très bon accord entre toutes ces approches puisque les courbes sont pour l'essentiel parallèles (sauf bien sûr la courbe ETF). Quant aux différences d'énergies du fondamental, pour lesquelles le point de référence est le point HF (très proche de la valeur expérimentale [VI-3] de -930.763 MeV), elles s'expliquent au vu d'un certain nombre de corrections à apporter à ces résultats. En effet, les calculs Hartree-Fock contraint sur réseau (CHF lattice) souffrent d'une imprécision numérique dans le calcul de l'énergie cinétique par la méthode des différences finies d'environ 0.5% par nucléon [VI-4] (soit ici de l'ordre de 5 MeV sur l'énergie totale). Pour les calculs CHF à base d'oscillateur harmonique, la troncature à 13 couches majeures entraîne dans le présent noyau une erreur de 3 à 5 MeV [VI-5]. Enfin, l'énergie moyenne ETF (connue pour donner des énergies de liaison trop grandes [VI-5]) est

généralement plus basse de 10 à 15 MeV (des noyaux moyens aux noyaux plus lourds) que l'énergie HF. Comme, ces courbes, sont dans l'ensemble parallèles, les corrections précédentes sont faiblement dépendantes de la déformation. D'autre part, pour des tailles raisonnables de base, les effets de couches sont indépendants de la troncature [VI-7], ce que nous retrouvons ici à partir de 9 couches majeures.

Alors que le calcul self-consistant ETF (et corrections de couches) conduit systématiquement à une énergie trop basse, la méthode EVM, qui s'avère presque équivalente pour la prédiction des énergies de déformation à celles obtenues dans des calculs HF, par contre présente l'avantage (théorique) de donner toujours des énergies plus élevées. (Ce qui s'explique par le fait que les solutions EVM ne sont pas les solutions du principe variationnel dans l'espace de Hartree-Fock.)

Sur la figure VI-1b, nous présentons les courbes d'énergie potentielle obtenue, pour la direction triaxiale ($\gamma = 30^\circ$) dans ^{74}Ge , par la méthode EVM et par des calculs CHF. Les énergies sont reportées au point sphérique. Cette figure montre un très bon accord, y compris à grande déformation, entre les deux méthodes ; et, si à petite déformation, on observe des fluctuations, elles ne portent que sur environ 300 keV.

b) Comparaison des paramètres de masses $B_{\beta\beta}$ axiaux des diverses approches théoriques:

Les paramètres de masse s'expriment à partir des états individuels de la solution statique. Sur la figure VI-2, nous présentons le paramètre axial $B_{\beta\beta}$ (cf équation II-69) obtenu à l'approximation du cranking d'Inglis à partir des fonctions d'onde individuelles CHF [VI-8] (en pointillés) et EVM. La comparaison de ces paramètres de masse fournit un test des fonctions d'onde individuelles déterminées par la méthode EVM. Les résultats présentés sur cette figure montrent que les spectres d'états individuels CHF et EVM sont peu différents. Les

oscillations de ces deux paramètres de masse sont grosso modo en phase. Quant aux différences d'amplitude, la définition, par la méthode EVM, d'un chemin adiabatique à partir des seules formes ellipsoïdales peut en être à l'origine.

On peut également remarquer que le paramètre de masse EVM n'est pas situé de façon systématique au-dessus du paramètre CHF.

c) Fluctuations des paramètres de masse:

i) Comportement en fonction de l'appariement:

Sur les courbes VI-3 nous avons reporté, pour ^{110}Cd , en fonction de la déformation axiale les valeurs des gaps d'appariement Δ (cf équation III-54) pour les protons (trait pointillé) et les neutrons (trait plein). Le paramètre de masse $B_{\beta\beta}$ obtenu précédemment (pour les constantes de pairing utilisées dans le calcul CHF) est également présent. Cette figure met en évidence le lien qualitatif qui existe entre les fluctuations de l'appariement et celles des paramètres de masse.

On peut par exemple noter la grande valeur du paramètre de masse axial obtenu du côté oblate pour $\beta = -0.45$. Ce point est situé entre deux "pseudo"-transitions de phase superfluide-normale (dans l'hypothèse simplificatrice de BCS) et où l'appariement en neutrons varie très rapidement. En dehors de ces zones de fortes variations du gap d'appariement (et même d'annulation), les paramètres de masses sont connus pour se comporter en $1/\Delta^2$ (dans les zones où $\Delta \geq 0.2$ [VI-9,10,11]). Ceci est grossièrement vérifié pour des déformations $|\beta| < 0.2$ correspondant à des zones d'appariement stable.

La forte dépendance des paramètres de masse en fonction du gap d'appariement peut conduire à des instabilités numériques dans le calcul de nos dérivées. Ceci nous a conduit à introduire un test sur le taux de variation du gap d'appariement, en fonction du pas

des dérivées, entre les 4 points entourant le point central où nous évaluons le hamiltonien de Bohr.

En effet, dans un cas où le gap d'appariement varie très rapidement (gap proton à $\beta = -0.45$ pour ^{110}Cd), le paramètre de masse axial varie beaucoup plus vite, par agrandissement du pas de dérivation, que dans un cas où le pairing est stable ($\beta = 0.1$ pour le même noyau) ainsi qu'il l'est montré sur la figure VI-4.

Aux variations des gaps d'appariement nous pouvons relier [VI-8] les variations de densité spectrale et/ou l'existence de pseudo-croisements de niveaux au voisinage du niveau de Fermi.

Par exemple, toujours dans ^{110}Cd , le pic observé autour de $\beta = -0.45$ est dû au pseudo-croisement de deux états de neutrons de parité négative.

Compte tenu du lien très fort qui existe entre les fluctuations de l'appariement et celles des paramètres de masse sous les hypothèses faites pour le traitement des corrélations d'appariement, il semble naturel de se demander si les fluctuations des paramètres de masse sont significatives ou non. Un élément de réponse sera donné dans le cas de ^{186}Pt dans le paragraphe de ce chapitre concernant nos résultats sur ce noyau.

d) Stabilité des solutions du hamiltonien de Bohr:

Sur la figure VI-5, nous présentons les spectres obtenus pour ^{74}Ge avec des tailles de base pour la diagonalisation du hamiltonien de Bohr (cf équations IV-95,96) croissantes ($N = 8, 10, 12, 14$). Les différences de convergence entre les états de spin 0, 2 etc, proviennent du fait que la diagonalisation est effectuée sur une base d'autant plus grande que le spin est élevé. C'est donc la stabilité des états 0^+ qui est significative pour la convergence numérique. Compte tenu de ce qui précède, la figure VI-5 montre que la convergence des états est obtenue pour une taille de base $N_0 = 12$ que nous avons retenue pour la diagonalisation du hamiltonien de Bohr pour tous les noyaux étudiés.

III) Résultats:

a) Réseau dans le plan (β, γ):

Nous avons construit un réseau de 56 points correspondant à des valeurs de γ de $0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ et distants de 0.05 en β (de $\beta = 0$ pour le point sphérique jusqu'à $\beta_{\max} = 0.55$). Pour calculer les dérivées nécessaires à la détermination de la partie cinétique du hamiltonien de Bohr, nous avons effectué 5×56 calculs de fonctions d'onde individuelles par la méthode EVM et, 56 calculs de paramètres d'inertie. Compte tenu de ces chiffres, l'intérêt de réduire le temps de calcul est évident. Cette remarque à elle seule justifie l'emploi de la méthode EVM. L'ensemble des cartes que nous allons présenter (paramètres d'inertie, surfaces d'énergie potentielle) résultent d'un lissage sur les résultats obtenus pour les 56 points du réseau.

b) Paramètres des calculs:

La table VI-1 donne l'ensemble des paramètres définissant les densités variationnelles ETF, la base de développement des états individuels et les prescriptions de pairing utilisées pour les 4 noyaux étudiés. Les valeurs des éléments de matrice d'appariement $G_p G_n$ sont définies par la prescription $G_{p,n} = [G_{0p,n} / (11 + N_{p,n})]$, les $G_{0p,n}$ sont tabulés en MeV comme les énergies de coupure (E_c) et sont obtenues à partir (pour ^{110}Cd et ^{186}Pt) des différences d'énergie de liaison expérimentale entre noyaux pairs et impairs voisins. Pour les deux autres noyaux, relativement proches du Cadmium, nous avons pris les prescriptions de pairing de ce dernier.

	N_0	a_{sph} (fm ⁻¹)	α_{Op} (fm)	α_{On} (fm)	ρ_{Op} (fm ⁻³)	ρ_{On} (fm ⁻³)	G_{Op} (MeV)	G_{On} (MeV)	E_c (MeV)
¹¹⁰ Cd	8	0.57	0.3980	0.4412	.06461	.08205	16.5	13.5	5
⁷⁴ Ge	8	0.55	0.3974	0.4427	.06547	.08316	16.5	13.5	5
⁷⁶ Se	8	0.54	0.4013	0.4354	.06690	.08134	16.5	13.5	5
¹⁸⁶ Pt	10	0.53	0.3921	0.4492	.06109	.08325	14.2	16	5

Table VI-1

Récapitulatif des valeurs des paramètres ETF, de la base et des constantes d'appariement (intensité et énergie de coupure employées).

c) Noyaux de ⁷⁴Ge et de ⁷⁶Se :

Les noyaux de Germanium et Sélénium appartiennent à une zone de transition ($Z = 32-36$, $N = 34-48$): ils sont situés entre, et assez loin, des couches fermées 28 et 50 de neutrons et de protons. Ce sont des noyaux "mous", c'est à dire que leur énergie varie peu en fonction de la déformation. Cependant, ces isotopes ont certaines propriétés encore mal comprises qui justifient les nombreuses études tant théoriques [VI-12,13,14] qu'expérimentales dont ils continuent à faire l'objet. Des données récentes (par diffusion d'électrons [VI-14], ou par réaction $(d, ^3\text{He})$, (p, t) [VI-12,15,16]) concernant le premier état 0^+ excité (noté 0_2^+), suggèrent une transition de forme (oblate \rightarrow prolate) quand le nombre de neutrons croît ($N = 40-42$, avec un minimum pour l'énergie de ce niveau 0_2^+ quand $N = 40$), voire une coexistence de forme [VI-12] pour les isotopes intermédiaires. La reproduction du 0_2^+ à basse énergie est par conséquent un bon test des résultats de spectroscopie. Les récents résultats obtenus à partir du modèle IBA (obtenus cependant avec un certain nombre de paramètres libres) semblent confirmer l'hypothèse d'une transition de forme dans cette région de la charte [VI-17].

Les surfaces d'énergie potentielle que nous avons obtenues présentent une grande mollesse tant en γ qu'en β . Le Sélénium possède un minimum plutôt oblate ($\beta = 0.23$, $\gamma = 48^\circ$ cf fig VI-6) alors que celui du Germanium est triaxial ($\beta = 0.29$, $\gamma = 24^\circ$ cf fig VI-6). Des résultats analogues avaient déjà été obtenus par Girod, Grammaticos et Gogny pour le noyau ^{74}Ge [VI-13] à ceci près, que le puits que nous obtenons est moins profond que dans les calculs HFB [VI-13] utilisant l'interaction de Gogny D_1 . De façon générale, une grande mollesse de la partie statique impose de décrire ces noyaux dynamiquement, comme une superposition d'états de différentes déformations.

Sur les figures VI-7 et VI-8 nous présentons les spectres de basse énergie que nous avons obtenus pour ces deux noyaux. Dans le cas de ^{74}Ge , l'accord à l'expérience est remarquable (fig. VI-7). Nous reproduisons correctement les énergies des états à un phonon (énergie des 0^+_{β} et 2^+_{γ}).

Pour le Sélénium (fig. VI-8), le spectre théorique semble à première vue en moins bon accord avec les données. Cependant, nous reproduisons très bien la partie à très basse énergie (énergie inférieure à 1,5 MeV) comme les têtes de bandes β , γ et $\beta\beta$.

L'existence d'un triplet (4^+_2 , 0^+_2 , 2^+_2) [caractère vibrationnel] et la position relative de ces états est une indication de triaxialité (l'existence d'un rotor triaxial ou d'une mollesse en γ conduit à un état 2^+_2 placé en dessous du 4^+ [VI-18]).

Le spectre de ^{74}Ge présente ces particularités que nous reproduisons théoriquement. Dans le ^{76}Se , alors que nous trouvons statiquement un noyau oblate, le spectre théorique présente également une quasi dégénérescence ($4^+_1, 0^+\beta$) avec un 2^+_{γ} en dessous de ces deux niveaux c'est-à-dire que nous obtenons un spectre de noyau triaxial.

Les densités d'occupation collective des états (fonction d'onde au carré multipliée par la mesure $Dd\alpha_0 d\alpha_2 d\Omega$) sont données sur la figure VI-9 pour ^{74}Ge et sur la figure VI-10 pour ^{76}Se .

Ces densités sont très semblables pour ces deux noyaux; celles de leurs bandes fondamentales ne subissent pas (ou très peu dans le cas de ^{76}Se) d'effet dû à l'augmentation de la fréquence de rotation : elles gardent la même forme quand on monte en spin et les maxima de tous ces états sont en phase. On retrouve d'autre part la structure à un phonon de la bande β : les densités des états de cette bande possèdent 2 maxima, le plus élevé étant à plus petit β pour le 0^+ et à plus grand β pour le 2^+ dans les deux noyaux. Les maxima de ces deux états sont d'ailleurs très voisins. Le 2^+ γ ressemble aux états de la bande fondamentale bien qu'il leur soit orthogonal (les états de la bande γ sont majoritairement des états $K = 2$, et ceux de la bande fondamentale des états $K = 0$). Les troisièmes 0^+ de ces deux noyaux ont la même structure complexe.

Dans la table VI-2 (page suivante) nous donnons des déformations moyennes des états de ^{74}Ge et de ^{76}Se , la position de maximum (ou des maxima, le plus élevé est indiqué par une étoile) ainsi que les composantes en K (voir § V-b du chap. IV) données pour β_{moyen} et γ_{moyen} .

Nous retrouvons bien des états localisés dans les régions triaxiales conformément à ce que nous attendions au vu du spectre (présence du triplet). Les états de la bande fondamentale du Germanium présentent tous un maximum triaxial à $\beta = 0.23$, $\gamma = 38^\circ$ c'est à dire légèrement décalé par rapport au minimum d'énergie statique ($\beta = 0.3$, $\gamma = 24^\circ$). Le plus élevé des maxima du 0_2^+ se situe à ($\beta = 0.12$, $\gamma = 30^\circ$) et le second se place à ($\beta = 0.35$, $\gamma = 16^\circ$) du côté prolate. Pour le 2_β^+ , la situation est inversée : le maximum absolu est placé du côté prolate ($\beta = 0.38$, $\gamma = 16^\circ$) et le second maximum est au point triaxial du 0^+ en β avec un décalage en γ qui peut être dû à la mollesse du potentiel en γ . Si nous regardons les déformations moyennes de ces états (table VI-2 de la page suivante), nous observons que les états de la bande fondamentale partant de $\bar{\beta} = 0.24$, $\bar{\gamma} = 31^\circ$ se rapprochent du minimum statique (en tenant compte de la remarque précédente sur la mollesse en γ), en effet nous trouvons pour le 8^+ $\bar{\beta} = 0.28$, $\bar{\gamma} = 30^\circ$. Ce même effet se retrouve sur la bande β dont le 4^+ présente une déformation similaire $\bar{\beta} = 0.29$, $\bar{\gamma} = 31^\circ$.

états	β_{moy}	γ_{moy}	β_{max}	γ_{max}	K	
0^+_{fond} (Ge)	0.24	31°	0.23	38°	0	
0^+_{fond} (Se)	0.24	33°	0.20	33°	0	
2^+_{fond} (Ge)	0.25	31°	0.23	38°	0(0.8) 2(0.5)	
2^+_{fond} (Se)	0.25	34°	0.21	39°	0(0.7) 2(0.6)	
4^+_{fond} (Ge)	0.26	30°	0.23	38°	0(0.8) 2(0.6)	4(0.2)
4^+_{fond} (Se)	0.26	34°	0.22	40°	0(0.7) 2(0.6)	4(0.3)
0^+_{β} (Ge)	0.25	24°	0.12 0.35	30°* 16°	0	
0^+_{β} (Se)	0.21	30°	0.11 0.27	30°* 34°	0	
2^+_{β} (Ge)	0.3	27°	0.38 0.12	16°* 38°	2(0.8) 0(0.5)	
2^+_{β} (Se)	0.29	30°	0.29 0.14	30°* 34°	2(0.8) 0(0.6)	
2^+_{γ} (Ge)	0.27	30°	0.23	35°	2(-.8) 0(0.5)	
2^+_{γ} (Se)	0.26	29°	0.23	30°	2(-.7) 0(0.7)	

Table VI-2

Déformations moyennes des états de ^{74}Ge et de ^{76}Se . Position du maximum ou des maxima, et composantes en K ($\beta_{\text{moy}}, \gamma_{\text{moy}}$).

Dans le Sélénium, on observe un léger déplacement des maxima des états (effet centrifuge) vers de plus grandes déformations quand le spin augmente ce qui peut être dû à la mollesse du potentiel conjuguée avec les effets proprement dynamiques.

Les paramètres d'inertie sont présentés fig. VI-11 pour ^{74}Ge et fig. VI-12 pour ^{76}Se . Excepté le paramètre de masse associé à la vibration dans la direction β , les paramètres d'inertie pour ces deux noyaux sont très semblables et ne présentent pas de fortes fluctuations.

Le paramètre de masse $B_{\beta\beta}$ de ^{74}Ge présente un maximum en coïncidence avec le fond du puits statique. (Les fortes masses à grande déformation ne peuvent jouer un rôle de localisation compte tenu de la valeur très élevée du potentiel dans cette partie du plan).

Par contre, dans le cas de ^{76}Se , si le paramètre de masse $B_{\beta\beta}$ possède un maximum aux mêmes (β, γ) et plus important que celui de ^{74}Ge , ce pic n'est pas en coïncidence avec le fond du puits (le minimum statique de ^{76}Se est dans la région oblate quand le maximum de $B_{\beta\beta}$ est triaxial) et peut expliquer le déplacement des états vers de plus grandes déformations quand le spin augmente (effet centrifuge des maxima). Cependant, ce pic n'a pas une amplitude suffisante puisque nous obtenons des états ayant des β trop petits. En effet, expérimentalement [VI-20], le 2_1^+ a une déformation correspondant à $0.293 < \beta < 0.310$ quand nous obtenons théoriquement $\beta = 0.25$ (cf table VI-2). Par ailleurs, le décalage vers le haut du spectre théorique par rapport au spectre expérimental (ce que nous observons ici pour les états de spin non nuls d'énergie supérieure à 2.5 MeV) traduit généralement la faiblesse des paramètres d'inertie. Il n'en reste pas moins vrai que ces résultats dans les deux noyaux sont remarquables si l'on songe à l'absence de paramètres ajustables.

Ces calculs vont être poursuivis dans la région des Germanium. En effet, les résultats expérimentaux (densités de probabilité de transition et de charge [VI-12,14,19]) sur ^{74}Ge montrent que le premier 0^+ excité devrait ressembler au 0^+ du fondamental de ^{72}Ge . Par ailleurs, un changement de structure du 2_2^+ entre ces isotopes ($^{72-74}\text{Ge}$) est prévu. Cependant, nous ne pouvons encore fournir de résultats sur les densités mesurées expérimentalement. De tels calculs représentent un effort numérique considérable et, de plus, conduisent à calculer des éléments de matrice entre deux fonctions d'onde de BCS -qui conservent le nombre de particules en valeur moyenne- et sont donc tels que bra et ket n'ont pas le même nombre de particules.

d) Noyau de ^{110}Cd :

La région des isotopes de Cadmium ($N < 82$, $Z > 50$) a été fréquemment étudiée pour deux raisons principales: la recherche autour du noyau doublement magique $^{100}_{50}\text{Sn}_{50}$ (sphérique) qui permet de tester la dépendance N-Z de l'interaction nucléaire; et, de plus, la brusque variation des phénomènes collectifs mise en évidence dans cette région.

Pour les isotopes de Cadmium, des calculs théoriques [VI-18] d'énergie potentielle ont montré que les isotopes avec $N \leq 50$ sont statiquement sphériques ($^{100-92}\text{Cd}$). En revanche, d'après ces mêmes calculs, l'augmentation du nombre de neutrons au-delà de la couche fermée s'accompagne de déformations prolate et de mollesse dans le potentiel. De plus, les courbes d'énergie axiale calculées, à partir de ^{110}Cd et au-delà, présentent l'esquisse d'un second minimum (oblate) [VI-18,21-26].

Expérimentalement, ce second minimum conduit à une seconde bande quasi-rotationnelle dans les isotopes $^{110-112-114}\text{Cd}$ (soit un nombre de niveaux plus important qu'attendu à l'énergie de la vibration quadrupolaire et une séquence d'énergie de type $I(I+1)$) dont la tête de bande a l'énergie des deux phonons [VI-27]. Ceci avait d'ailleurs été prévu théoriquement [VI-22,23] et correspond, dans le cas de ^{110}Cd , à une forte composante en protons $\Pi(g_{9/2})^{-4}(j)^2$ (où j est l'une des orbites sphériques disponibles des protons) [VI-28]. La configuration $\Pi(g_{9/2})^{-4}(d_{5/2})^2$ correspond au second minimum d'énergie potentielle [VI-29].

Par ailleurs, les bandes construites à partir des 0_1^+ et 0_2^+ (soit les bandes fondamentale et quasi-bande β) ont des moments d'inertie différents ($\mathcal{I}_2 > \mathcal{I}_1$) suggérant une déformation moyenne différente ($\beta_2 > \beta_1$). Cette augmentation est attendue pour des niveaux associés au second minimum.

Tous ces résultats peuvent être interprétés également dans le cadre d'une approche collective par l'existence d'une coexistence de forme avec des surfaces d'énergie potentielle à deux minima du ^{110}Cd au ^{114}Cd [VI-29]. Des calculs théoriques semi-microscopiques

faisant intervenir un certain nombre de paramètres libres, supposant un couplage de la paire de trous en protons à la vibration quadrupolaire ont reproduit la structure quasi-rotationnelle de la bande associée à l'état 0_1^+ mais expliquent mal les résultats expérimentaux pour le 0_2^+ [VI-30].

Par ailleurs, la proximité de la couche fermée $Z = 50$ et du nombre semi-magique en neutrons: $N = 64$ (voir par exemple la référence [VI-21] où sont présentées les séquences d'états individuels pour ^{106}Cd) se traduit au niveau des effets de couches par une opposition proton-neutron. Nous avons confirmé ce résultat en calculant les effets de couches à partir des états propres du hamiltonien $h(\rho_{\text{ETF}})$ à un corps par la méthode de Strutinsky.

