





UNIVERSITÉ PARIS-SUD

École Doctorale 517 : Particules, Noyaux et Cosmos Laboratoire CEA,DAM,DIF

DISCIPLINE : PHYSIQUE NUCLÉAIRE THÉORIQUE

Thèse de doctorat

Soutenue le 30 Septembre 2014 par

Caroline Robin

Méthode de mélange de configurations multiparticules-multitrous complètement auto-cohérente - Applications à quelques noyaux légers -

Composition du jury :

Directeur de thèse :	Dr. Marcella Grasso	Chargé de recherche CNRS, IPN Orsay		
Co-directeur de thèse :	Dr. Nathalie Pillet	Ingénieur-chercheur CEA,DAM,DIF		
Président :	Dr. Nguyen Van Giai	Directeur de recherche émérite CNRS, IPN Orsay		
Rapporteurs :	Dr. Michael Bender	Directeur de recherche CNRS, CENBG Bordeaux		
	Prof. Marek Ploszajczak	Professeur, directeur de recherche CEA, GANIL Caen		
Examinateurs :	Dr. Frédéric Nowacki	Directeur de recherche CNRS, IPHC Strasbourg		
	Prof. Vladimir Zelevinsky	Professeur, Michigan State University, USA		

Table des matières

1	Introduction	1
2	Formalisme de la méthode de mélange de configuration multiparticules-	
	multitrous	2
	2.1 Première équation variationnelle : les coefficients du mélange	4
	2.2 Seconde équation variationnelle : les orbitales individuelles	4
3	Méthode de résolution	5
4	Application à la description des noyaux de la couche sd	7
	4.1 Propriétés de l'état fondamental	7
	4.2 Description des états excités	12
5	Premières applications aux réactions	16
	5.1 Diffusion inélastique d'électrons vers états discrets de la cible	16
	5.2 Diffusion inélastique de protons vers états discrets de la cible	17
6	Conclusion et perspectives	18

1 Introduction

Le noyau atomique est un système mésoscopique bien particulier qui, selon le nombre de protons et neutrons qu'il contient, peut manifester des comportements divers et variés. Si certaines propriétés des noyaux peuvent être expliquées par le modèle de particules indépendantes, la manifestation de phénomènes tels que la déformation, la superfluidité ou les excitations collectives, sont la preuve de l'existence de corrélations entre les nucléons. De nombreuses méthodes ont été développées au cours du temps afin de décrire au mieux la structure des noyaux. Aujourd'hui un gros effort est fait pour tenter de décrire ces systèmes à partir des premiers principes de la physique (de façon *ab-initio*). Ce type de méthodes est cependant essentiellement restreint pour le moment à la description des noyaux légers. Le reste de la table de masse est donc en général traité par des approches plus phénoménologiques, les plus utilisées étant : le modèle en couches et les approches basées sur la théorie de champ moyen [1].

La théorie de champ-moyen (Hartree-Fock) est basée sur l'idée qu'en première approximation, les nucléons peuvent être considérés comme évoluant indépendamment les uns des autres dans un potentiel moyen, créé par les autres nucléons. Les particules sont donc "sur des orbites" déterminées par ce potentiel moyen, lui même dépendant de la densité de nucléons dans le noyau (donc des orbitales), menant à un problème auto-cohérent. On obtient ainsi les meilleurs états à une particule (au sens variationnel) pouvant être obtenus avec une fonction d'onde de type déterminant de Slater. Certains types de corrélations peuvent ensuite être traitées dans un deuxième temps, en brisant certaines symétries qui doivent ensuite être restaurées par des techniques de projection.

L'approche du modèle en couches au contraire, considère une fonction d'onde capable de traiter explicitement tout type de corrélations à la fois, en conservant explicitement les symétries importantes du système. Le champ-moyen générant les orbitales individuelles est cependant considéré schématique et gelé. De plus, afin de rendre le problème soluble en pratique, les états à un nucléon sont séparés en un espace de valence restreint actif et des orbitales inertes complètement occupées (cœur) ou vides. L'utilisation d'une interaction renormalisée est nécessaire pour compenser cette réduction de l'espace. La diagonalisation du Hamiltonien dans l'espace des états à N-corps résultant de cette troncature permet d'obtenir directement les états et énergies nucléaires.

La méthode de mélange de configurations multiparticules-multitrous présentée ici vise à réconcilier les philosophies de ces deux approches, de façon à traiter sur un pied d'égalité tous types de corrélations nucléaires de longue portée, sans brisure de symétries, et de façon complètement auto-cohérente. Cette méthode est basée sur un principe variationnel qui détermine à la fois les coefficients d'expansion de la fonction d'onde et les orbitales individuelles. Ces dernières évoluent donc en fonction du contenu en corrélation