Ce dernier point met en évidence la difficulté des calculs théoriques concernant ce noyau, ou plus exactement l'importance d'avoir des séquences d'états individuels correctes et en cela, explique que ces calculs sont de bons tests autant de l'interaction effective retenue que, en ce qui nous concerne, des approximations faites (hypothèses sur l'appariement et celles inhérentes à la méthode EVM).

Au début de ce chapitre, nous avons comparé les énergies de déformation axiale calculées sous diverses approches (cf fig VI-1) et conclu que nos résultats étaient équivalents aux calculs self-consistants de type Hartree-Fock. Ce résultat est encore vrai pour la surface d'énergie dans le plan β, γ (voir fig VI-13, à comparer au résultat de la référence [VI-2]). En particulier, nous retrouvons le second minimum oblate peu marqué comme le montre la coupe à $\gamma = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ (fig VI-14). Cette figure montre en outre que l'existence de ce minimum oblate est liée à la mollesse en γ .

Comme nous l'avons précédemment souligné, une mollesse du potentiel impose de décrire ce type de noyau de façon dynamique.

Or, le spectre que nous avons obtenu (fig. VI-15) reproduit assez bien l'expérience : si nous trouvons des énergies inférieures aux énergies expérimentales, nous conservons la structure des bandes (bande fondamentale rotationnelle, bande β quasi-rotationnelle). De plus, la structure rotationnelle de la bande fondamentale

explique l'accroissement de la différence d'énergie théorie-expérience des états de cette bande quand on monte en spin (niveaux en $I(I+1)$).

Enfin, alors que le troisième 0^+ mesuré récemment [VI-44] a été interprété dans le cadre du modèle IBM (IBM-2) comme un état intrus [VI-44], nous obtenons dans notre description d'états collectifs (sans paramètre libre) une reproduction de son énergie à 80 keV près.

Le tassement du spectre théorique indique que nous avons des paramètres d'inertie trop grands. Les moments d'inertie varient comme l'élongation β , nous pouvons nous attendre à ce que les états de la bande fondamentale aient un β plus grand qu'attendu (ce qui sera confirmé avec le 2_1^+). La levée de dégénérescence des états 0_β^+ , 2_γ^+ et 4_1^+ , 2_γ^+ du triplet et, l'inversion de ces deux derniers états dans le spectre théorique montre que nous obtenons le spectre d'un noyau plutôt à symétrie axiale quand le spectre expérimental traduit l'existence d'un rotor triaxial.

Compte tenu de l'effet de l'intensité du champ d'appariement sur la valeur des paramètres de masse* (cf fig VI-2 et paragraphe II-c de ce chapitre), nous avons effectué un calcul analogue où, toutefois, nous avons augmenté les intensités d'appariement, G , de 5% pour les deux types de nucléons (les paramètres de masse se comportant dans le cas général en $1/\Delta^2$). Pour ces deux calculs les surfaces d'énergies potentielles (fig VI-13,14 et 16) sont très semblables et présentent toutes deux un minimum prolata avec une vallée en γ ainsi qu'un épaulement sur l'axe oblate. Les spectres obtenus sont présentés sur la figure VI-17. Comme attendu, le second calcul donne un spectre plus dilaté. De plus, on constate que la quasi-bande β se comporte dans la variation des gaps d'appariement de la même façon que la bande fondamentale

* La figure VI-2, en dehors du comportement du paramètre de masse $B_{\beta\beta}$ en fonction de l'appariement, nous a permis de constater que nos fonctions d'onde individuelles étaient très proches de celles issues du calcul self-consistant CHF.

rotationnelle. En effet, alors que l'état 0^+ de cette bande est pratiquement invariant, les autres états de cette bande montrent des variations d'autant plus importantes que leur spin est élevé (traduisant ainsi une structure en $I(I+1)$ qui n'apparaît pas sur la quasi-bande γ , par exemple l'état 3^+ est moins affecté que l'état 2^+). Ce comportement de la bande β conduit à un accord correct avec les résultats expérimentaux, cet accord étant plutôt moins bon sur la bande fondamentale qui montre encore, quant à elle, des moments d'inertie trop élevés.

Sur la figure VI-18 nous avons reporté les différences d'énergie $[E(I^+) - E(0^+_{(1,2)})]$ pour les états fondamentaux et de la quasi-bande β (jusqu'au 6^+) obtenues pour les deux jeux de valeurs de G ainsi que les valeurs expérimentales [VI-27,28,29] en fonction de $I(I+1)$. Pour la bande fondamentale nous retrouvons bien des moments d'inertie trop grands pour les deux valeurs de G (les états de la bande se comportant en $[\hbar^2/2\mathcal{I}] \times [I(I+1)]$). Toutefois, la similitude de comportement des courbes théoriques et expérimentale prouve que la structure quasi-rotationnelle est bien reproduite.

Nous avons reporté dans la table VI-3 les valeurs de β et γ moyens, les positions du maximum (ou des maxima) ainsi que les composantes en K (cf § V-b du chap. IV) (pour β et γ moyens) des premiers états de nos bandes pour les deux valeurs de l'appariement.

On peut voir sur cette table que les états de la bande fondamentale ont des déformations moyennes qui rejoignent la déformation des maxima des états de la bande β quand on monte en spin, et ce, pour les deux intensités d'appariement (par exemple l'état 8^+_1 possède une déformation moyenne $\bar{\beta} = 0.28$, $\gamma = 18^\circ$ à comparer avec le maximum de l'état 2^+_2 ($\bar{\beta} = 0.29$, $\gamma = 17^\circ$) pour la valeur initiale du gap d'appariement). Or, si nous revenons aux surfaces d'énergies et aux coupes à $\gamma = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ (fig VI-13, 14 et 16), nous voyons que dans la région prolata, il existe également un épaulement conduisant à un minimum local pour $\beta \cong 0.3$.

états	β_{moy}	γ_{moy}	β_{max}	γ_{max}	K
0_{fond}^+ (G)	0.187	24°	0.173	20°	0
0_{fond}^+ (G+5%)	0.192	26°	0.163	25°	0
2_{fond}^+ (G)	0.206	20°	0.188	18°	0(0.99) 2(0.07)
2_{fond}^+ (G+5%)	0.220	21°	0.193	19°	0(0.99) 2(0.11)
4_{fond}^+ (G)	0.225	18°	0.203	16°	0(0.99) 2(0.14)
4_{fond}^+ (G+5%)	0.251	19°	0.249	16°	0(0.98) 2(0.17)
0_{β}^+ (G)	0.224	21°	0.269 0.115	15°* 41°	0
0_{β}^+ (G+5%)	0.259	20°	0.282 0.112	16°* 41°	0
2_{β}^+ (G)	0.261	19°	0.290 0.152	17°* 24°	
2_{β}^+ (G+5%)	0.282	20°	0.300 0.162	18°* 21°	0(0.77) 2(0.63)
2_{γ}^+ (G)	0.220	32°	0.148	39°	2(0.99) 0(0.07)
2_{γ}^+ (G+5%)	0.240	29°	0.152	40°	2(0.99) 0(0.05)

4(0.1)

Table VI-3

Déformations moyennes des états de ^{110}Cd pour les G et G+5%. Position du maximum ou des maxima (une étoile indique le plus élevé), et composantes en K ($\beta_{\text{moy}}, \gamma_{\text{moy}}$).

Au vu du comportement des états de la bande fondamentale et de la quasi-bande β précédemment étudié, il semblerait que la structure des états de cette dernière bande soit à relier à cette région prolata des surfaces d'énergies. (Voir par exemple les valeurs des $\bar{\gamma}$).

De plus, nous retrouvons la trop grande déformation (liée à des paramètres d'inertie trop élevés) des états. Expérimentalement le 2_1^+ a un β compris entre 0.1725 et 0.175 [VI-20] quand nous obtenons $\bar{\beta} \cong 0.206$ et 0.220 suivant les valeurs des constantes d'appariement retenues.

Par ailleurs, sur les figures VI-19a et VI-19b sont données les probabilités d'occupation des premiers états des différentes bandes (correspondant respectivement aux calculs avec G et G+5%). Nous retrouvons l'effet centrifuge important mis en évidence fig. VI-20 des états de la bande fondamentale (comme dans le cas de ^{76}Se) : à mesure que l'on monte en spin, le γ moyen diminue quand le β lui augmente, et, partant de 0_1^+ étendus et plutôt triaxial au maximum, nous arrivons progressivement à des états légèrement plus localisés du côté prolate (cet effet se retrouve par ailleurs dans les calculs à G+5%). Ceci confirme la remarque faite à propos des états théoriques du triplet (0_β^+ , 2_γ^+ , 4_1^+). Quant à la localisation des états, on peut voir table VI-3 que le fondamental est situé à $\beta = 0,187$ (resp. $\beta = 0,192$ pour G+5%) et est décalé vers de plus grands β par rapport au minimum statique $\beta = 0.16$. Inversement, le 0_β^+ a une élévation moyenne $\beta = 0.224$ (resp. 0.259) donc situé à de plus petites déformations que l'épaulement prolate ($\beta \approx 0.3$).

La structure des paramètres de masse (cf fig VI-15) semble par conséquent importante. Sur les figures VI-21 et VI-22 sont représentées les cartes associées à ces différentes quantités. Nous retrouvons le fait que les moments d'inertie ne présentent que peu de fluctuations à l'inverse du paramètre de masse $B_{\beta\beta}$. Pour les intensités de champ d'appariement considérées, ce dernier présente (en dehors de la région de $\beta \geq 0.4$ pour laquelle l'énergie potentielle est trop élevée pour que les structures interviennent) deux pics d'intensité peu élevée par rapport à la moyenne mais situés à $\beta = 0.27$, $\gamma \cong 20^\circ$, $\beta = 0.21$, $\gamma \cong 60^\circ$. Or, dans cette dernière région, la surface d'énergie potentielle présente une bosse qui amoindrit l'effet du paramètre de masse sur la localisation des états. Par conséquent le décalage en β des états semble n'être dû qu'au pic situé à $\beta = 0.27$, $\gamma \cong 20^\circ$, soit vers de plus grands β pour le minimum statique et vers de

moins grands β pour l'épaulement prolate.

Pour déterminer les paramètres d'inertie dans tout le plan (β, γ) , nous avons effectué un lissage à partir des 56 points calculés. Nous présentons pour $B_{\beta\beta}$, les coupes à $\gamma \cong 0^\circ, 30^\circ$ et 60° en résultant (fig VI-23). Si pour certaines structures à forte intensité nous n'avons que trois points calculés, il ne faut cependant pas oublier que le lissage est effectué simultanément dans les deux directions β, γ . Par conséquent, ces coupes indiquent clairement la validité numérique du lissage. D'autre part, pour les valeurs G des éléments de matrice du champ d'appariement nous avons effectué un lissage identique permettant d'obtenir les cartes des gaps d'appariement dans le plan (β, γ) (fig VI-24). Comme nous l'avons précédemment remarqué, des fluctuations violentes du champ d'appariement peuvent conduire à des instabilités numériques pour le calcul des paramètres de masse. Mais, le pic de masse apparemment important pour nos résultats n'est en coïncidence avec aucune transition de phase superfluide-normale, alors que la structure de $B_{\beta\beta}$ dans la région prolate à plus grande déformation est effectivement située au voisinage d'une telle transition en neutrons comme nous l'avons indiqué au début de ce chapitre.

e) Noyau de ^{186}Pt :

Une transition de forme prolate - oblate a été observée dans la région des isotopes de Platine très déficients en neutrons. Les énergies des états excités présentent des variations importantes entre ^{188}Pt et ^{186}Pt , tout d'abord observées pour les états 0^+ et 4^+ [VI-31,32] puis généralisées aux 2_3^+ , 6_1^+ et 8_1^+ [VI-33]. Concurrément, les mesures des moments quadrupolaires [VI-33] des noyaux impairs de cette région ont permis de situer une transition depuis une forme allongée ou triaxiale vers une forme aplatie entre les isotopes $^{185-187}\text{Pt}$ (quand on fait croître le nombre de neutrons). L'existence de deux formes oblate et prolate est également indiquée par: les variations des rayons de charge entre différents isotopes [VI-33]; les résultats sur les isotopes impairs [VI-34].; le spectre de basse énergie de ^{186}Pt [VI-35]. Le noyau ^{186}Pt semble donc être au coeur d'une région transitionnelle.

Cette région apparaît comme un test exigeant des théories qui jusqu'à présent se sont avérées incapables de reproduire correctement dans l'ensemble les données qui suivent : l'énergie du niveau 0_2^+ qui atteint un minimum pour ^{186}Pt ; l'énergie du niveau collectif 2_3^+ lequel semble appartenir avec le 0_2^+ à une quasi-bande [VI-36] ; les positions relatives des états 2_3^+ , 2_2^+ très proches ; l'inversion des positions des états 2_2^+ et 4_1^+ entre les isotopes $^{188-186}\text{Pt}$. A tous ces états sont associés dans le spectre des rapports de branchement dont les valeurs traduisent une déformation plus importante du ^{186}Pt comparativement aux autres isotopes de cette région transitionnelle [VI-36]. On note d'autre part pour cet isotope des mélanges de la bande fondamentale à la quasi-bande γ [VI-36]. Selon la relation due à Kumar [VI-37] * :

$$E(2_{\gamma}^+) - E(4_1^+) = \frac{1}{2} V_{po} \quad (\text{VI-1})$$

* Cette relation étant en accord avec la règle de Jean-Wilets qui est que les états 2_{γ}^+ et 4_1^+ sont dégénérés dans un potentiel indépendant de γ [VI-38]. l'énergie de l'état 2^+ pourrait être

reliée à la mollesse en γ et corrélée à la différence d'énergie des minima oblate et prolata (notée V_{po}). Le spectre à basse énergie est donc très fortement lié au comportement en fonction de la déformation (et plus précisément en γ) de l'énergie de déformation comme des paramètres de masse. De plus le couplage de la bande γ à la bande fondamentale est lié à l'annulation du terme V_{po} (ou plus généralement à un mouvement collectif indépendant de γ) [VI-37]. Nous pouvons donc nous attendre une grande mollesse en γ dans le potentiel et à la fois à une grande dépendance de la partie dynamique vis à vis de la déformation.

De nombreux calculs théoriques ont été effectués pour la partie statique et ont tous mené à une surface d'énergie potentielle présentant une large vallée dans la direction γ [VI-40,41] avec un minimum absolu prolata, et un second minimum oblate (par exemple dans les calculs HF+BCS axiaux de la référence [VI-39]). Aux caractères prolata et oblate des minima peut être reliée la structure du spectre d'états individuels.

En effet, du côté prolata, le nombre de neutrons est semi-magique [VI-39,40,41] et, du côté oblate, on a en neutrons un effet de couches négatif [VI-40].

La surface d'énergie potentielle (fig. VI-25) résultant de nos calculs ressemble à ce qui avait déjà été obtenu : présence d'une vallée en γ , et de deux minima (prolata et oblate). Mais nous plaçons le minimum absolu du côté oblate (avec une $V_{po} \cong -560$ keV).

Le spectre correspondant à ce calcul est présenté fig. VI-26. Comme on peut le voir sur cette figure, nous reproduisons à moins de 100 keV les énergies des têtes de bande (et donc celle du 0_{β}^{+}). Si nous obtenons également cet accord pour le 2_{fond}^{+} , les énergies des autres états sont surestimées. Pour ce noyau, nous avons également effectué un calcul supplémentaire à paramètre constant [VI-42]. C'est-à-dire que les paramètres d'inertie ont été déterminés dans tout le plan (β, γ) , par interpolation et en respectant les symétries [VI-43], à partir du seul paramètre de masse $B_{\beta\beta}$ axial. Dans ce calcul, la structure inhérente à la triaxialité est donc éliminée.

On voit sur le spectre ainsi obtenu (fig. VI-27) que les têtes de bande β et γ sont très sensibles à la structure des paramètres de masse dans la zone triaxiale. Nous obtenons à présent un état 2_2^+ placé au dessus du 4^+ de la bande fondamentale quand la V_{po} est négative, ce qui est contraire à la règle de Kumar. Ce dernier point prouve l'importance des paramètres de masse, c'est-à-dire que la qualité du spectre dépend moins du potentiel que des paramètres d'inertie.

De plus le 0_β^+ , attendu à très basse énergie dans ce platine, que nous placions bien précédemment, est placé à présent bien trop haut.

Nous pouvons également remarquer que les énergies des états de la bande fondamentale ne sont pas modifiées par la perte d'information triaxiale dans les paramètres de masse. Ceci se comprend au vu des moments d'inertie (fig. VI-28) que nous trouvons une fois de plus peu fluctuants, contrairement aux paramètres de masse.

Outre le fait de fournir une réponse à la question "quoi du potentiel ou des paramètres de masse" joue le rôle le plus important, ce dernier résultat montre, d'une part, l'importance des fluctuations des paramètres de masse et, d'autre part, celle de tenir compte de la triaxialité.

Comme nous obtenons un spectre théorique trop dilaté (cf. fig. VI-25), nous avons effectué de nouveaux calculs (avec des paramètres d'inertie calculés sans l'hypothèse de paramètre de masse constant) avec des intensités de champ d'appariement inférieures aux constantes usuelles (données table VI-1). Sur la figure VI-29a est présenté le paramètre axial $B_{\beta\beta}$ obtenu avec les constantes de champ d'appariement usuelles (notée G) diminuées de 5% et de 10%. Comme attendu, l'amplitude des fluctuations des paramètres de masse croît quand nous diminuons G. De plus, on peut remarquer qu'il n'y a pas apparition de structure nouvelle. Quant aux surfaces d'énergie potentielle -alors que dans ^{110}Cd elles n'évoluaient presque pas en fonction de l'appariement- la grande mollesse en γ conduit à une instabilité prolate-triaxial-oblate du minimum d'énergie vis-à-vis de l'appariement (cf. fig. VI-29b). La variation de 10% des constantes d'appariement conduit

à un minimum plutôt triaxial et du côté prolata. Pour des valeurs de G diminuées de 5%, le minimum reste oblate.

Les spectres issus de ces différents calculs sont présentés fig. VI-30. Pour la bande fondamentale, comme attendu, la diminution des intensités du champ d'appariement conduit à des états plus resserrés (abaissement global des énergies de ces états). Mais les états des bandes de vibration β et γ ne suivent pas cette loi: pour les deux surfaces d'énergie potentielle (à minimum oblate) calculées avec les constantes d'appariement G et $G-5\%$, l'énergie du 0_{β}^{+} est proportionnelle à Δ^2 (la diminution de l'appariement abaisse l'énergie). Pour le calcul à $G-10\%$, en revanche, où le minimum est triaxial (du côté prolata) cet état est placé de façon surprenante au dessus de ceux obtenus avec des constantes d'appariement plus faibles. Ceci se retrouve d'ailleurs sur le 2_{β}^{+} et sur tous les états de la bande γ .

Or, dans le calcul à $G-10\%$, nous avons une différence V_{po} nulle ce qui peut conduire [VI-37] à un couplage des bandes β et γ et, à plus haute énergie à un couplage de ces bandes à la bande fondamentale. Le couplage de la bande β à la bande fondamentale peut être à l'origine du comportement "normal" de l'énergie 4_{β}^{+} vis-à-vis de la diminution de l'appariement.

Si dans le calcul à $G-10\%$ nous reproduisons bien les énergies des états des bandes vibrationnelles β , γ , nous commettons d'importantes erreurs en énergie sur la bande fondamentale. De plus, c'est dans le calcul à $G-5\%$ que nous obtenons les énergies des 0_{β}^{+} et 2_{γ}^{+} les plus basses.

Compte tenu du comportement des paramètres de masse et du potentiel vis-à-vis de l'appariement, nous avons tenté de déterminer les valeurs optimales de l'intensité du champ d'appariement par la méthode du χ^2 appliquée à la dispersion en énergie des trois premiers états de chaque bande. Nous avons ainsi obtenu le spectre de la fig VI-31 associé aux valeurs $G-3\%$ des constantes d'appariement qui présente pour ces états des écarts en énergie par rapport à l'expérience au plus de 200 KeV. Ces valeurs d'appariement sont associées à un minimum oblate du potentiel mais, comme dans le calcul effectué avec les valeurs $G-5\%$, la différence V_{po} est significativement nulle.

Sur la figure VI-32, nous présentons les densités de probabilité de présence de l'état 0^+ de la bande fondamentale pour les constantes d'appariement G, G-5% et G-10%. Dans les calculs à G, G-5% (comme G-3%) qui mènent à des surfaces d'énergie potentielle dont le minimum est oblate, les états fondamentaux 0^+ sont très peu localisés (grande extension en γ).

De plus, on assiste à un déplacement du maximum vers les déformations prolates au fur et à mesure que l'on diminue l'appariement. Mais quelles que soient les intensités du champ d'appariement, les états de la bande fondamentale se localisent du côté prolates au fur et à mesure que l'on monte en spin (ceci se produisant d'autant plus rapidement que V_{po} est faible). C'est ce qui est présenté sur la figure VI-33 où on assiste à un déplacement et à un resserrement des distributions, l'état 4_1^+ est déjà prolates. Pour les bandes vibrationnelles, la mollesse dans la direction γ s'accompagne d'un balancement prolates-triaxial-oblate des états.

Ceci se retrouve dans la table suivante (table VI-4) où sont données les valeurs moyennes des paramètres de déformation, les valeurs au maximum ainsi que les composantes en K pour les premiers états de chaque bande calculés avec les intensités de champ d'appariement G-3% (donnant le meilleur accord en énergie avec le spectre expérimental).

états	β_{moy}	γ_{moy}	β_{max}	γ_{max}	K
0^+_{fond}	0.203	30°	0.160	36°	0
2^+_{fond}	0.214	25°	0.210	22°	0(0.97) 2(0.22)
4^+_{fond}	0.233	20°	0.220	17°	0(-.99) 2(0.14)
0^+_{β}	0.220	25°	0.230 0.130	16°* 48°	0
2^+_{β}	0.221	27°	0.160 0.240	34°* 18°	2(0.92) 0(-.37)
2^+_{γ}	0.210	33°	0.150 0.230	43°* 18°	2(0.99) 0(0.01)
3^+_{γ}	0.226	29°	0.190	30°	2

Table VI-4: Déformations moyennes des états de ^{186}Pt à G-3%..

Position du maximum (des maxima) et composantes en K ($\beta_{\text{moy}}, \gamma_{\text{moy}}$).

Nous pouvons de plus remarquer la coïncidence des maxima des deux bandes vibrationnelles, lesquels correspondent d'ailleurs aux déformations moyennes des états 0_1^+ et 4_1^+ de la bande fondamentale ($0.13 \leq \beta_1 \leq 0.16$ et $0.22 \leq \beta_2 \leq 0.24$) et traduit le couplage de ces bandes. Par ailleurs, comme nous pouvons le voir sur les coupes du potentiel (fig VI-29), la position du minimum oblate ($\beta \leq 0.2$) est différente de celle du minimum prolatae ($\beta \cong 0.25$). Si nous trouvons dans l'énergie potentielle la raison d'être des élongations moyennes pour les états, c'est à la fois à la mollesse dans la direction γ et à la structure des paramètres de masse que nous pouvons relier l'instabilité oblate-triaxiale-prolate. En effet, les paramètres de masse $B_{\beta\beta}$ présentent tous une zone de plus grandes valeurs à $\beta \cong 0.2$ quel que soit γ et dont le maximum est du côté prolatae (cf fig VI-32) ce qui brise l'indépendance vis à vis du degré de liberté triaxial.

Enfin, notons que les résultats expérimentaux concernant cet isotope de Platine ont permis [VI-35] de déterminer un paramètre de déformation β (associé à l'état 2_1^+) de 0.2, très voisin de ce que nous obtenons dans ce calcul.

Cependant, les composantes en K qui sont données dans la table VI-4 sont associées aux $\bar{\beta}, \bar{\gamma}$. Nous avons dans ce noyau calculé les valeurs moyennes par rapport à β et γ (notées \bar{K}) des composantes en K de chaque état que nous donnons table VI-5 pour les quatre états 2_2^+ , 2_3^+ , 4_2^+ et 4_3^+ appartenant aux bandes β et γ .

\bar{K}	0	2	4
états			
2_2^+	0.35	0.65	0
2_3^+	0.6	0.4	0
4_2^+	0.29	0.41	0.3
4_3^+	0.02	0.7	0.28

Table VI-5

On voit dans cette table que les composantes \bar{K} de ces états sont très mélangées. Toutefois, l'état 4_3^+ semble plutôt appartenir à la bande γ (quand nous l'avons placé fig. VI-31, dans la bande β).

Sur la figure VI-35, nous avons représenté les densités de probabilité de présence des états des bandes ainsi obtenues.

Sur la bande fondamentale, on retrouve l'effet de localisation : d'un état 0^+ très étendu et plutôt oblate, on obtient un état 8_{fond}^+ très localisé et prolate. Mais, cette figure montre surtout une coexistence de forme : quand les états de la bande fondamentale deviennent prolate, les états de la bande β deviennent oblate. Partant d'un 0_{β}^+ dont le maximum est prolate, dès le 2^+ , le maximum est oblate et le second maximum s'estompe pour disparaître (6_2^+ et 8_2^+). Enfin, les états de la bande γ présentent dès le 4_3^+ un maximum plutôt triaxial.

IV) Conclusion :

Les fonctions d'onde individuelles déterminées par la méthode EVM (Expectation Value Method) s'avèrent être équivalentes à celles résultant de calculs Hartree-Fock sous contrainte utilisant la même interaction effective SIII. Ce résultat obtenu aux limites axiales pour ^{110}Cd par la comparaison des énergies totales et des paramètres d'inertie du cranking d'Inglis déterminés par les deux méthodes, se trouve confirmé par la comparaison des surfaces d'énergie potentielles pour le même isotope. La méthode EVM nous permet par conséquent d'obtenir, en des temps raisonnables et de façon cohérente, dans tout le plan (β, γ) les ingrédients nécessaires à la description en termes de modes quadrupolaires de la dynamique collective à basse énergie des noyaux pair-pairs.

Les noyaux appartenant à des régions transitionnelles présentent du point de vue statique une grande mollesse en γ qui impose de les décrire de façon dynamique. Ils sont par conséquent d'un grand intérêt pour notre approche puisqu'ils sont de bons tests autant de l'interaction effective utilisée et des approximations dans le traitement de l'appariement que des hypothèses concernant le traitement dynamique.

Le succès remarquable que nous rencontrons sans utiliser de paramètres ajustables dans la reproduction des données expérimentales de spectroscopie (récapitulés sur la figure VI-36) est le résultat principal de cette thèse.

Le traitement approché des corrélations d'appariement conduit à des pseudo-transitions de phase superfluide-normale et à d'importantes variations des gaps d'appariement entraînant des fluctuations dans les paramètres de masse. Cependant, ces fluctuations se révèlent être essentielles dans la reproduction des états (identifiés comme états collectifs) de basse énergie. Ce dernier point conduit à souligner l'importance de la connaissance des énergies potentielles comme des paramètres d'inertie pour les solutions triaxiales.

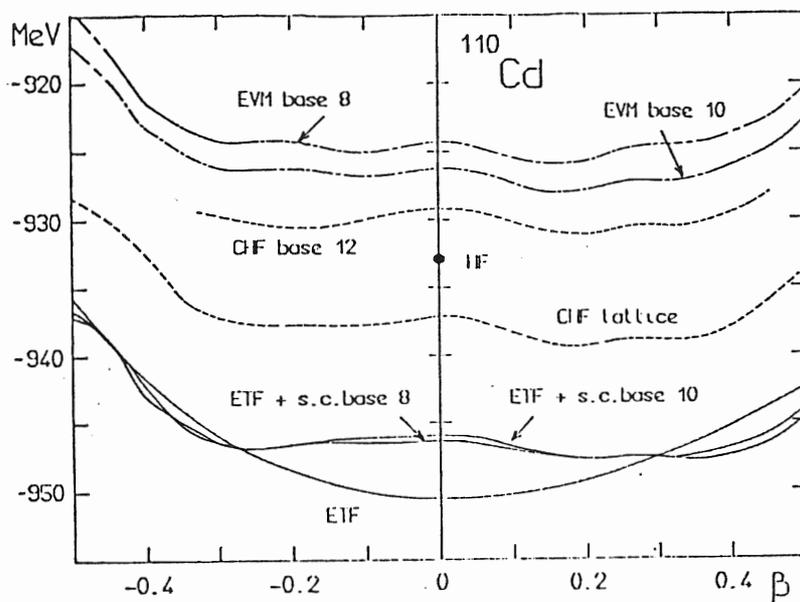


Fig VI-1a:

Courbes d'énergie potentielle pour les solutions axiales de ^{110}Cd obtenues par les approches EVM, CHF et ETF (cf texte).

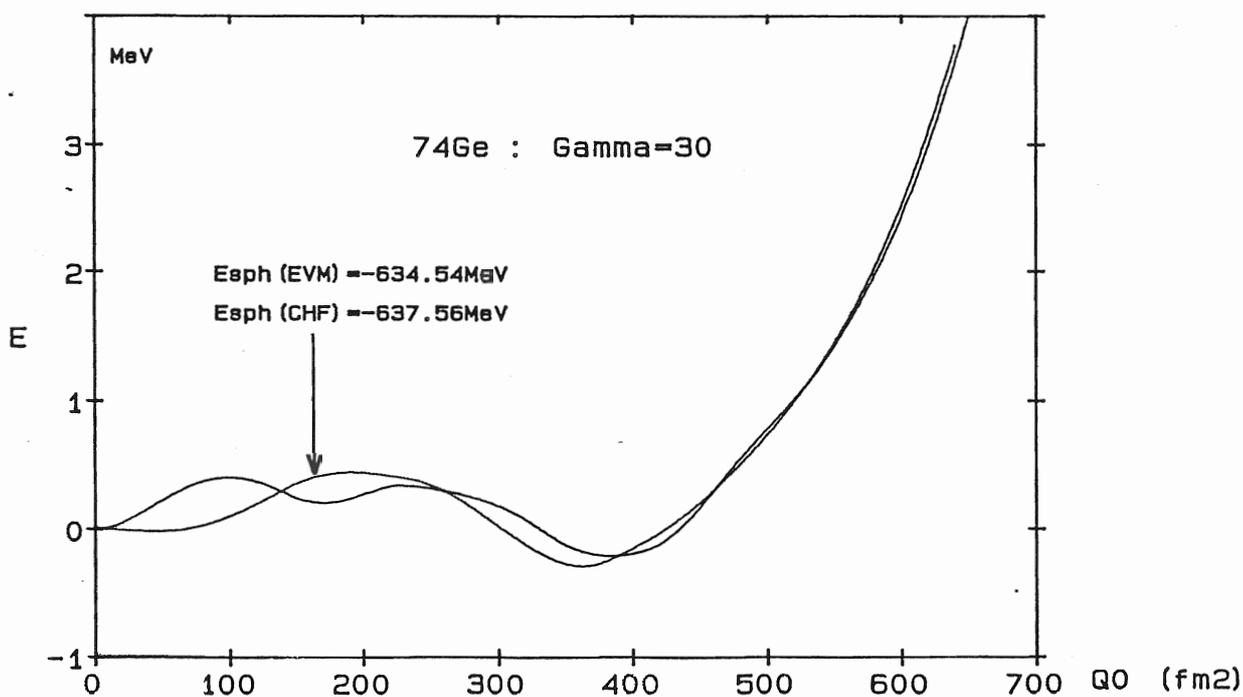


Fig VI-1b:

Courbes d'énergie potentielle pour les solutions axiales de ^{74}Ge obtenues par les approches EVM, CHF (cf texte).

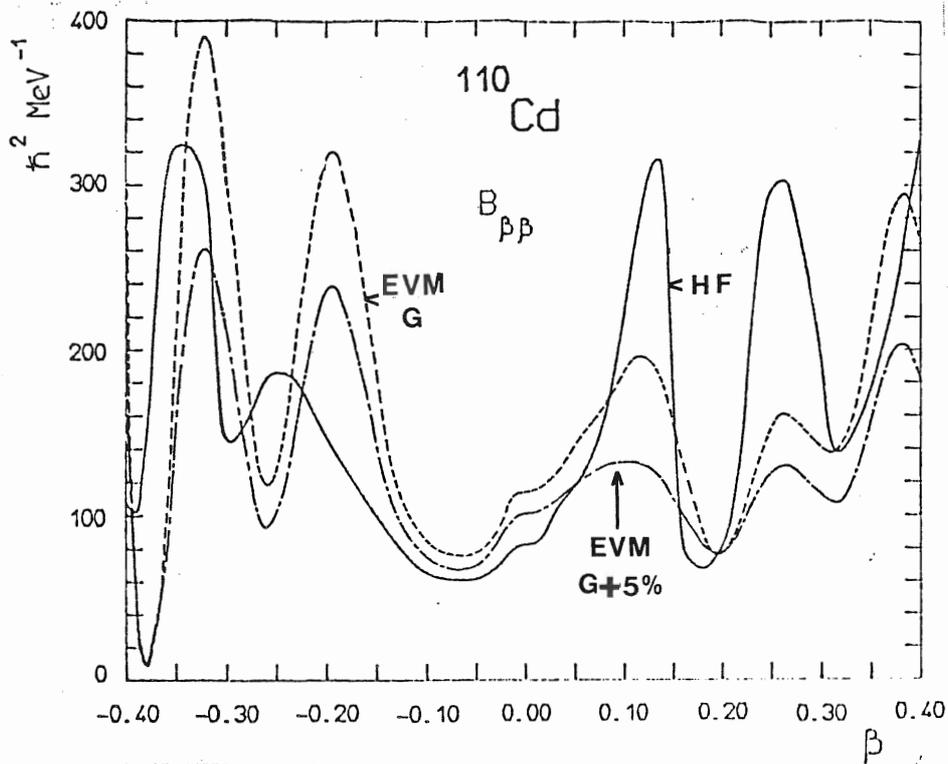


Fig VI-2:

Comparaison des paramètres de masse axiaux $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd (base 8) obtenus dans les approches EVM et CHF.

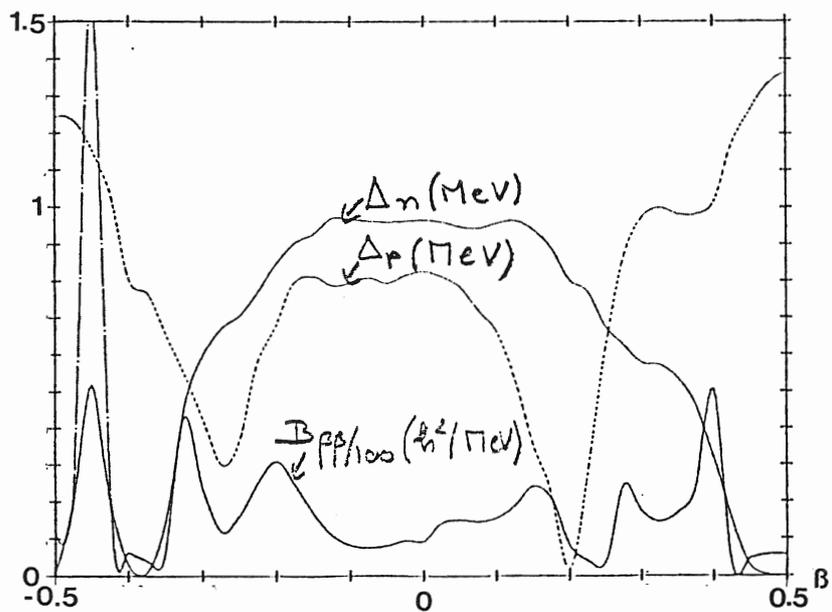


Fig VI-3:

Comportement du paramètre de masse axial $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd (base 8) en fonction des gaps d'appariement protons et neutrons.

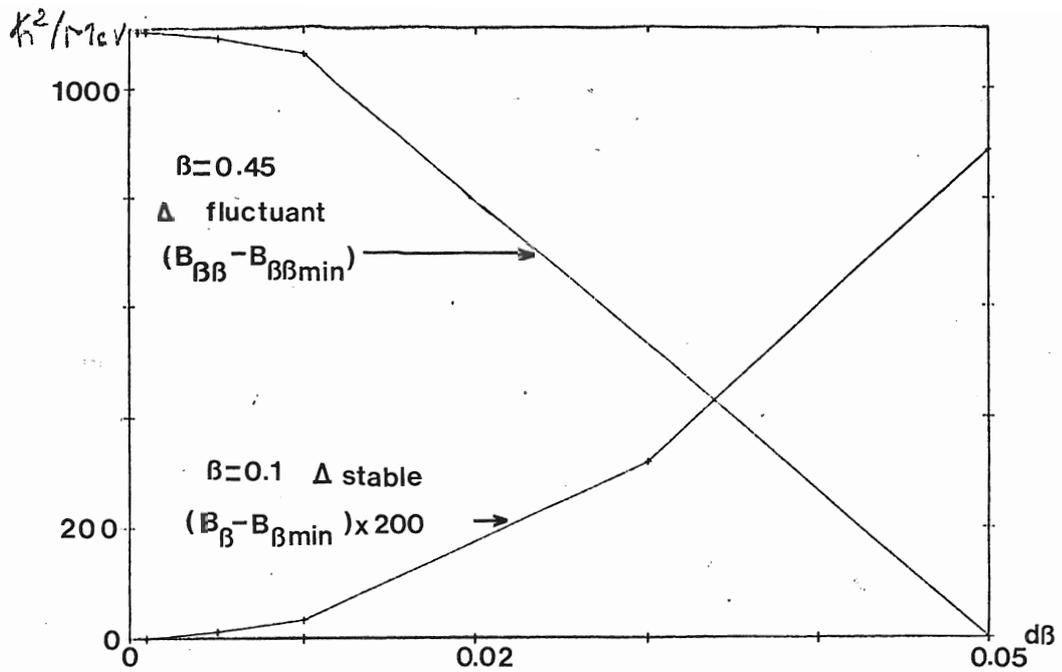


Fig VI-4:

Comportement du paramètre de masse axial $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd (à $\gamma=60^\circ$, base 8) en fonction du pas $\delta\beta$ dans les cas d'appariement stable et fluctuant. $B_{\beta\beta min}$ est la valeur minimale obtenue dans les deux cas.

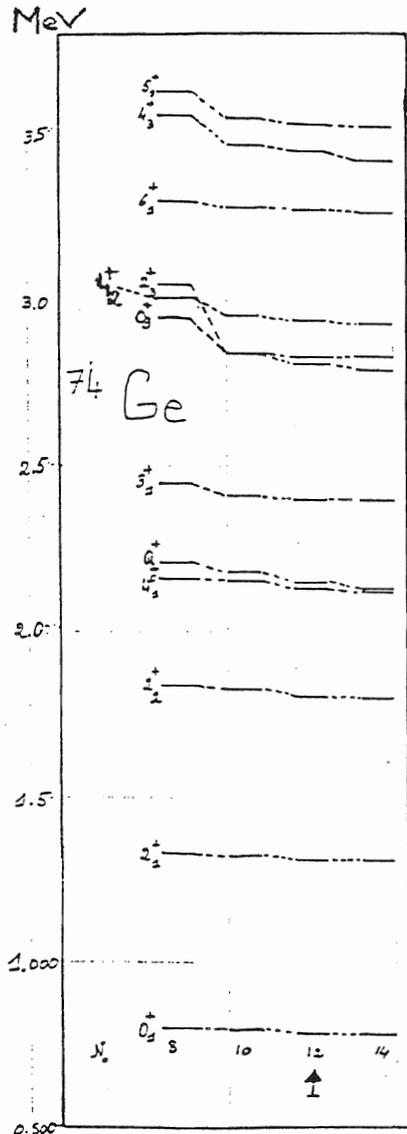


Fig VI-5: Stabilité des solutions du hamiltonien de Bohr en fonction de la taille de base dans ^{74}Ge . La valeur retenue ($N_0=12$) est indiquée par une flèche.

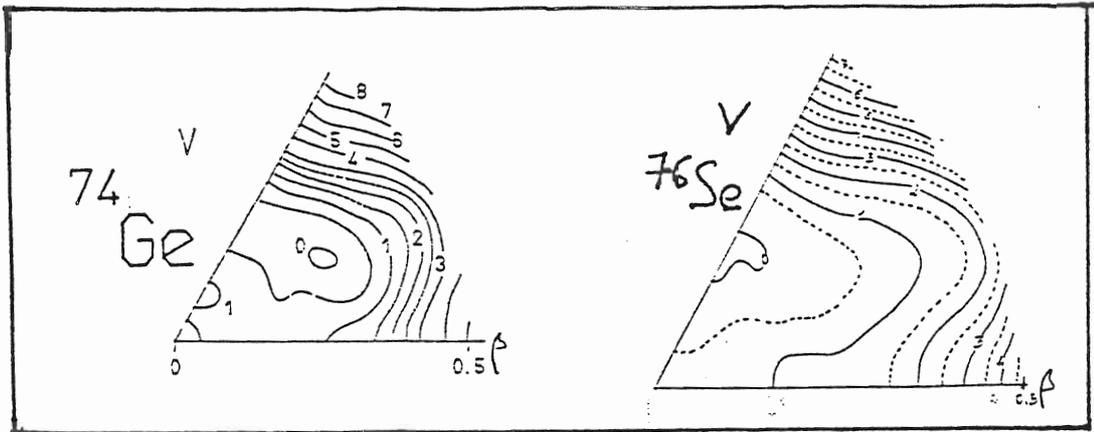


Fig VI-6:
Surfaces d'énergie potentielle EVM (base 8) pour ^{74}Ge et ^{76}Se .
(1 MeV par ligne continue, 0.5 MeV par ligne pointillée)

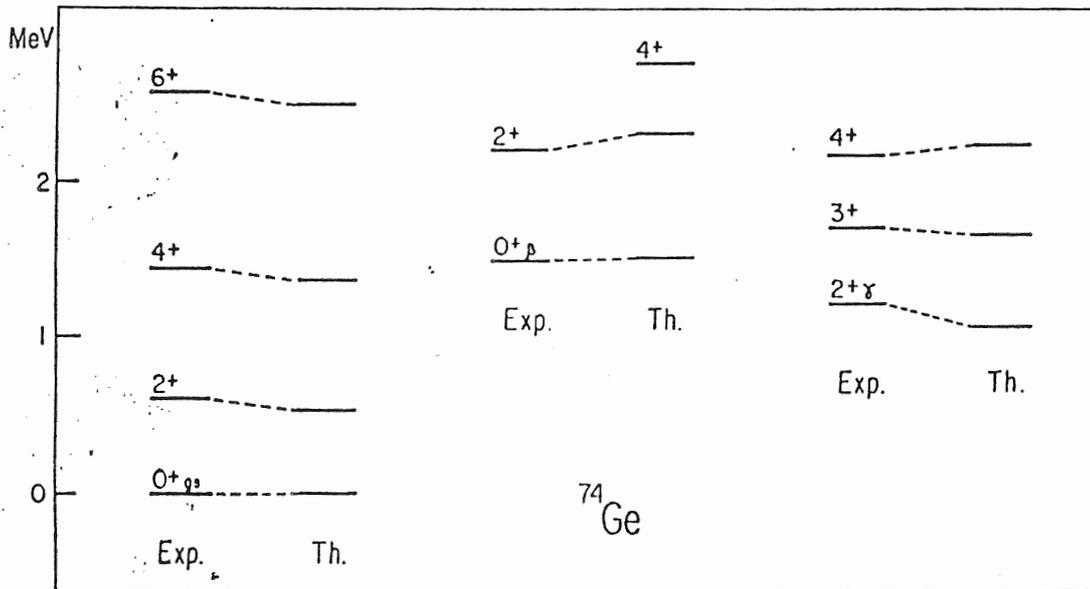


Fig VI-7:
Comparaison expérience (Exp)- Théorie (Th) pour les énergies des premiers niveaux (bande fondamentale notée G.S, bandes β et γ) de ^{74}Ge .

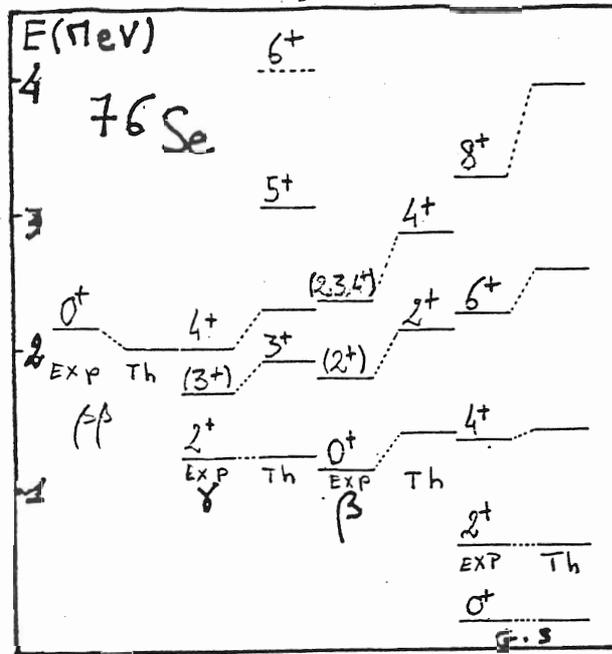


Fig VI-8:

Comparaison Exp-Th pour les énergies des premiers niveaux (bande $\beta\beta$, γ , β et fondamentale) de ^{76}Se .

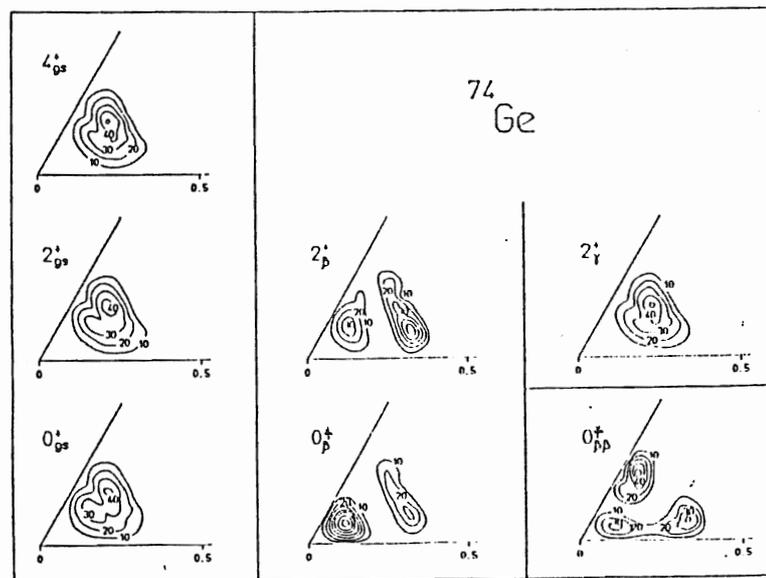


Fig VI-9:

Densité de probabilité de présence des premiers états de ^{74}Ge .

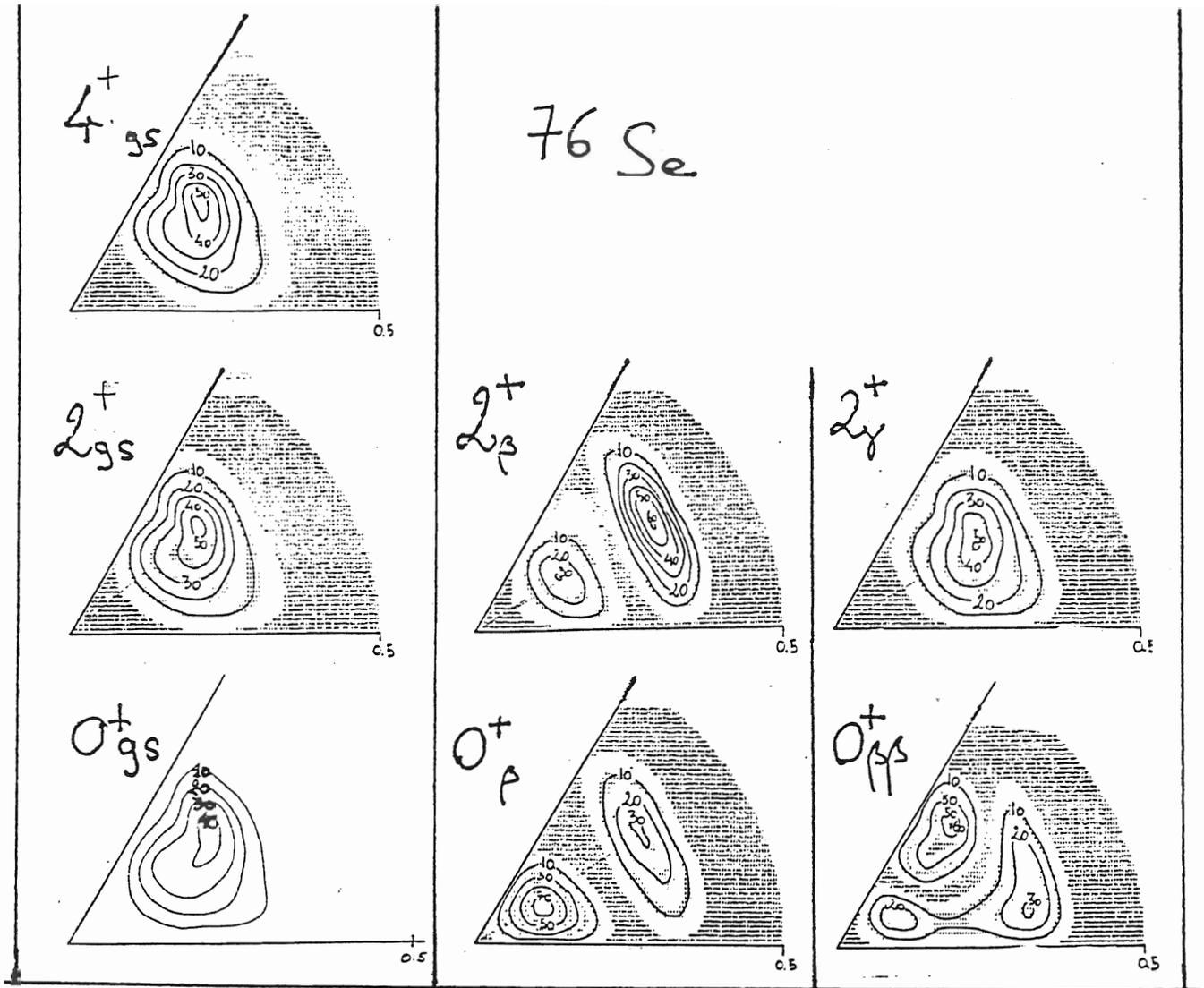


Fig VI-10: Densité de probabilité de présence des premiers états de 76 Se .

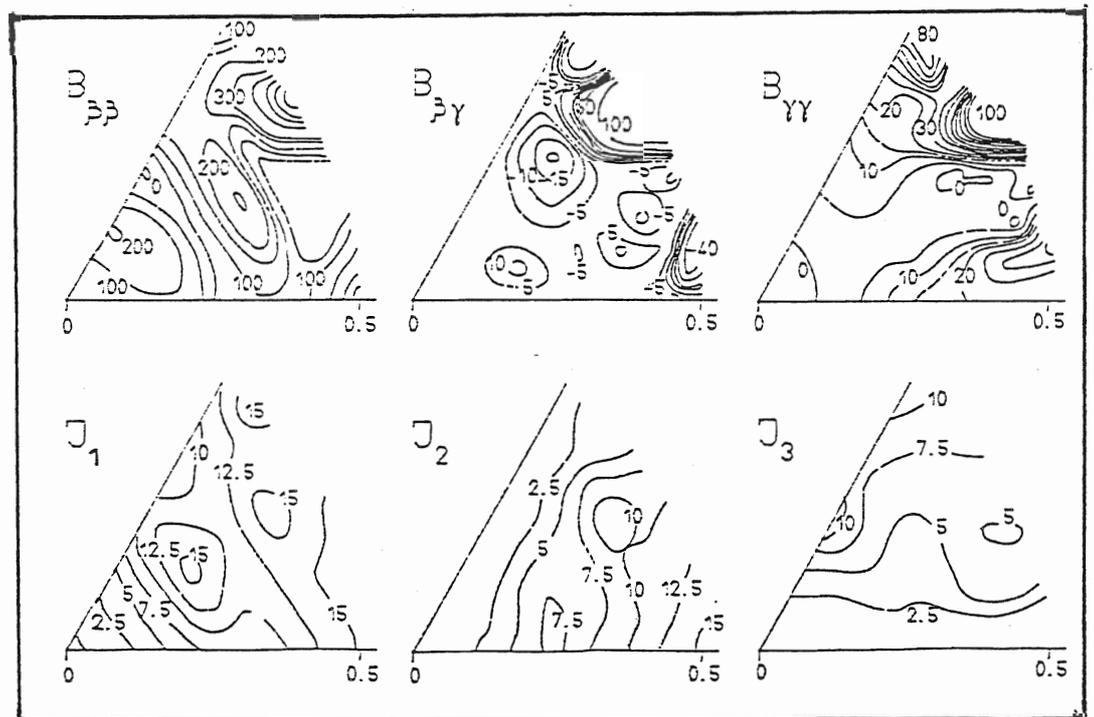


Fig VI-11: Paramètres d'inertie de 74 Ge .

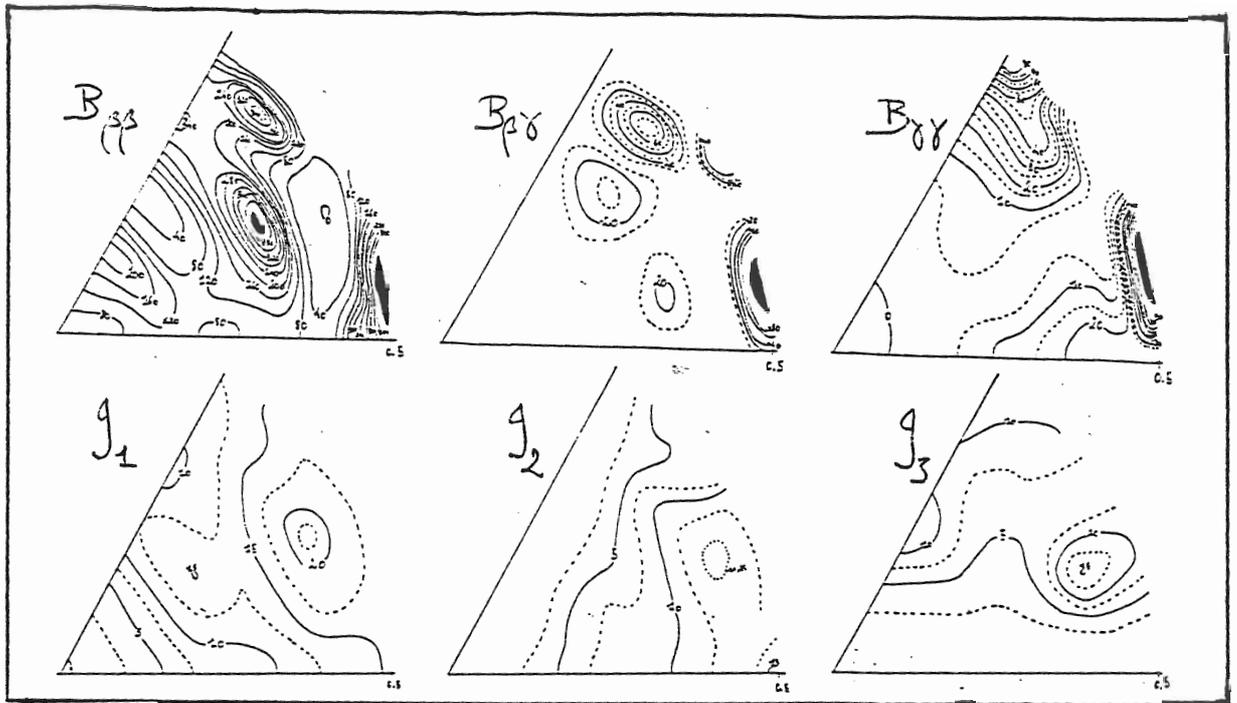


Fig VI-12: Paramètres d'inertie de ^{76}Se .

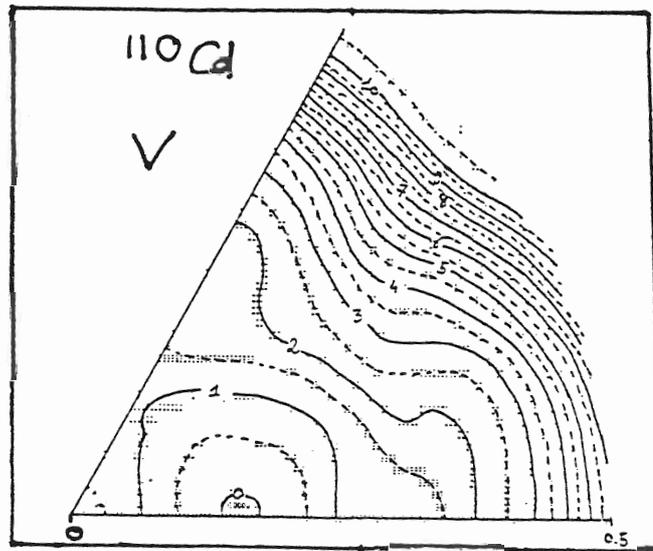


Fig VI-13:

Surface d'énergie potentielle de ^{110}Cd (1 MeV par ligne continue, 0.5 MeV par ligne pointillée) correspondant aux calculs EVM (base 8 et G usuels).

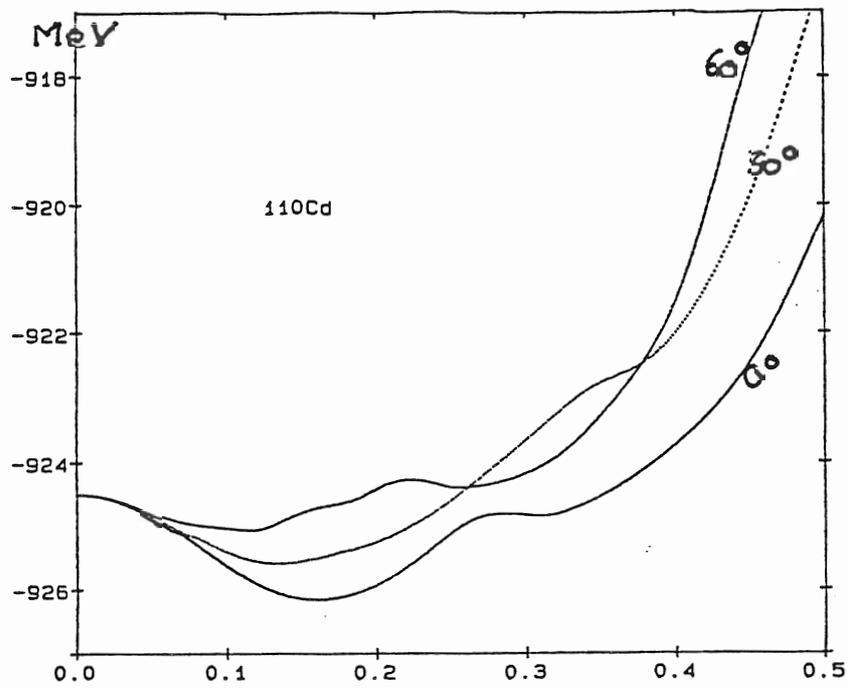


Fig VI-14:

Coupes de la surface d'énergie potentielle de ^{110}Cd à $\gamma=0, 30, 60^\circ$.

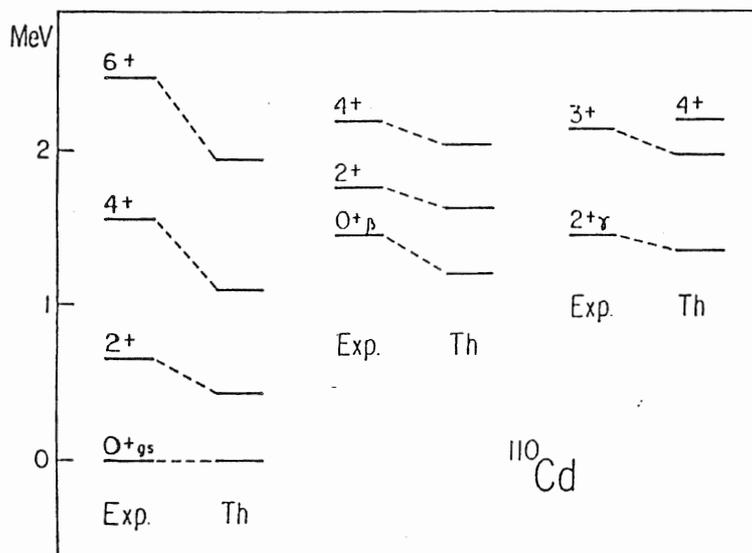


Fig VI-15:

Comparaison Exp-Th des énergies des premiers niveaux (bande fondamentale G.S, β et γ) de ^{110}Cd (calcul EVM base 8 et G usuels)

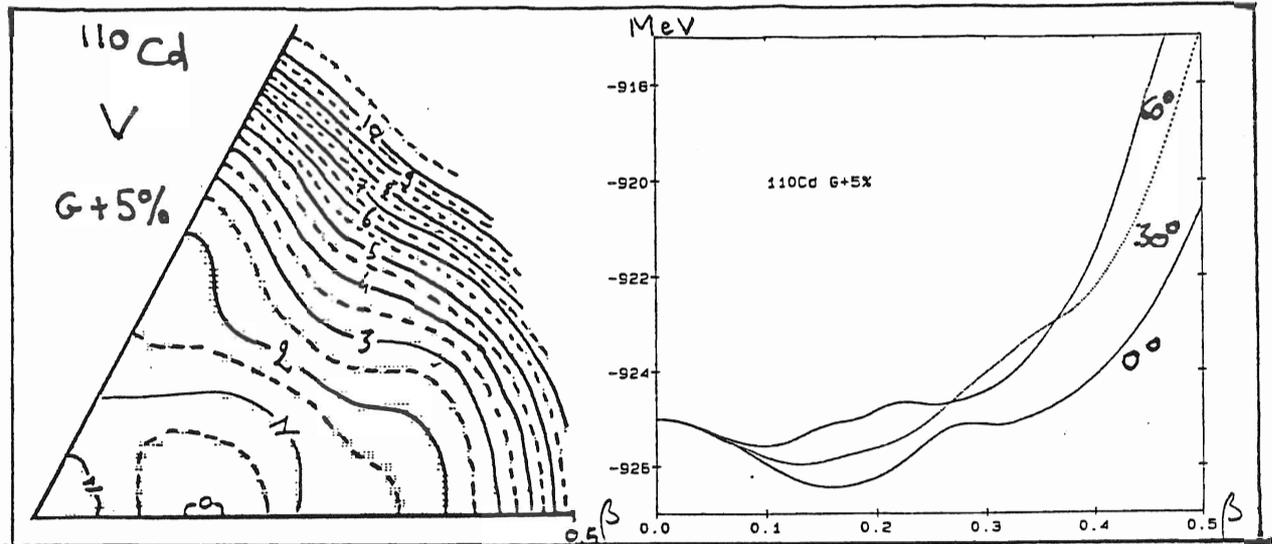


Fig VI-16:

^{110}Cd : Surface et coupes ($\gamma = 0, 30, 60^\circ$) d'énergie potentielle EVM à G+5% (base 8, 1 MeV entre lignes continues, 0.5 MeV entre pointillées et continues)

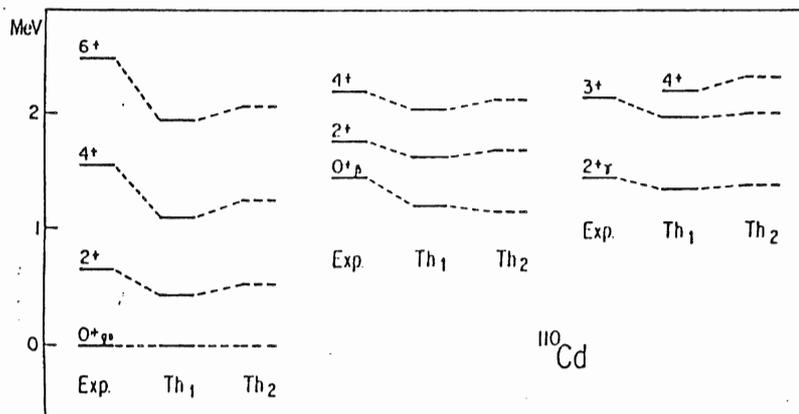


Fig VI-17:

Comparaison des spectres théoriques (à G:Th1 et G+5%:Th2) et expérimental de ^{110}Cd .

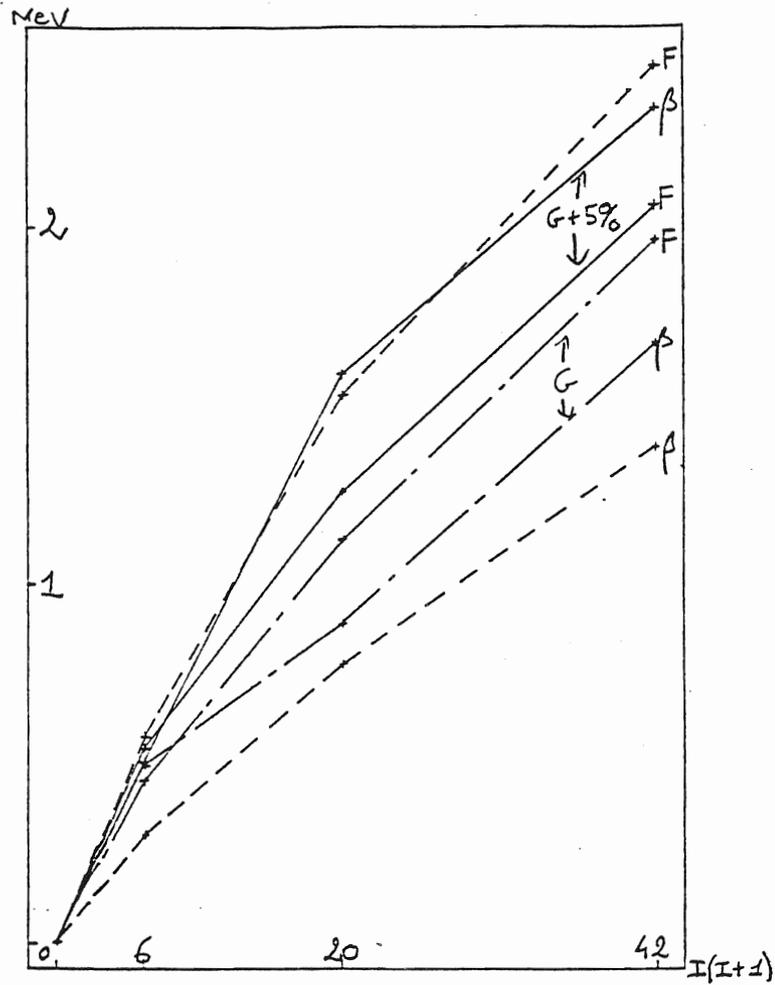


Fig VI-18: Comparaison des courbes $E(I) - E(0^+) = f[I(I+1)]$ associées aux premiers états ($I=0$ à 6) des bandes fondamentales (F) et β expérimentales (pointillés) et théoriques (à G en tiret-pointillés et G+5% en trait plein) dans le ^{110}Cd .

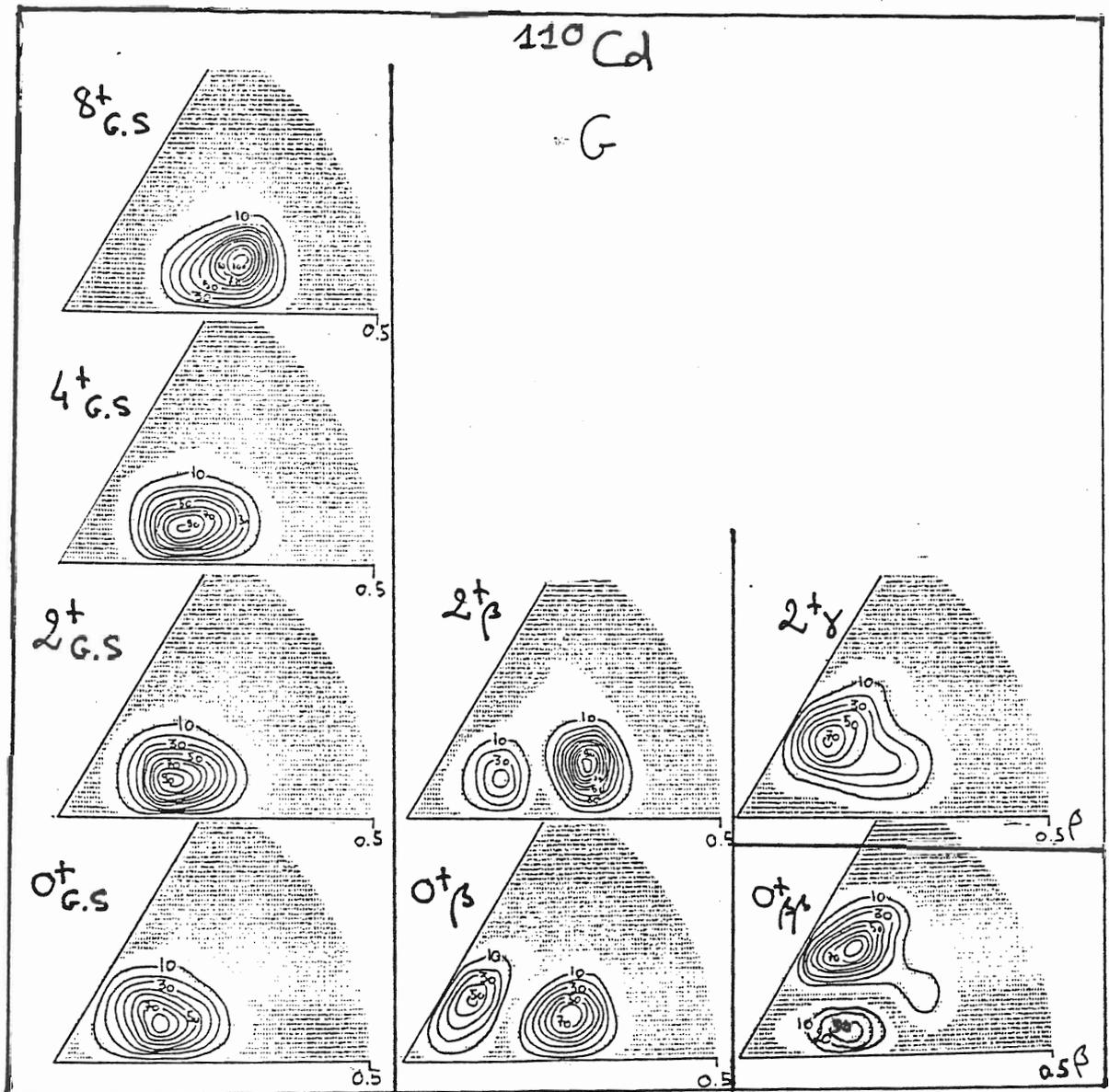


Fig VI-19a:

Densité de probabilité de présence des premiers états des bandes fondamentale (G.S), β , γ et $\beta\beta$ de ^{110}Cd (calcul EVM base 8, G usuels)

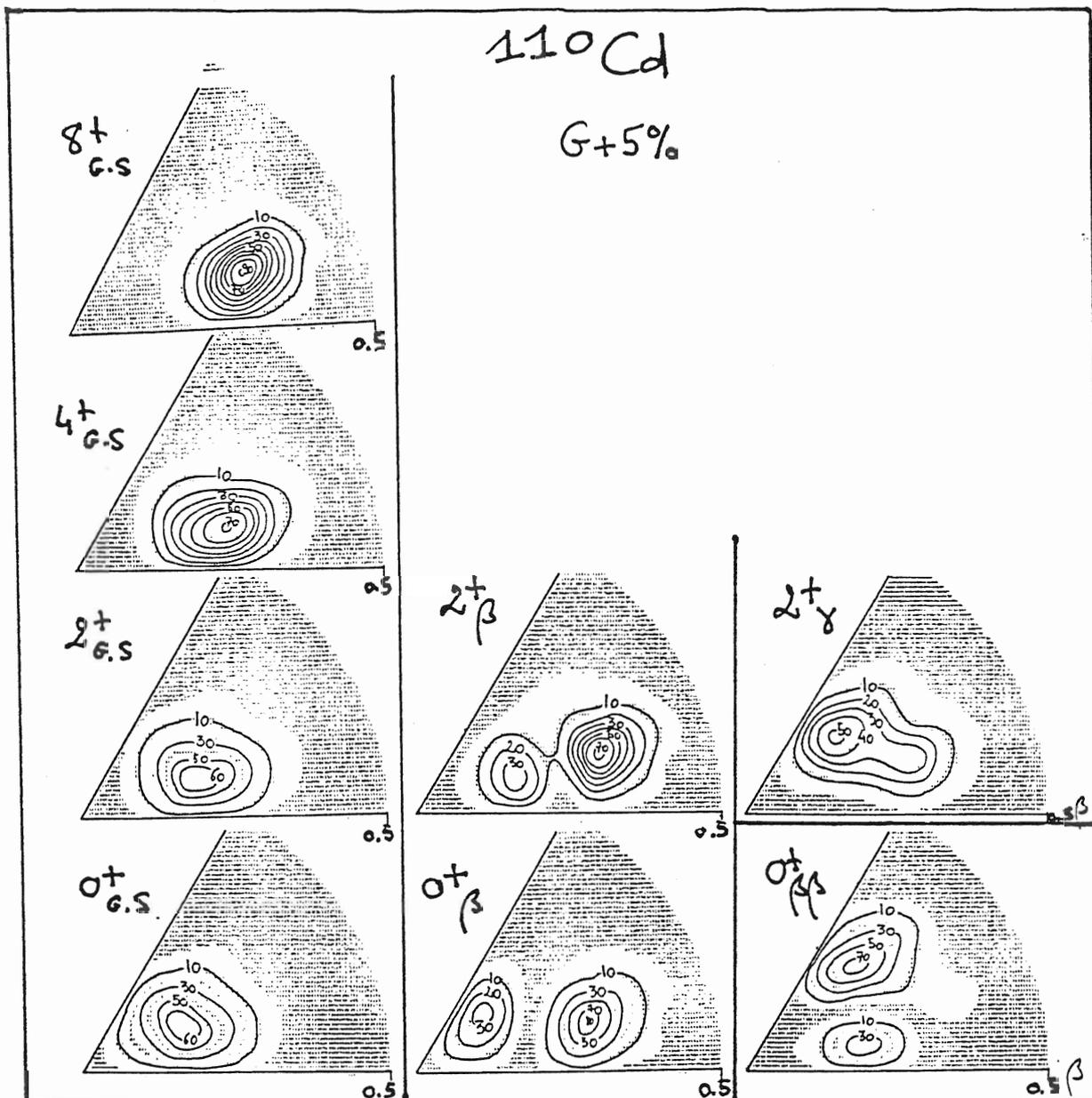


Fig VI-19b:

Densité de probabilité de présence des premiers états des bandes fondamentale (G.S), β , γ et $\beta\beta$ de ^{110}Cd (calcul EVM base 8, G+5%)

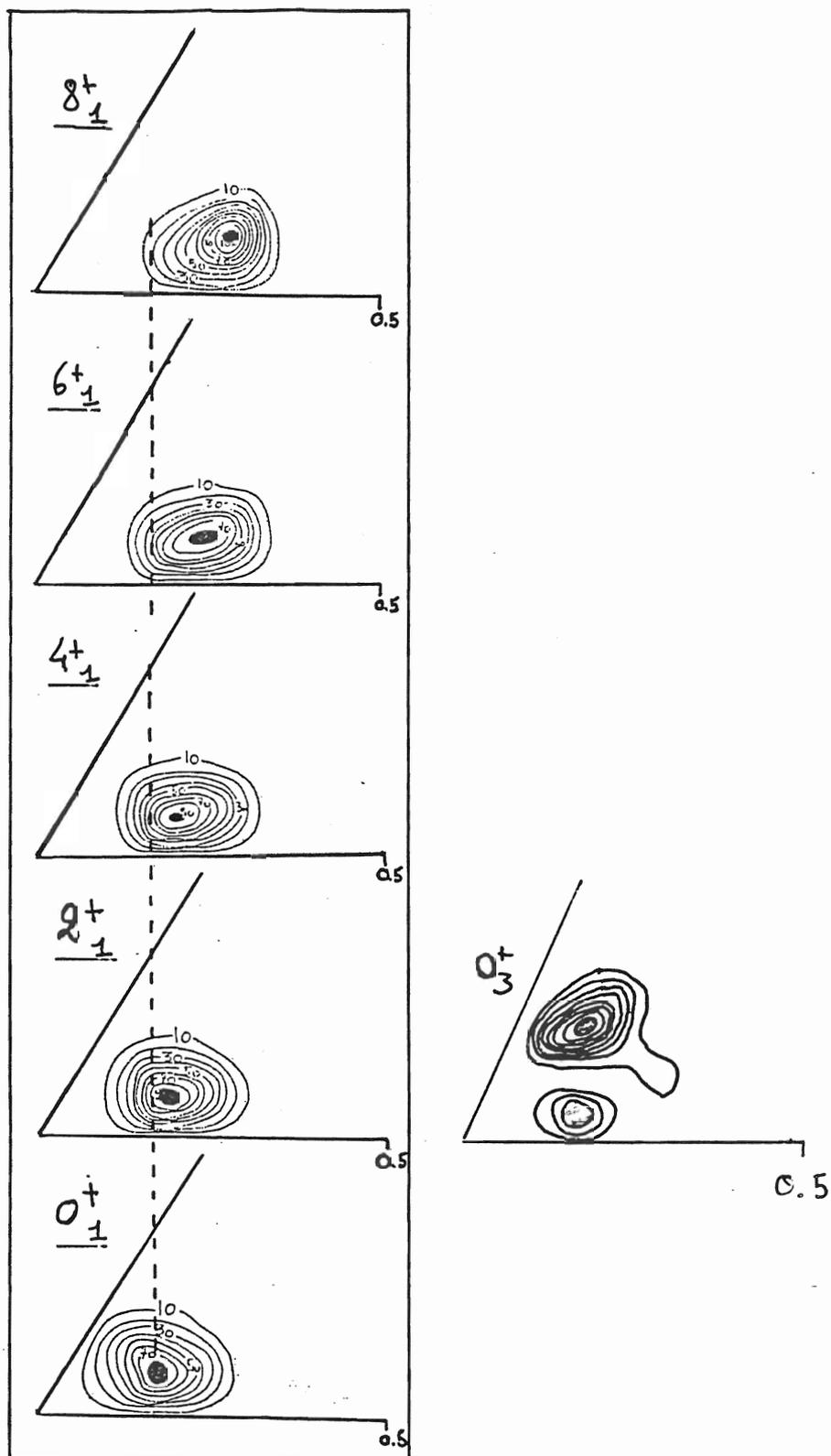


Fig VI-20:

Densité de probabilités de présence des premiers états de la bande fondamentale de ^{110}Cd (base 8, G usuels).

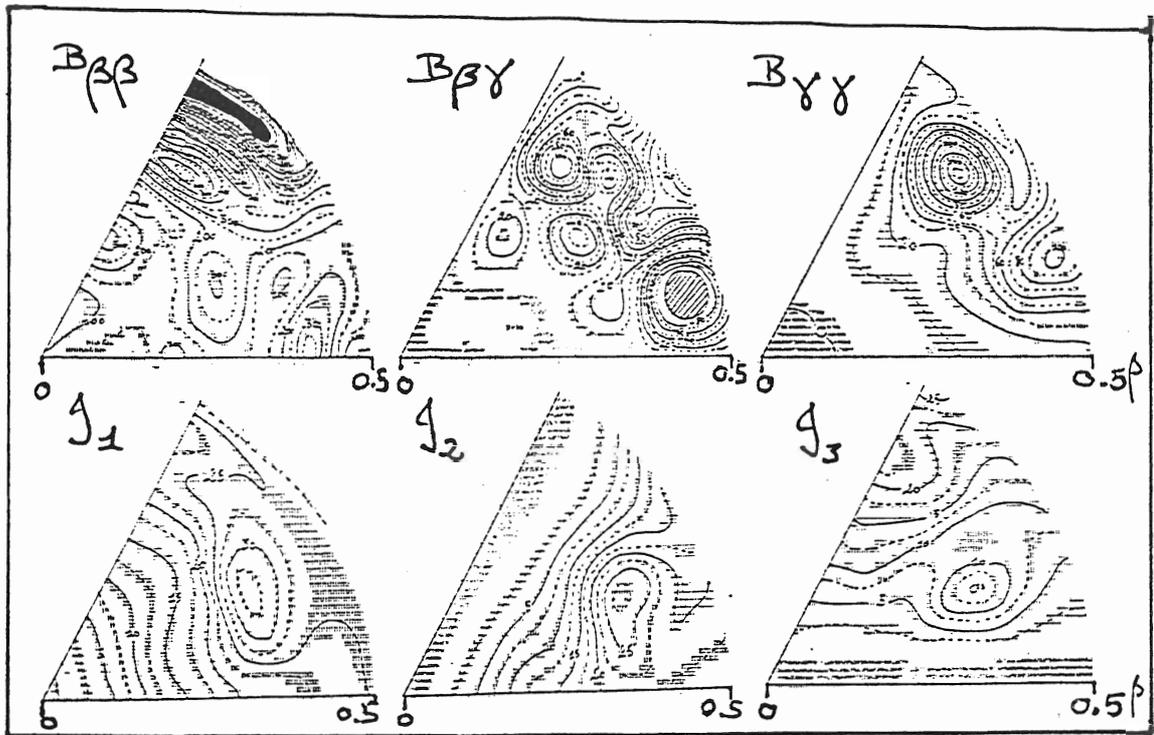


Fig VI-21:
 Paramètres d'inertie de ^{110}Cd (en \hbar^2/MeV) pour les valeurs usuelles des intensités d'appariement.

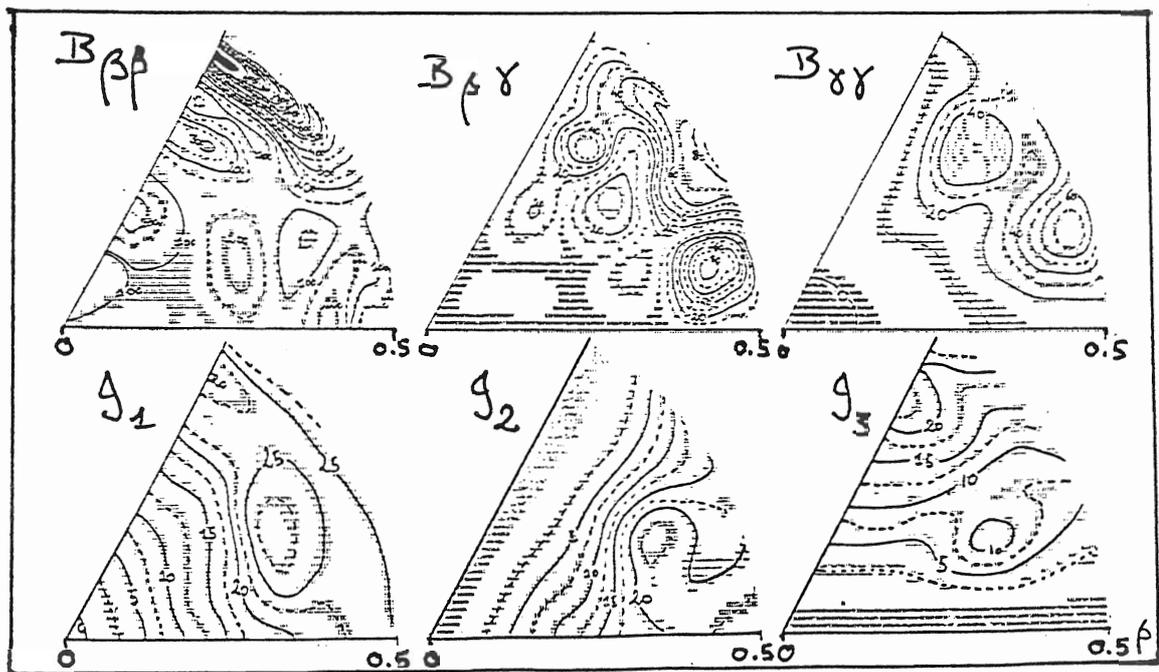


Fig VI-22:
 Paramètres d'inertie de ^{110}Cd (en \hbar^2/MeV) pour les constantes d'appariement $G+5\%$.

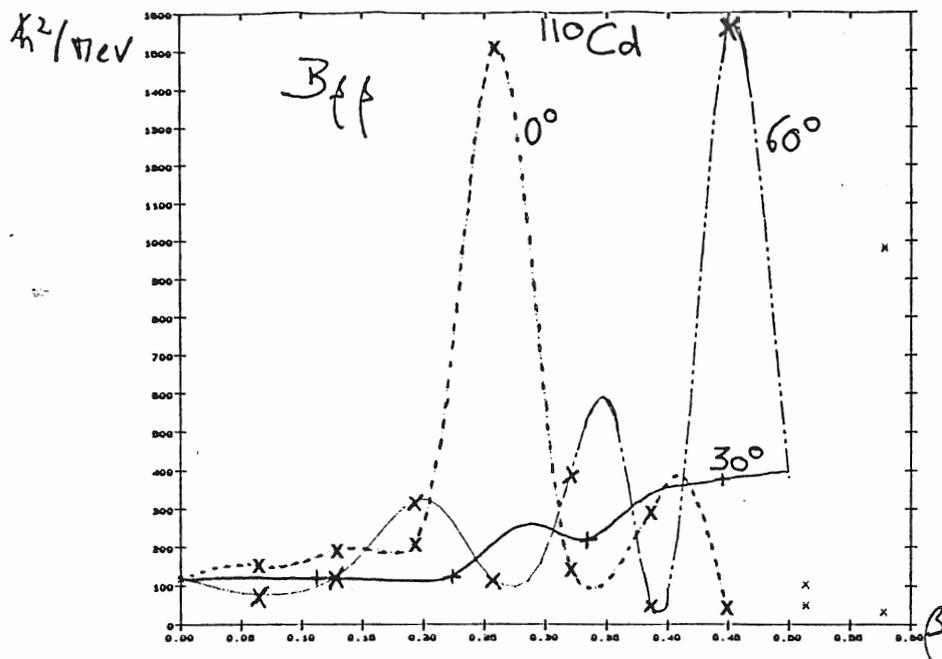


Fig VI-23:

Coupes du lissage de $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd à $\gamma = 0, 30, 60^\circ$. Les points calculés sont indiqués par des croix.

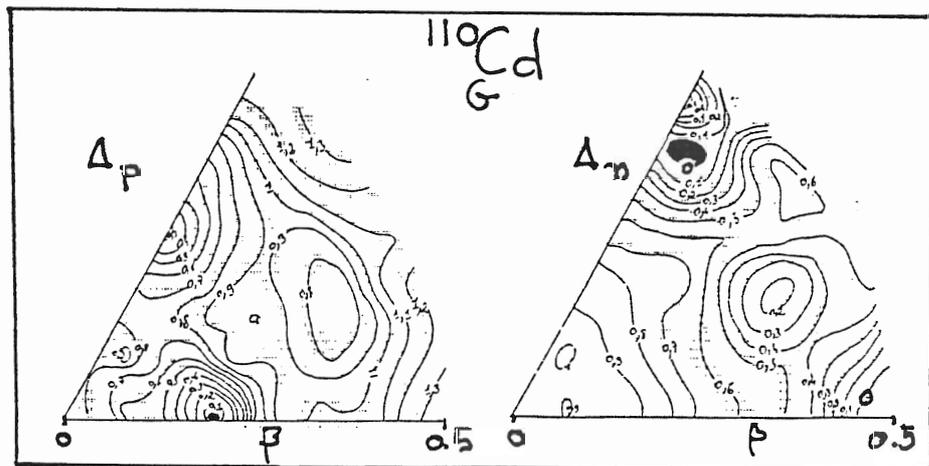


Fig VI-24:

Cartes des gaps d'appariement (en MeV) de ^{110}Cd résultants du calcul aux valeurs usuelles des intensités de pairing.

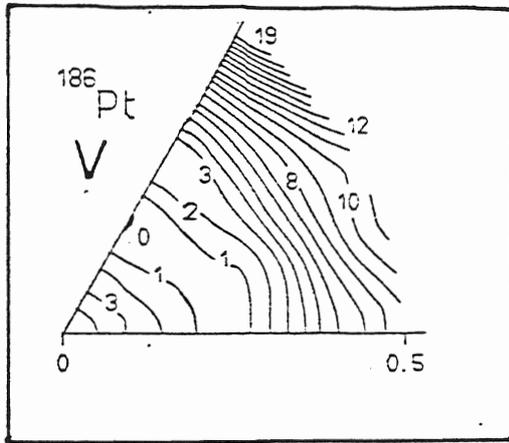


Fig VI-25: Surface d'énergie potentielle aux valeurs usuelles des intensités d'appariement de ^{186}Pt . (1 MeV par ligne)

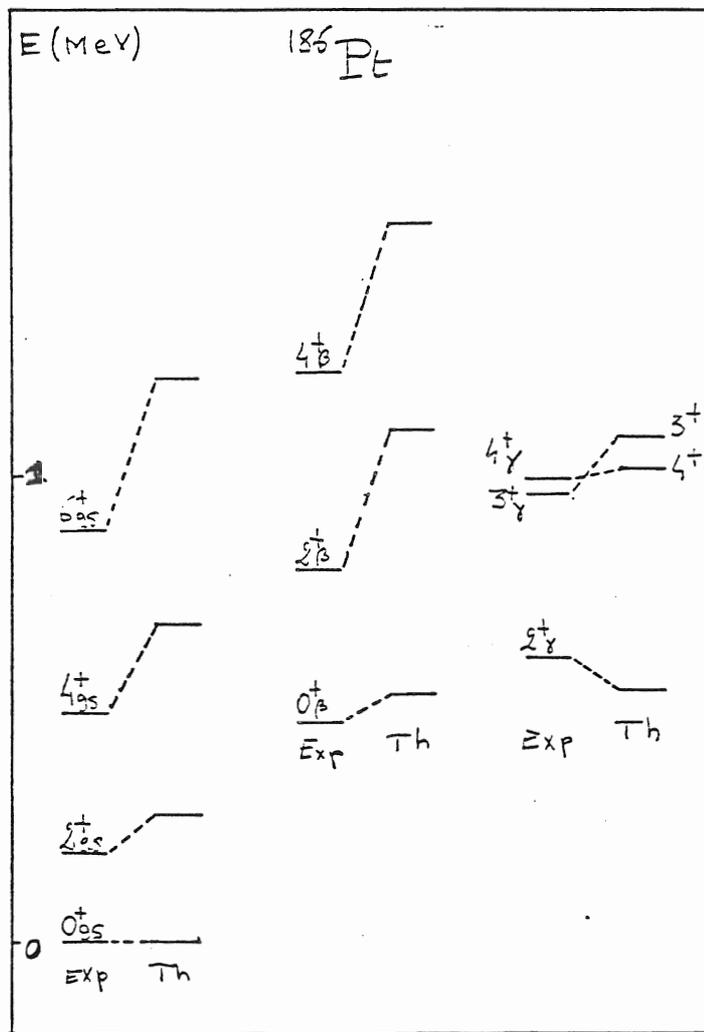


Fig VI-26:

Comparaison Exp-Th pour les énergies des premiers niveaux de ^{186}Pt .

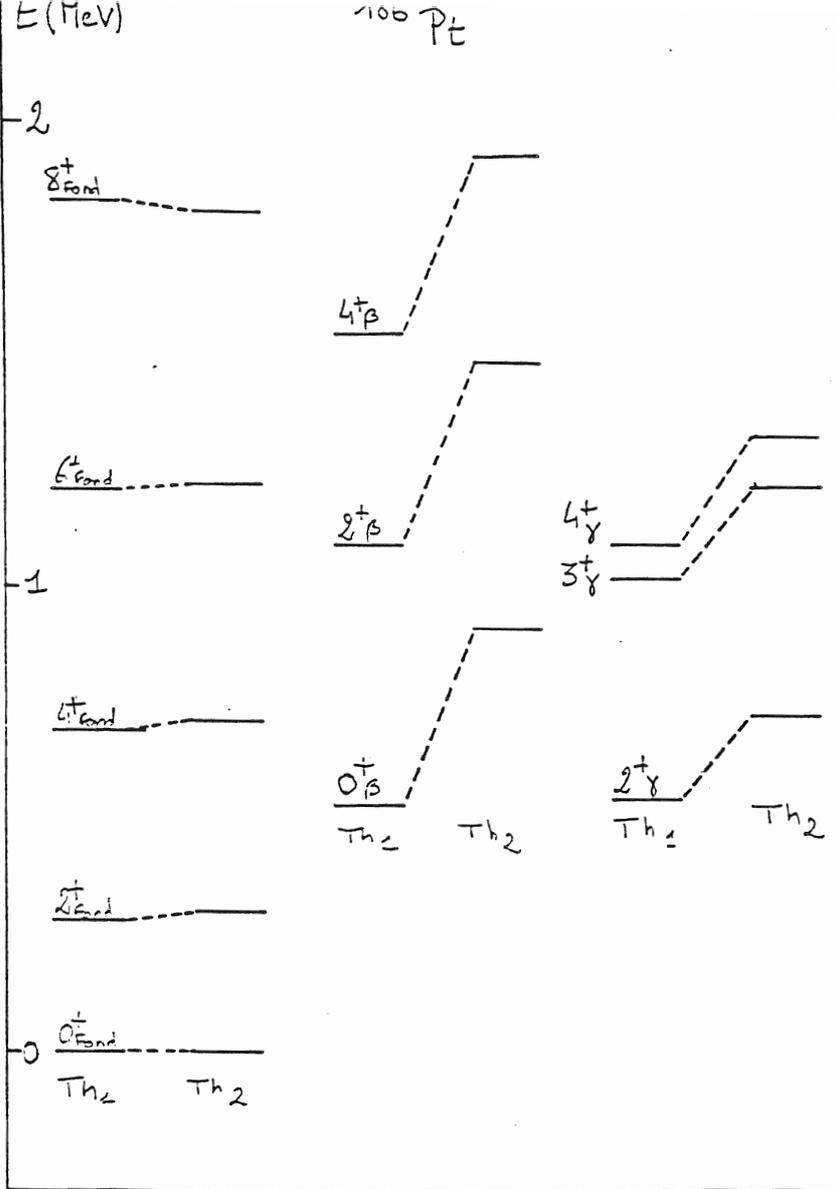


Fig VI-27: Comparaison des spectres de basse énergie obtenus soit par le calcul complet (Th1) soit par le calcul où les quantités triaxiales sont déterminées par symétrie à partir des solutions axiales (Th2).

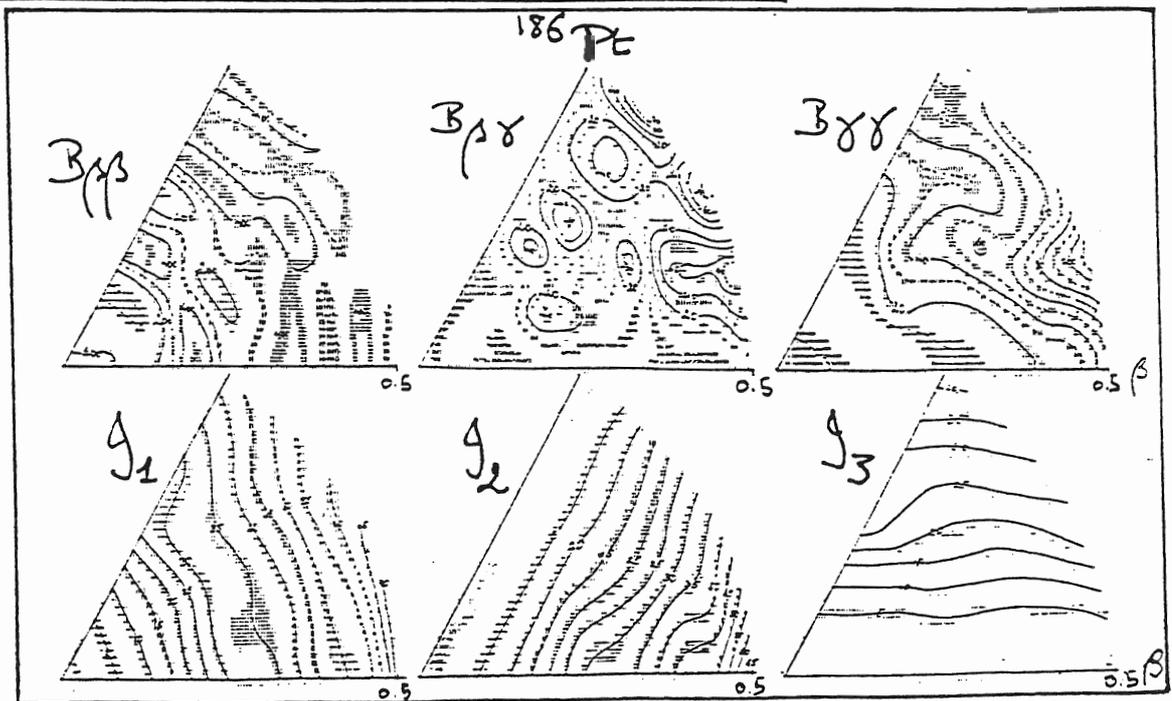


Fig VI-28: Paramètres d'inertie (en \hbar^2/MeV) de ^{186}Pt aux G usuels.

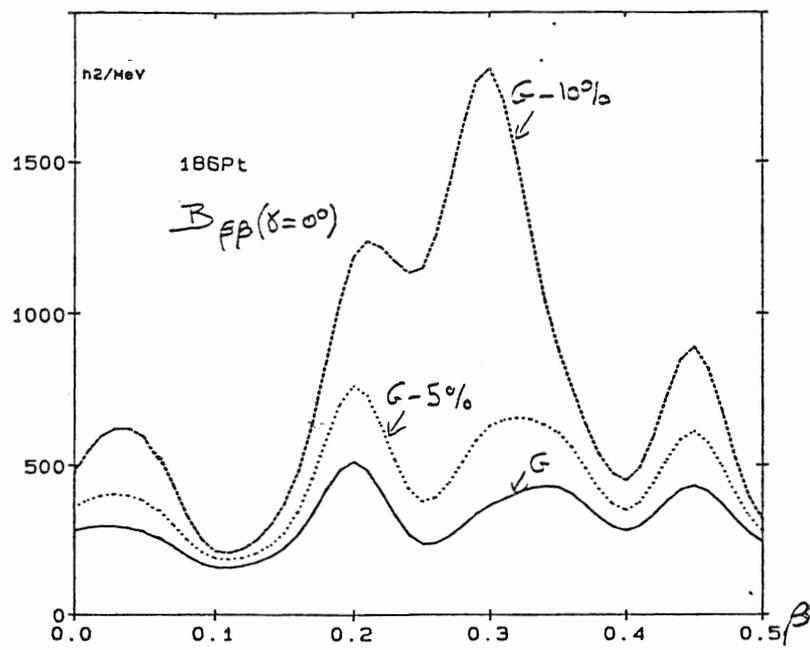


Fig VI-29a: Comparaison des paramètres de masse $B_{\beta\beta}$ à $\gamma = 0^\circ$ de ^{186}Pt obtenus avec les constantes de appariement G , $G-5\%$ et $G-10\%$.

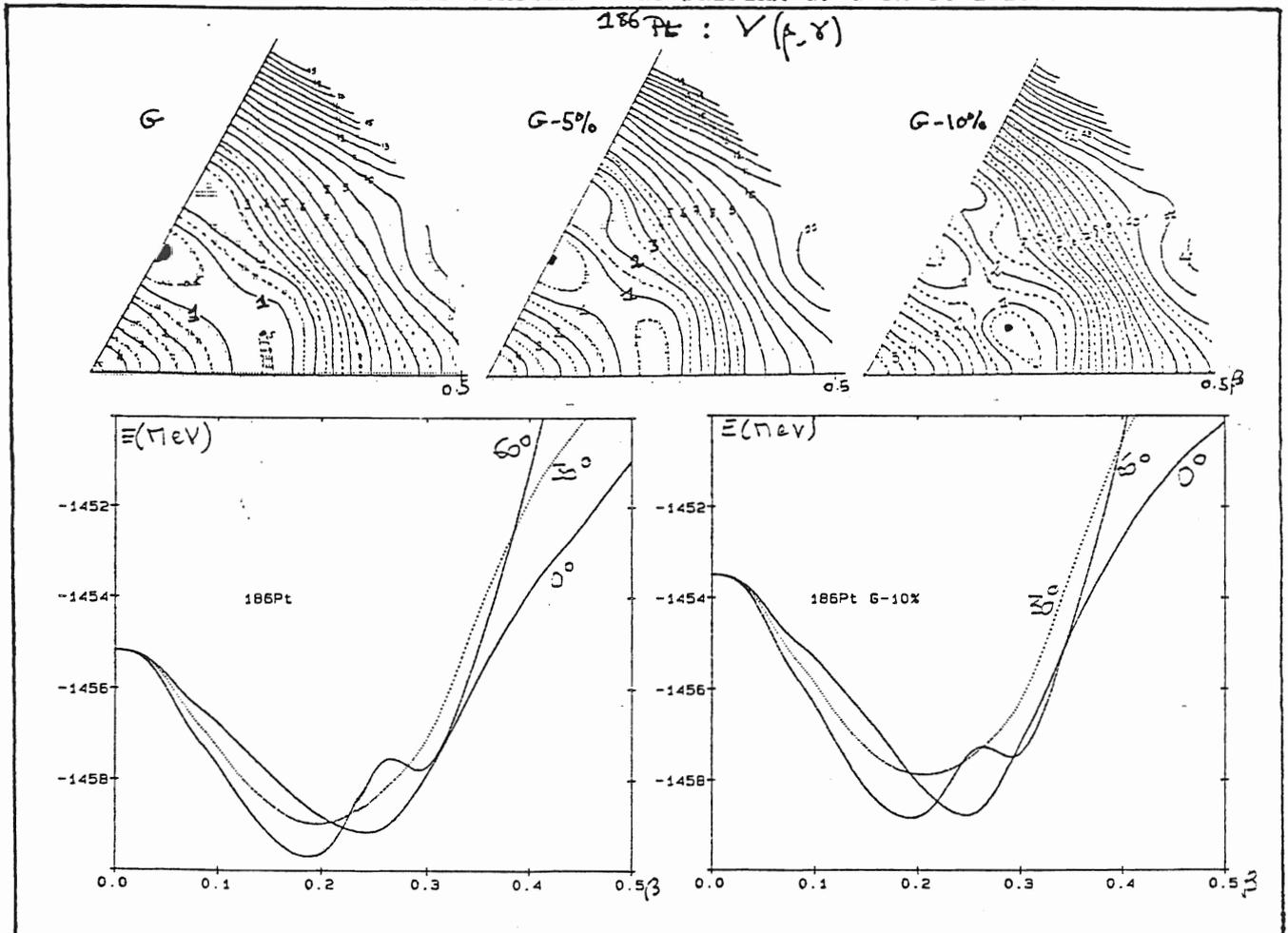


Fig VI-29b: Comparaison des surfaces d'énergie potentielle de ^{186}Pt obtenues avec les constantes d'appariement G , $G-5\%$ et $G-10\%$. (1 MeV par ligne continue; 0.5 MeV par ligne pointillée)

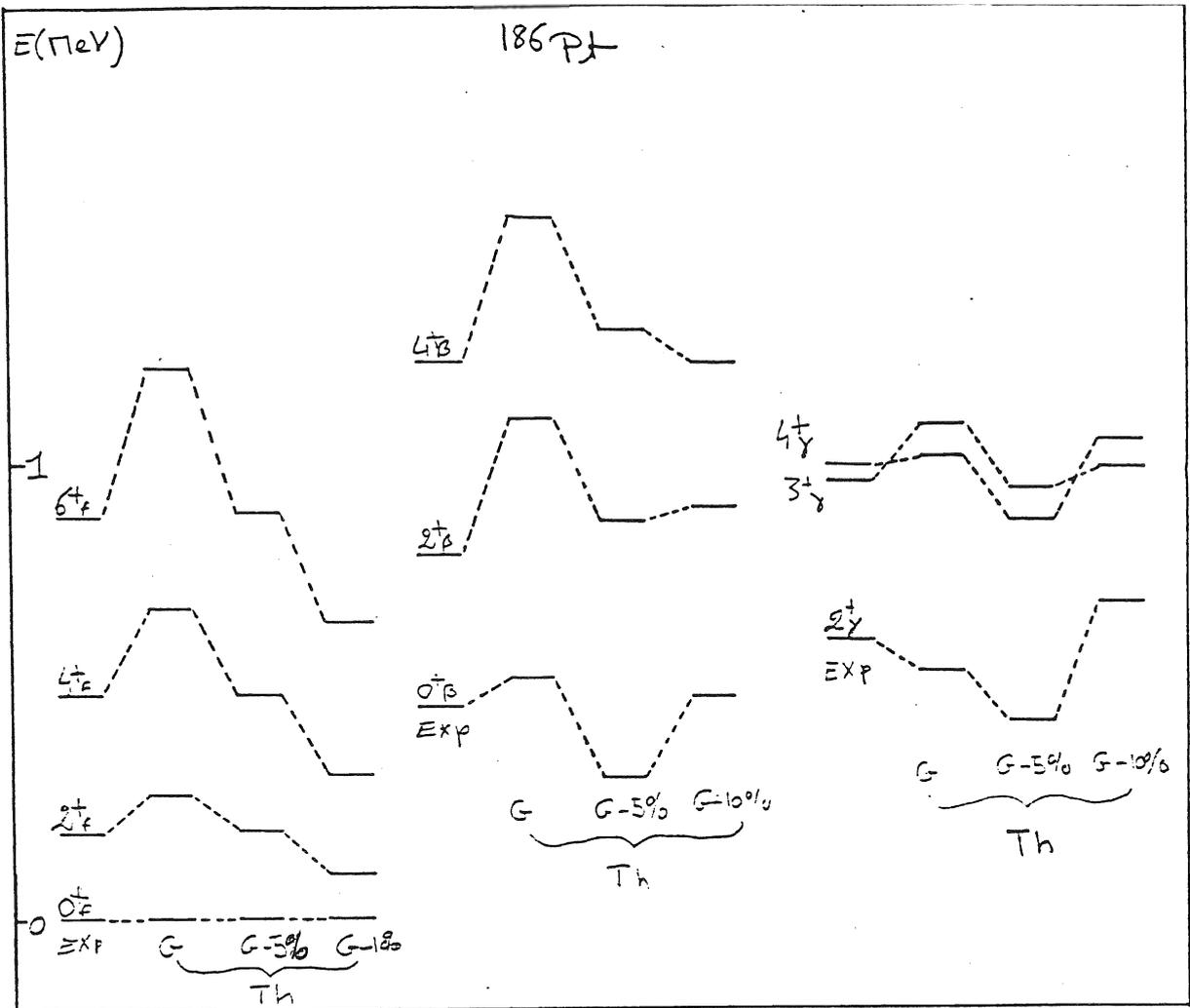


Fig VI-30: Spectres expérimental (Exp) et théoriques de ^{186}Pt pour les intensités d'appariement G , $G-5\%$ et $G-10\%$.

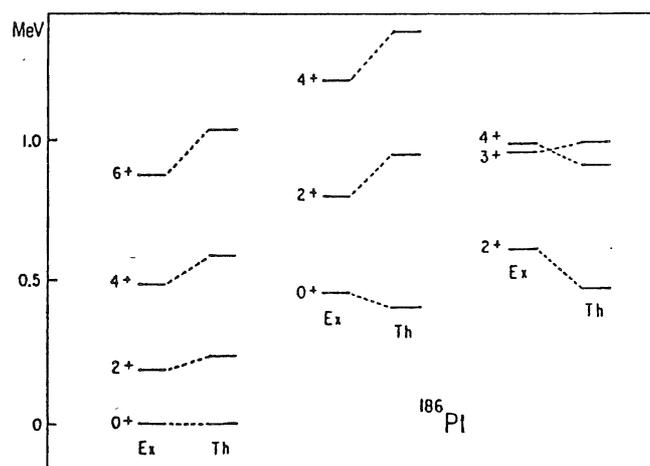


Fig VI-31: Spectres de basse énergie expérimental et théorique à $G-3\%$ de ^{186}Pt .

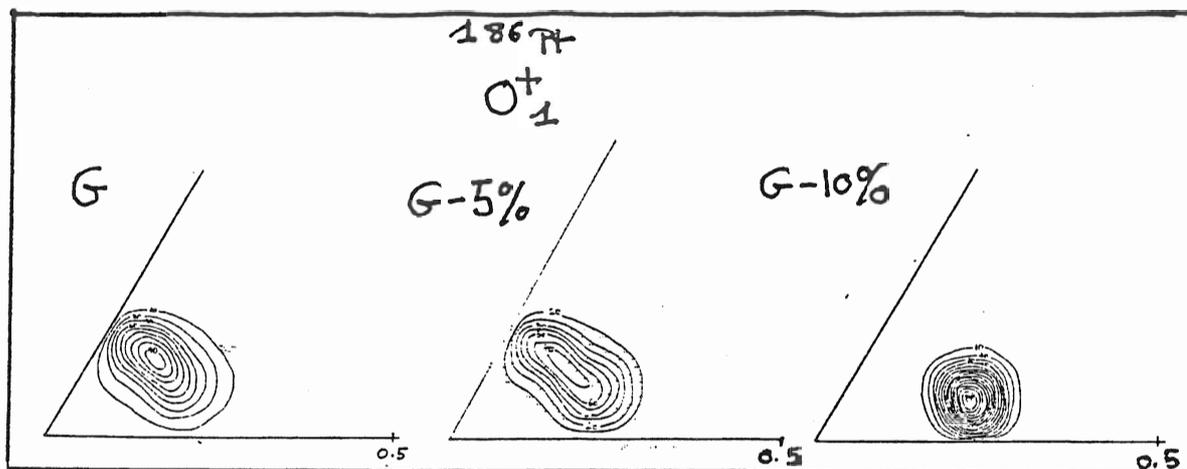


Fig VI-32:

Comparaison des densités de probabilités de présence de l'état 0_1^+ de ^{186}Pt dans les trois cas de valeurs d'intensité d'appariement.

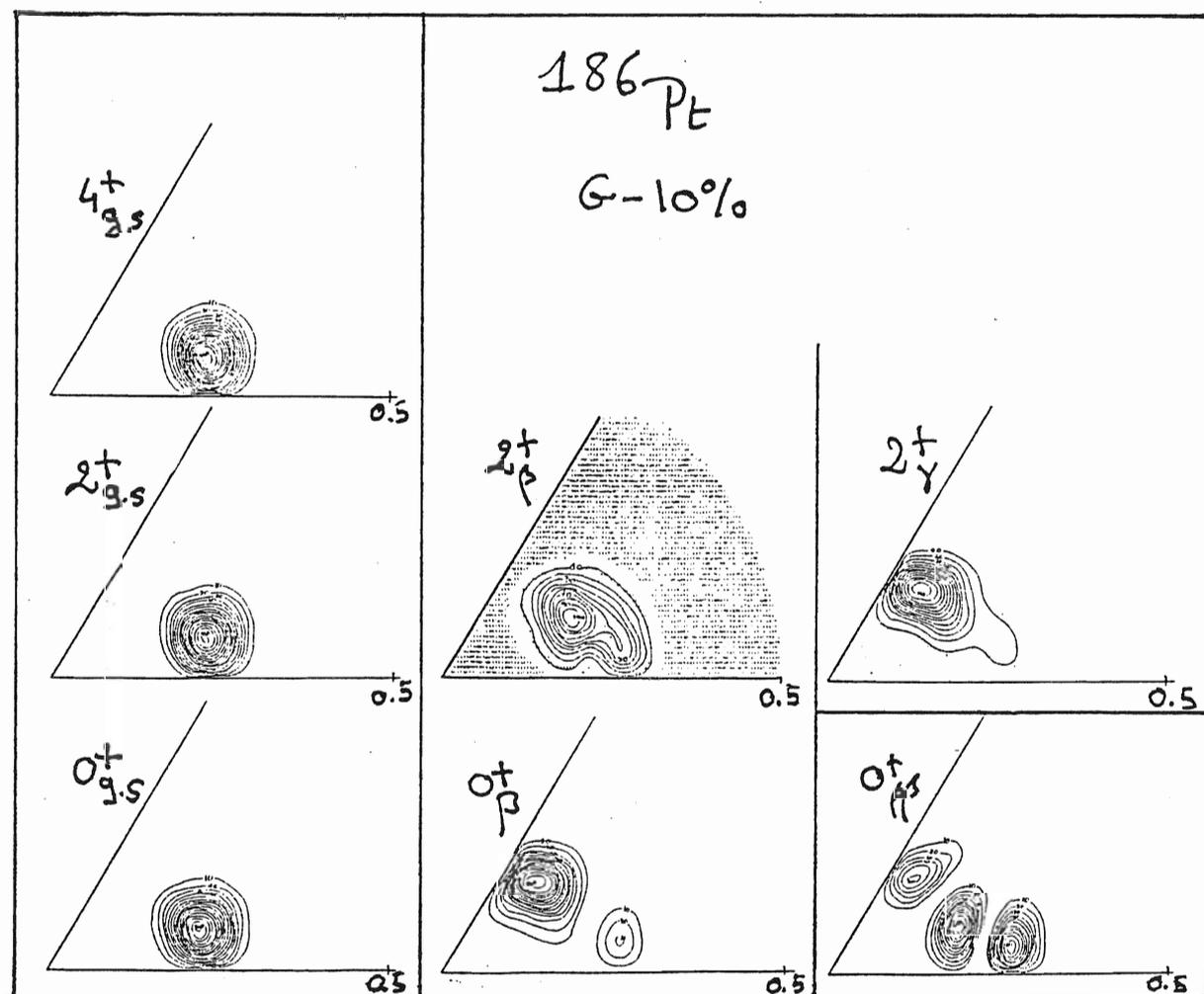


Fig VI-33: Densité de probabilité de présence des premiers états des bandes fondamentale (G.S), β , γ et $\beta\beta$ de ^{186}Pt (à G-10%).

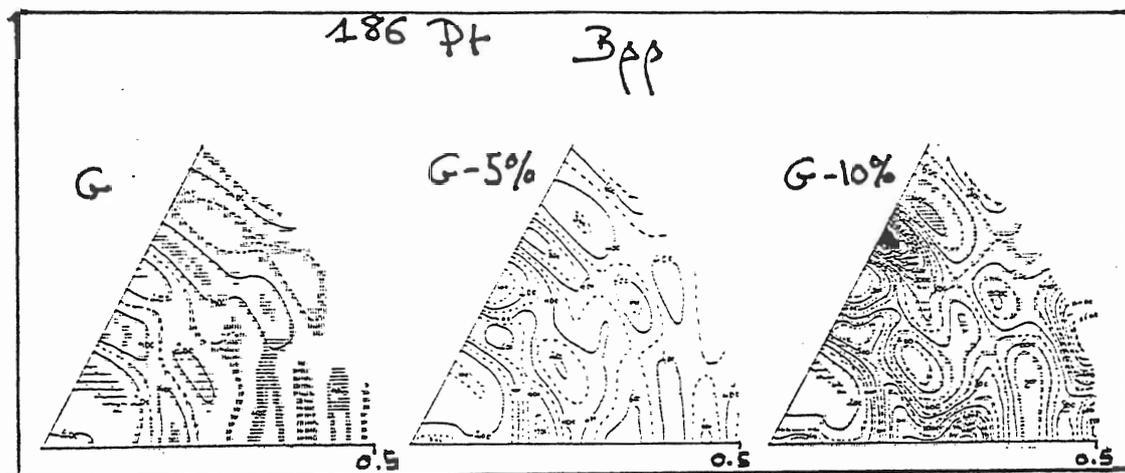


Fig VI-34:

Comparaison des cartes du paramètre de masse $B_{\beta\beta}$ obtenues pour les trois valeurs d'appariement dans ^{186}Pt .

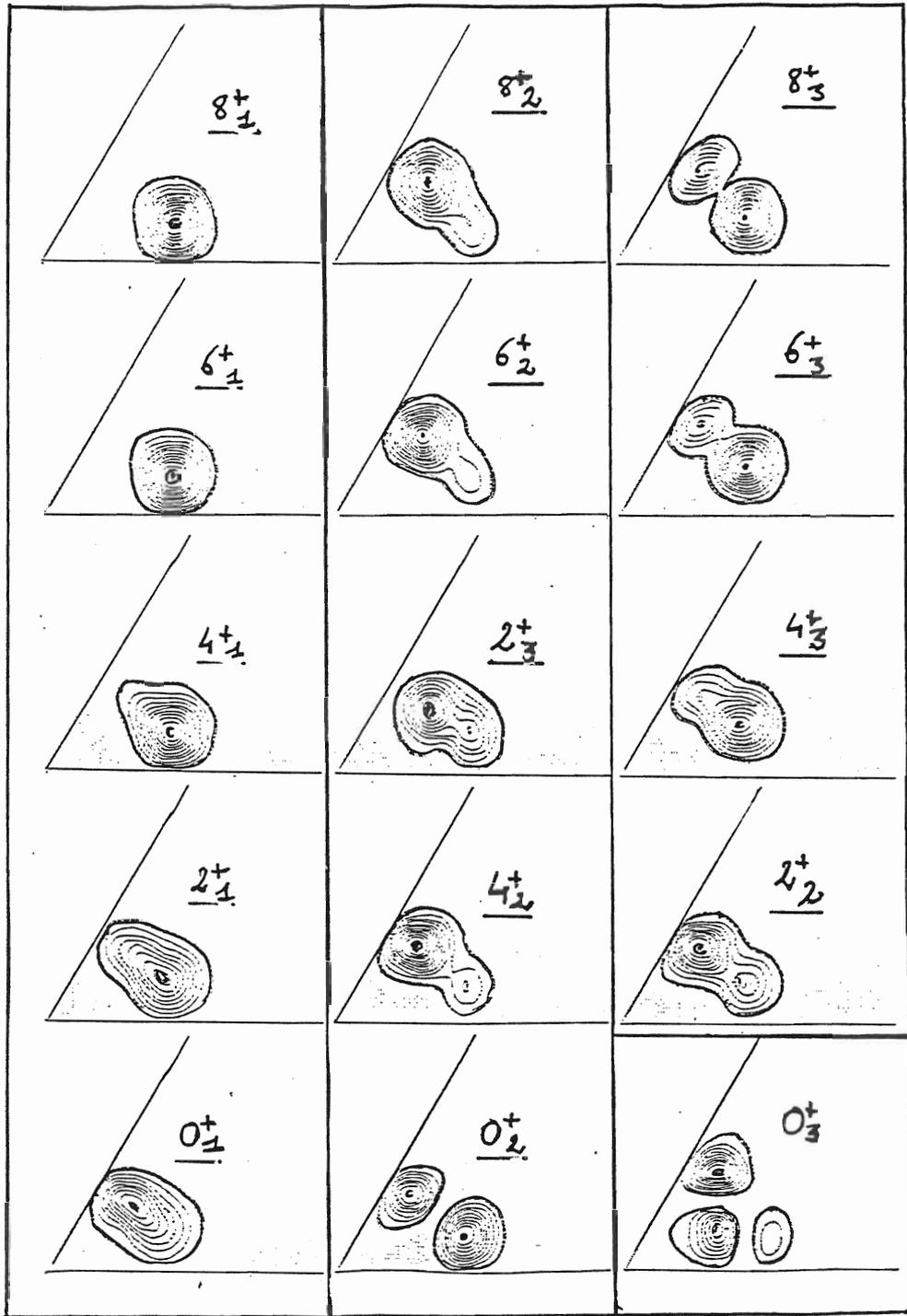


Fig VI-35:

Densité de probabilité de présence des premiers états des bandes fondamentale et vibrationnelles de ^{186}Pt à G-3%.

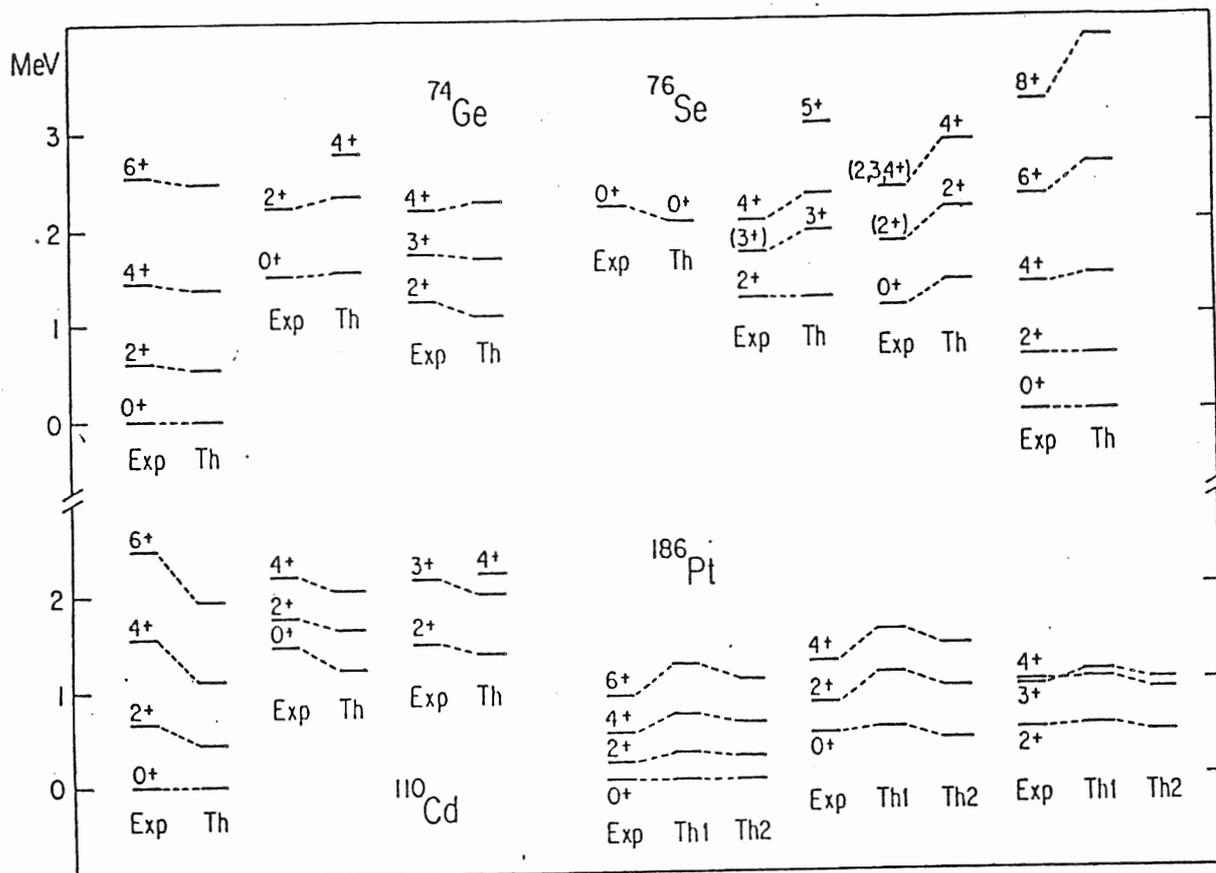


Fig VI-36:

Récapitulatif des résultats en énergie obtenus pour les premiers niveaux des bandes fondamentale, β et γ dans les noyaux de ^{74}Ge , ^{76}Se , ^{110}Cd et ^{186}Pt . Dans le cas du ^{76}Se figurent dans l'ordre les bandes $\beta\beta$, γ , β et fondamentale. Pour ^{110}Cd nous avons reporté les résultats associés aux valeurs usuelles des constantes d'appariement; pour ^{186}Pt ceux à G (Th1) et G-3% (Th2).

Chapitre VII

Conclusion

L'approche théorique qui vient d'être décrite et illustrée sur l'exemple de quatre noyaux mous, peut être légitimement qualifiée de microscopique. En effet, (hors l'interaction d'appariement) l'interaction utilisée ne fait l'objet d'aucun ajustement ad hoc pour un noyau précis ou un comportement dynamique donné, mais a été définie il y a de nombreuses années pour décrire essentiellement les propriétés de saturation nucléaire. En outre, aucune approximation de "coeur inerte" n'est effectuée et c'est l'ensemble des A nucléons qui contribuent explicitement aux propriétés de déformation du noyau de masse A .

Cette approche est cependant "semi-quantique" dans la mesure où l'approximation ATDHFB sous-jacente conduit à la définition d'un hamiltonien collectif classique qu'il faut ensuite requantifier. Une approche plus satisfaisante, dans le cadre de la coordonnée génératrice, est certes envisageable, mais demeure considérablement plus onéreuse d'un point de vue pratique pour des calculs systématiques.

Il est patent que l'effort devrait porter maintenant sur la mise au point d'un traitement moins simpliste des éléments de matrice d'appariement. Ceci est d'autant plus nécessaire que nous avons illustré, de façon très nette, l'influence considérable de telles corrélations pour la reproduction des niveaux collectifs de basse énergie.

Il demeure néanmoins que la reproduction quantitative des propriétés spectroscopiques étudiées (dans le cadre d'une théorie authentiquement microscopique) constitue un argument non négligeable en faveur de l'étude statique et dynamique (à basse énergie) des noyaux en termes d'interactions effectives.

Références du chapitre I :

- [I-1] : Å. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 26 (1952) n°14.
[I-2] : Å. Bohr et B. Mottelson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.
26 (1952) n°14.
[I-3] : P. Quentin et H. Flocard, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.
28 (1978) 523.
[I-4] : D. R. Inglis, Phys. Rev. 96 (1954) 1059, 103 (1956) 1796.
[I-5] : S. T. Belayev, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.
11 (1959) n°31

Références du chapitre II :

- [II-0] : D. R. Hartree, Proc. Cam. Phil. Soc. 24 (1928) 89
V. A. Fock, Z. Phys. 61 (1930) 126
[II-1] : Dirac, P.A.M., Proc. Cambridge Philos. Soc.
26 (1930) 376
[II-2] : N. N. Bogolyubov. Sov. Phys. JETP 7 (1958) 41
[II-2a]: N. N. Bogolyubov. Sov. Phys.Usp. 2 (1959) 236.
[II-2b]: N. N. Bogolyubov. Usp. Fiz. Nauk. 67 (1959) 549.
[II-3] : H. Schmidt .Diploma Thésis , University of Frankfurt am
Main , (1961)
[II-4] : J. G. Valatin. Phys. Rev. C7 (1961) 296.
[II-5] : S. T. Belayev, Sov. J. Nucl. Phys. 64 (1966) 937
S. T. Belayev, Nucl. Phys. 64 (1965) 17
S. T. Belayev, Mat. Fys. Medd. 11 (1959) 31
[II-6] : M. Baranger et K. Kumar, Nucl. Phys. A122 (1978) 123
[II-7] : J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer. Phys.
Rev. 108 (1957) 1175.7) 1175.
[II-8] : J. G. Valatin. Nuovo cimento 7 (1958) 843
[II-9] : M. Baranger et M. Vénéroni, Ann. Phys.
(N. Y) 114 (1978) 123
[II-10] :M. J. Giannoni, Ann. Phys . Fr. 9 (1979) 39
M. J. Giannoni, J. Math. Phys. (N.Y.) 22 (1981) 352
[II-11a]:M. J. Giannoni et P. Quentin, Phys. Rev.
C21 (1980) 2060
[II-11b]:M. J. Giannoni et P. Quentin, Phys. Rev.
C21 (1980) 2076

- [II-12] : D. M. Brink, M. J. Giannoni et M. Vénéroni, Nucl. Phys. A258 (1976) 237.76) 237.
- [II-13] : L. Bennour, Thèse d'état, Université Paris XI, 1987.
& L. Bennour, J. Libert, P. Quentin article à paraître.
- [II-14] : C. Bloch, Lectures on the manybody problem. Tata Institute Bombay, 1962.
reprinted in C. Bloch, Scientific Works Vol II, North Holland, Amsterdam, 1975.
- [II-15] : D. R. Inglis, Phys. Rev 96 (1954) 1059,
103 (1959) 1786
- [II-16] : M. Brack, J. Damgaard, A. S. Jensen, H. C. Pauli, V. M Strutinsky et C. Y. Wong , Rev. Mod. Phys 44 (1972) 320
- [II-17] : D. J. Thouless et J. G. Valatin, Nucl. Phys. 31 (1962) 211
J. G. Valatin, Phys. Rev 122 (1961) 1012
- [II-18] : A. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Vid. Selsk. 26 (1952) N°14.
- [II-19] : D. W. Sprung, G. Lie, M. Vallières et P. Quentin, Nucl. Phys. A326 (1979) 37(1979) 37
- [II-20] : A. Bohr et B. Mottelson, Nuclear Structure Vol II Benjamin Reading (1975)
- [II-21] : J. J. Griffin et J. A. Wheeler, Phys. Rev 108 (1957) 311
- [II-22] : W. Pauli, Handbuch der Phys., vol XXIV, Springer-Verlag, Berlin, 1933.
- [II-23] : Eisenberg et Greiner, Nucl. Models, Vol I, "North Holland", 1970.
- [II-24] : K. Kumar et M. Baranger, Nucl. Phys., A92 (1967) 608.

Références du chapitre III:

- [III-1] : L. Bennour, thèse d'état, Université Paris XI, 1987
- [III-2] : M. Baranger et M. Vénéroni, Ann. Phys. (N.Y.) 114 (1978) 123
- [III-3] : M. J. Giannoni et P. Quentin, Phys. Rev. C21. (1980) 2060, 2076
- [III-4] : P. Bonche, H. Flocard, P. H. Heenen, S. J. Krieger, M. S. Weiss, Nucl. Phys. A443 (1985) 39-63

- [III-5] : J. Decharge et D. Gogny, Phys. Rev., C21 (1980) 1568
- [III-6] : M. Girod et B. Grammaticos, Phys. Rev., C27 (1983) 2317
- [III-7] : M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai et P. Quentin,
Nucl. Phys. A238 (1975) 29
M. Brack, T. Ledergerber, H. C. Pauli, A. S. Jensen,
Nucl. Phys. A234 (1974) 185
- [III-8] : M. Brack et P. Quentin, Phys. Lett.,
56B (1975) 421
- [III-9] : M. Brack et P. Quentin, Proc. Int. Conf. on nuclear
self-consistent fields, Trieste, 1975.
G. Ripka et M. Porneuf, Eds. North Holland,
Amsterdam, 1975
- [III-10] : G. G. Bunatian, V.M. Kolomietz, V.M. Strutinsky,
Nucl. Phys. A188 (1972) 225
- [III-11]: M. Brack, J. Damgaard, A. S. Jensen, H. C. Pauli,
V. M. Strutinsky, C. Y. Wong, Rev. Mod. Phys.
44 (1972) 320
- [III-12]: M. Brack, C. Guet, H. B. Håkansson, Phys. Rep
123 (1985) 275
- [III-13]: B. K. Jennings, R. K. Badhuri et M. Brack, Nucl. Phys.
A253 (1975) 29
- [III-14]: M. Brack et P. Quentin, A361 (1981) 35
- [III-15]: M. Brack, Phys. Lett. 71B (1977) 239
- [III-16]: T. H. R. Skyrme, Phil. Mag. 1 (1936) 1043
Nucl. Phys. 9 (1959) 615
- [III-17]: D. Vautherin, D. M. Brink, Phys. Rev. C5 (1972) 626
- [III-18]: J. W. Negele et D. Vautherin, Phys. Rev C5 (1972) 1472
- [III-19]: J. Libert, M. Meyer, P. Quentin, Phys. Rev.
C25 (1982) 586 et références incluses.
- [III-20]: P. Quentin, H. Flocard, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.
28 (1978) 23
- [III-21]: J. Bartel, P. Quentin, C. Guet, A. B. Håkansson,
Nucl. Phys A386 (1982) 79
- [III-22]: E. P. Wigner, Phys. Rev. 40 (1932) 749
- [III-23]: J. G. Kirkwood, Phys. Rev. 44 (1933) 31
- [III-24]: R. K. Bhaduri, Phys. Rev. Lett. 27 (1971) 606
J. Bartel, M. Durand et M. Brack, Z. Phys. A315
(1984) 341 et les références qui y sont incluses.

- [III-25]: P. Honenberg et W. Kohn, Phys. Rev. 136 (1964) B864
 [III-26]: V. Mikolas et M. Tomasek, Phys. Lett 64A (1977) 109
 [III-27]: B. Grammaticos, A. Voros, Ann. Phys. 123 (1979) 359,
129 (1980) 153
 [III-28]: K. Bencheik, M. Brack, I. Deloncle, J. Libert et
 P. Quentin (à paraître).
 [III-29]: L. P. Gorkov, Sov. Phys. JETP7 (1958) 505
 [III-30]: A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov et I. E. Dzialoshinka,
 "Methods of quantum theory in statistical physics.",
 Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1963.
 [III-31]: A. B. Migdal, "Theory of limite Fermi systems and
 applications to Atomic nuclei." N.Y., 1955.

Références du chapitre IV:

- [IV-1] : G. Ripka, Adv. Nucl. Phys., 1 (1968) 183.
 [IV-2] : B. Grammaticos, Thèse de 3^{ème} cycle,
 Université Paris XI, 1974
 [IV-3] : K. Bencheikh, Thèse, Université Bordeaux I, 1986
 [IV-4] : P. Quentin, H. Flocard, Ann. Rev. Nucl. Sci
28 (1978) 523
 [IV-5] : J. D. Talman, Nucl. Phys. A141 (1970) 273
 [IV-6] : P. Quentin, Thèse d'état, Université Paris XI, 1975
 [IV-7] : A. Bohr et B. Mottelson, Nuclear Structure vol II,
 Benjamin Reading (1975).
 [IV-8] : K. Kumar et M. Baranger, Nucl. Phys. A92 (1967) 608.
 [IV-9] : M. Baranger et K. Kumar, Nucl. Phys. A122 (1968) 241
 M. Baranger et K. Kumar, Nucl. Phys. A122 (1968) 273
 M. Baranger et K. Kumar, Nucl. Phys. A110 (1968) 523
 [IV-10]: Eisenberg et Greiner, Nucl. Models, vol I,
 North Holland, 1970.
 [IV-11]: J. Libert et P. Quentin, Z. Phys. A 306 (1982) 315.
 J. Libert, Thèse de 3^{ème} cycle,
 Université Paris VII, 1981
 [IV-12]: D. Medjadi, Thèse d'état, Université Bordeaux I
 K. Bencheik, Thèse de l'université Bordeaux I, 19
 L. Bennour, Thèse d'état, Université Paris XI, 1987.
 [IV-13]: M. Girod et J. Libert, Private Communication.

Références du chapitre V

[V-1] : L. Bennour, Thèse d'état, Université Paris XI, 1988.

Références du chapitre VI:

- [VI-1] : D. Vautherin et D. M. Brink, Phys. Rev **C5** (1972) 626.
- [VI-2] : N. Redon, J. Meyer, M. Meyer, P. Quentin, P. Bonche,
H. Flocard et P. H. Heenen, Phys. Rev. **C38** (1988) 550
- [VI-3] : A. H. Wapstra et G. Audi, Nucl. Phys. **A432** (1985) 1.
- [VI-4] : P. Bonche, H. Flocard, S. Krieger et M. Weiss,
Nucl. Phys. **A443** (1985) 39.
- [VI-5] : H. Flocard, P. Quentin, D. Vautherin, M. Vénéroni et
K. Kerman, Nucl. Phys ,**A231** (1974) 176.
- [VI-6] : C. M. Ko, H. C. Pauli, M. Brack et G. E. Brown,
Phys. Lett., **45B** (1973) 433
Nucl. Phys., **A236** (1974) 269.
- [VI-7] : M. Brack, B. K. Jennings et Y. H. Chu,
Phys. Lett., **65B** (1976) 1.
- [VI-8] : L. Bennour, Thèse d'état, Université Paris XI, 1988.
- [VI-9] : M. Brack, J. Damgaard, A. S. Jensen, H. C. Pauli,
V. M. Strutinsky et C. Y. Wong, Rev. Mod. Phys.,
44 (1972) 320.
- [VI-10]: T. Ledergerber et H. C. Pauli, Nucl. Phys. A207 (1973) 1
H.C. Pauli et T. Ledergerber, Nucl.Phys. A175 (1971) 545
H.C. Pauli et al., Phys. Lett., **34B** (1971) 264.
- [VI-11]: J. Kunz et J. R. Nix, Z. Phys. A321 (1985) 455.
- [VI-12]: M. Vergnes, Inst. Phys. Conf. Ser. No49 (1980) 25
- [VI-13]: M. Girod et B. Grammaticos, 6^{ème} Session d'études
Biennales de Physique Nucléaire, Aussois (1981)
M. Girod et B. Grammaticos, Phys. Rev. **C27** (1983) 2317
M. Girod, D. Gogny et B. Grammaticos, 7^{ème} Session
d'études Biennales de Physique Nucléaire, Aussois (1983)
M. Girod, D. Gogny et B. Grammaticos, 8^{ème} Session
d'études Biennales de Physique Nucléaire, Aussois (1985)
- [VI-14]: D. Goutte, Thèse d'état, Université Paris XI, 1984.
- [VI-15]: D. Ardouin et al., Phys. Rev. **C18** (1978) 2739.

- [VI-16]: G. Rotbard, M. Vergnes, J. Vernotte, G. Berrier-Ronsin, J. Kalifa et R. Tamisier, Nucl. Phys. **A401** (1983) 41.
- [VI-17]: P. D. Duval, D. Goutte, M. Vergnes, Phys. Lett. **124B** (1983) 297.
- [VI-18]: N. Redon, J. Meyer, M. Meyer, P. Quentin, M.S. Weiss, P. Bonche, H. Flocard, P.H. Heenen, Phys. Lett. **B181** (1986) 223
- [VI-19]: J. P. Bazantay, Thèse de l'Université Paris VII, (1984)
J. P. Bazantay, J.-M. Cavedon, J.-C. Clemens, B. Frois, D. Goutte, M. Huet, P. Leconte, Y. Mizuno, X.-H. Phan, S. K. Platchkov, W. Boeglin et I. Sick, Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 643.
- [VI-20]: M. Matoba, Phys. Lett. **88B** (1979) 249.
- [VI-21]: M. Meyer, J. Danière, J. Letessier et P. Quentin, Nucl. Phys. **A316** (1979) 93.
- [VI-22]: G. Gneuss, W. Greiner, Nucl. Phys. **A171** (1971) 447
- [VI-23]: M. Meyer, J. Danières, J. Letessier, P. Quentin, In. Proc. European Conf. on Nucl. Phys. with Heavy Ions (IAEA, Vienna, 1976) 98.
- [VI-24]: D. Vautherin, Phys. Rev. **C7** (1973) 297.
- [VI-25]: H. Flocard, P. Quentin, A. K. Kerman, D. Vautherin, Nucl. Phys. **A203** (1973) 433.
- [VI-26]: M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai, P. Quentin, Nucl. Phys. **A238** (1975) 23.
- [VI-27]: R.E. Anderson, B.A.P.S **20** (1975) 1162.
H.W. Fielding, R.E. Anderson, C.D. Zatiratos, D.A. Lind, W.P. Alford, F.E. Cecil, H.H. Weinman, S.G. Leth, Annual Report, Univ. Colorado (1975).
- [VI-28]: J.R. Comfort, W.J. Braithwaite, J.R. Duray, S. Yoshida, Phys. Rev. Lett. **29** (1972) 442.
- [VI-29]: R. A. Meyer, L. Peker, Z.Phys **A283** (1977) 379.
- [VI-30]: V. Paar, R.A. Meyer, J. Phys **G5** (1979) L75.
- [VI-31]: M. A. Deleplanque, C. Gerschel, M. Ishihara, N. Perrin, B. Ader, C. Bourgeois, J. P. Husson, P. Kilcher et J. Letessier, J. Phys. Colloq **36** (1975) C5-97.
- [VI-32]: D. Proetel, R.M. Diamond, P. Kienle, J.R. Leigh, K.H. Maier et F.S. Stephens, Phys. Rev. Lett. **31** (1973) 896.

- [VI-33]: F. Leblanc, Thèse de l'Université Paris VII, 1989.
- [VI-34]: M. Meyer, 4^{ème} Colloque franco-japonais de Spectroscopie Nucléaire, Seillac, 7-11 Oct. 1986.
- [VI-35]: L. Richter, H. Backe, F. Weik et R. Willwater, Nucl. Phys. **A319** (1979) 221.
- [VI-36]: M. Finger, J.P. Husson, J. Jastrzebski, A. Johnson, G. Astner, B.R. Erdal, A. Kjeldberg, P. Patzelt, A. Hoglund, S.G. Malmskog et R. Henck, Nucl. Phys. **A188** (1972) 369.
- [VI-37]: K. Kumar, Phys. Rev. **C1** (1970) 369.
- [VI-38]: L. Willets, M. Jean, Phys. Rev. **102** (1956) 237.
- [VI-39]: J. Sauvage-Letessier, P. Quentin, H. Flocard, Nucl. Phys. **A370** (1981) 231.
- [VI-40]: N. Redon, J. Meyer, M. Meyer, P. Quentin, M.S. Weiss, P. Bonche, H. Flocard, P.H. Heenen, Phys. Lett. **B181** (1986) 223
P. Quentin, 4^{ème} Colloque franco-japonais de Spectroscopie Nucléaire, Seillac, 7-11 Oct. 1986.
- [VI-41]: N. Redon, Thèse de l'Université Lyon-I, 1987.
- [VI-42]: L. Bennour, J. Libert, M. Meyer, P. Quentin, 6^{ème} Session d'études Biennales de Physique Nucléaire, Aussois (1987).
- [VI-43]: K. Kumar, M. Baranger, Nucl. Phys. **A321** (1967) 455.
- [VI-44]: A. Giannatiempo, A. Nannini, A. Perego, P. Sona, Université de Firenze, à paraître.

TABLE DES MATIÈRES

<u>Chapitre I</u> : Introduction.....	pages 1 à 2
<u>Chapitre II</u> : Formalisme général.....	pages 3 à 25
I) Introduction.....	page 3
II) Approximations dynamiques de type Hartree-Fock Bogolyubov.....	pages 4 à 9
a) En l'absence de corrélations d'appariement.....	pages 4 à 5
b) Avec les corrélations d'appariement.....	pages 6 à 8
c) Traitement approché des corrélations d'appariement...	pages 8 à 9
III) Limite adiabatique.....	pages 10 à 14
a) Sans corrélations d'appariement.....	pages 10 à 12
b) En présence de corrélations d'appariement.....	pages 12 à 14
IV) Approximations supplémentaires.....	pages 15 à 22
a) Réduction à une variable.....	pages 15 à 16
b) Approximations du cranking d'Inglis.....	pages 16 à 18
c) Cas de deux variables.....	pages 18 à 19
d) Cas des rotations collectives.....	pages 20
e) Choix des variables collectives.....	pages 21 à 22
V) Requantification du hamiltonien de Bohr.....	pages 23 à 24
VI) Conclusion.....	page 25

Chapitre III: Méthodes semi-classiques.....pages 26 à 44

I) Introduction.....pages 27 à 28

II) Méthodes semi-classiques.....pages 28 à 39

- a) Théorème de Strutinsky.....pages 28 à 30
- b) Interaction effective de Skyrme, hamiltonien
Hartree-Fock de Skyrme.....pages 30 à 32
- c) Méthode ETF.....pages 33 à 38
- d) Méthode EVM.....pages 38 à 39

III) Prise en compte de certaines corrélations.....pages 40 à 43

- a) Corrélations d'appariement à l'approximation
de BCS.....pages 40 à 42
- b) Correction du centre de masse.....page 43

IV) Conclusion.....page 44

Chapitre IV: Compléments analytiques.....pages 45 à 71

I) Introduction.....pages 45 à 46

II) Symétries triaxiales et de renversement
du sens du temps.....pages 47 à 52

- a) Détermination de la base d'états propres.....pages 47 à 48
- b) Projection des états $|\alpha\rangle$ sur la base
d'oscillateur.....pages 49 à 52

III) Calcul de l'énergie totale EVM.....pages 53 à 59

- a) Calcul des éléments de matrice $\langle i | h_{\text{sky}}(\rho_{\text{ETF}}) | j \rangle$pages 53 à 55
- b) Relations de récurrence et intégration numérique...pages 55 à 56
- c) Construction des densités dans la base $|i\rangle$pages 57 à 59

IV) Calcul des opérateurs de Cranking.....pages 60 à 65

- a) Calcul des 3 paramètres de masse.....pages 60 à 62
- b) Calcul des moments d'inertie.....pages 62 à 65

IV) Diagonalisation du hamiltonien de Bohr.....	pages 66 à 70
a) Symétries du hamiltonien de Bohr.....	pages 66 à 68
b) Symétries des solutions et choix d'une base.....	pages 68 à 70
V) Conclusion.....	page 71

Chapitre V: Tests numériques.....pages 72 à 90

I) Introduction.....	page 72
II) Tests liés au calcul de \mathcal{R}_0	pages 73 à 76
a) Tests d'intégration numérique.....	pages 73 à 74
b) Stabilité de l'énergie en fonction des paramètres de la base.....	pages 74 à 76
-i- Choix du paramètre N_0	page 74
-ii- Optimisation de a_{sph}	page 75
-iii- Choix de la troncature sphérique.....	pages 75 à 76
III) Tests des paramètres du calcul ETF.....	pages 77 à 78
a) Asymétrie de surface.....	page 77
b) Constance des paramètres ETF en fonction de la déformation.....	pages 77 à 78
IV) Stabilité numérique des paramètres d'inertie.....	pages 79 à 80
a) Choix des pas pour le calcul des dérivées numériques.....	page 79
b) Stabilité en fonction du N_0 de la base.....	pages 79 à 80
c) Symétries des paramètres d'inertie.....	page 80
V) Conclusion.....	page 81

Figures du chapitre V.....	pages 82 à 90
----------------------------	---------------

Chapitre VI: Résultats.....pages 91 à 139

I) Introduction.....page 91

II) Validité de nos approximations.....pages 92 à 96

- a) Comparaison des approches EVM, ETF + Strutinsky et CHF.....pages 92 à 93
- b) Comparaison des paramètres de masses $B_{\beta\beta}$ axiaux des diverses approches théoriques.....pages 93 à 94
- c) Fluctuations des paramètres de masse.....pages 94 à 95
- d) Stabilité des solutions du hamiltonien de Bohr.....page 95

III) Résultats.....pages 96 à 115

- a) Réseau dans le plan (β, γ)page 96
- b) Paramètres des calculs.....pages 96 à 97
- c) Noyaux de ^{74}Ge et de ^{76}Sepages 97 à 101
- d) Noyau de ^{110}Cdpages 102 à 108
- e) Noyau de ^{186}Ptpages 109 à 115

IV) Conclusion.....page 116

Figures du chapitre VI.....pages 117 à 139

Chapitre VII: Conclusions.....pages 140

Références de la thèse.....pages 141 à 147

Table des matières.....pages 148 à 151

Index des figures.....pages 152 à 157

Index des figures

Figure du chapitre V:

Fig V-1: Comportement des énergies coulombienne et nucléaire en fonction de la densité du réseau d'intégration (page 83).

Fig V-2: Comportement des énergies coulombienne et nucléaire en fonction de la portée du réseau d'intégration (page 83).

Fig V-3: Energies totales des ^{110}Cd et ^{186}Pt en fonction du nombre de couches majeures (N_0 de 6 à 10) de la base (page 84).

Fig V-4: Energies totales des ^{110}Cd et ^{186}Pt en fonction du nombre de couches majeures (N_0 de 8 à 12) de la base (page 84).

Fig V-5: Optimisation de a_{sph} dans ^{110}Cd pour N_0 égal 8 et 10 (page 85).

Fig V-6: Energie de déformation axiale de ^{110}Cd pour $N_0 = 8$ et 10 en fonction des troncatures sphérique et déformée (page 85).

Fig V-7: Courbe de correspondance $\beta = f(Q)$ pour ^{110}Cd ($N_0 = 8$) (page 86).

Fig V-8a: Rapport a/a_0 en fonction des troncatures sphérique et déformée pour ^{110}Cd en base 8 (page 86).

Fig V-8b: Différence des énergies $E(a_0) - E(a)$ pour ^{110}Cd en troncature sphérique et déformée et en fonction de la déformation (page 87)

Fig V-9: Energie totale ETF de ^{110}Cd avec $\gamma = 1$ ou γ déterminé par minimisation de l'énergie (page 87).

Fig V-10: Energie totale EVM (troncature sphérique) de ^{110}Cd pour $N_0 = 8$ et 10 avec les deux valeurs précédentes de γ (page 88).

Fig V-11: Fluctuations des 4 paramètres ETF en fonction de la déformation axiale de ^{110}Cd (page 88).

Fig V-12: Différence d'énergie $[E(\alpha_{0q}, \rho_{0q}) - E(\alpha_q, \rho_q)]$ pour ETF et EVM (page 89)

Fig V-13: Stabilité du paramètre de masse $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd en fonction du pas de dérivée $d\beta$ (page 89).

Fig V-14: Stabilité du paramètre de masse $B_{\gamma\gamma}$ de ^{110}Cd en fonction du pas de dérivée $d\gamma$ (page 90).

Fig V-15: Stabilité des paramètres de masse $B_{\beta\beta}$, $B_{\gamma\gamma}$ et d'un moment d'inertie pour ^{110}Cd en fonction de N_0 (page 90).

Fig V-16: Stabilité des paramètres de masse $B_{\beta\beta}$, $B_{\gamma\gamma}$ et d'un moment d'inertie pour ^{186}Pt en fonction de N_0 (page 91).

Fig V-17: Evolution de $[\chi_3/4\beta^2 \sin^2 \gamma]$ au voisinage de $\gamma = 0^\circ$ et sa limite théorique $B_{\gamma\gamma}(\gamma = 0^\circ)$ dans ^{76}Se (page 91).

Figures du chapitre VI:

Fig VI-1a: Courbes d'énergie potentielle pour les solutions axiales de ^{110}Cd obtenues par les approches EVM, CHF et ETF (page 117).

Fig VI-1b: Courbes d'énergie potentielle pour les solutions axiales de ^{74}Ge obtenues par les approches EVM, CHF (page 117).

Fig VI-2: Comparaison des paramètres de masse axiaux $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd (base 8) obtenus dans les approches EVM et CHF (page 118).

Fig VI-3: Comportement du paramètre de masse axial $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd (base 8) en fonction des gaps d'appariement protons et neutrons (page 118).

Fig VI-4: Comportement du paramètre de masse axial $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd (à $\gamma=60^\circ$, base 8) en fonction du pas $d\beta$ dans les cas d'appariement stable et fluctuant. $B_{\beta\beta}$ est la valeur minimale obtenue dans les deux cas (page 119).

Fig VI-5: Stabilité des solutions du hamiltonien de Bohr en fonction de la taille de base dans ^{74}Ge (page 119).

Fig VI-6: Surfaces d'énergie potentielle EVM (base 8) pour ^{74}Ge et ^{76}Se (page 120).

Fig VI-7: Comparaison expérience (Exp)- Théorie (Th) pour les énergies des premiers niveaux (bande fondamentale notée G.S, bandes β et γ) de ^{74}Ge (page 120).

Fig VI-8: Comparaison Exp-Th pour les énergies des premiers niveaux (bande $\beta\beta$, γ , β et fondamentale) de ^{76}Se (page 121).

Fig VI-9: Densité de probabilité de présence des premiers états de ^{74}Ge (page 121).

Fig VI-10: Densité de probabilité de présence des premiers états de ^{76}Se (page 122).

Fig VI-11: Paramètres d'inertie de ^{74}Ge (page 122).

Fig VI-12: Paramètres d'inertie de ^{76}Se (page 123).

Fig VI-13: Surface d'énergie potentielle de ^{110}Cd correspondant aux calculs EVM (base 8 et G usuels) (page 123).

Fig VI-14: Coupes de la surface d'énergie potentielle de ^{110}Cd à $\gamma=0, 30, 60^\circ$ (page 124).

Fig VI-15: Comparaison Exp-Th des énergies des premiers niveaux (bande fondamentale G.S, β et γ) de ^{110}Cd (calcul EVM base 8 et G usuels) (page 124).

Fig VI-16: ^{110}Cd : Surface et coupes ($\gamma = 0, 30, 60^\circ$) d'énergie potentielle EVM à G+5% (base 8) (page 125).

Fig VI-17: Comparaison des spectres théoriques (à G:Th1 et G+5%:Th2) et expérimental de ^{110}Cd (page 125).

Fig VI-18: Comparaison des courbes $E(I)-E(0^+) = f[I(I+1)]$ associées aux premiers états ($I=0$ à 6) des bandes fondamentales (F) et β expérimentales (pointillés) et théoriques (à G en tiret-pointillés et G+5% en trait plein) dans ^{110}Cd (page 126).

Fig VI-19a: Densité de probabilité de présence des premiers états des bandes fondamentale (G.S), β , γ et $\beta\beta$ de ^{110}Cd (calcul EVM base 8, G usuels) (page 127).

Fig VI-19b: Densité de probabilité de présence des premiers états des bandes fondamentale (G.S), β , γ et $\beta\beta$ de ^{110}Cd (calcul EVM base 8, G+5%) (page 128).

Fig VI-20: Densité de probabilités de présence des premiers états de la bande fondamentale de ^{110}Cd (base 8, G usuels) (page 129).

Fig VI-21: Paramètres d'inertie de ^{110}Cd (en \hbar^2/MeV) pour les valeurs usuelles des intensités d'appariement (page 130).

Fig VI-22: Paramètres d'inertie de ^{110}Cd (en \hbar^2/MeV) pour les constantes d'appariement G+5% (page 130).

Fig VI-23: Coupes du lissage de $B_{\beta\beta}$ de ^{110}Cd à $\gamma = 0, 30, 60^\circ$ (page 131).

Fig VI-24: Cartes des gaps d'appariement (en MeV) de ^{110}Cd résultants du calcul aux valeurs usuelles des intensités de pairing (page 131).

Fig VI-25: Surface d'énergie potentielle aux valeurs usuelles des intensités d'appariement de ^{186}Pt (page 132).

Fig VI-26: Comparaison Exp-Th pour les énergies des premiers niveaux de ^{186}Pt (page 132).

Fig VI-27: Comparaison des spectres de basse énergie obtenus soit par le calcul complet (Th1) soit par le calcul où les quantités triaxiales sont déterminées par symétrie à partir des solutions axiales (Th2) (page 133).

Fig VI-28: Paramètres d'inertie (en \hbar^2/MeV) de ^{186}Pt aux G usuels (page 133).

Fig VI-29a: Comparaison des paramètres de masse $B_{\beta\beta}$ à $\gamma = 0^\circ$ de ^{186}Pt obtenus avec les constantes de pairing G, G-5% et G-10% (page 134).

Fig VI-29b: Comparaison des surfaces d'énergie potentielle de ^{186}Pt obtenues avec les constantes d'appariement G, G-5% et G-10% (page 134).

Fig VI-30: Spectres expérimental (Exp) et théoriques de ^{186}Pt pour les intensités d'appariement G, G-5% et G-10% (page 135).

Fig VI-31: Spectres de basse énergie expérimental et théorique à G-3% de ^{186}Pt (page 135).

Fig VI-32: Comparaison des densités de probabilités de présence de l'état 0_1^+ de ^{186}Pt dans les trois cas de valeurs d'intensité d'appariement (page 136).

Fig VI-33: Densité de probabilité de présence des premiers états des bandes fondamentale (G.S), β , γ et $\beta\beta$ de ^{186}Pt (à G-10%) (page 136).

Fig VI-34: Comparaison des cartes du paramètre de masse $B_{\beta\beta}$ obtenues pour les trois valeurs d'appariement dans ^{186}Pt (page 137).

Fig VI-35: Densité de probabilité de présence des premiers états des bandes fondamentale et vibrationnelles du ^{186}Pt à G-3% (page 138).

Fig VI-36: Récapitulatif des résultats en énergie obtenus pour les premiers niveaux des bandes fondamentale, β et γ dans les noyaux de ^{74}Ge , ^{76}Se , ^{110}Cd et ^{186}Pt . Dans le cas de ^{76}Se figurent dans l'ordre les bandes $\beta\beta$, γ , β et fondamentale. Pour ^{110}Cd nous avons reporté les résultats associées aux valeurs usuelles des constantes d'appariement; pour ^{186}Pt ceux à G (Th1) et G-3% (Th2) (page 139).

Résumé

Dans ce travail, nous construisons le hamiltonien quadrupolaire collectif de Bohr le plus général, de façon purement microscopique au travers d'une approximation de l'approche adiabatique de Hartree-Fock dépendant du temps. L'objectif de ce travail est d'obtenir une description quantitative des propriétés collectives de basse énergie dans les noyaux moyens et lourds, au moyen d'une interaction effective à deux corps (type Skyrme). Dans ce qui suit, nous décrivons comme étant de "basse énergie" les régimes dynamiques dans lesquels le mouvement collectif est adiabatique par rapport aux modes associés aux degrés de liberté individuels.

Dans la solution du problème nucléaire à N corps que nous proposons, nous avons fait les hypothèses suivantes:

- Existence d'un champ moyen à tout instant (les corrélations d'appariement sont introduites de façon simplifiée au moyen d'une force de séniorité).
- Existence de quelques variables collectives dont la variation temporelle contient toute la dynamique.
- Adiabaticité du mouvement collectif.

Ce travail constitue donc une formulation microscopique et une méthode de résolution praticable du Modèle Unifié de Bohr et Mottelson.

Les spectres de basse énergie ainsi calculés pour quatre noyaux transitionnels (^{74}Ge , ^{76}Se , ^{110}Cd , ^{186}Pt) sont en excellent accord avec les données expérimentales.

Mots clef

- Théories Physiques
- Physique Nucléaire

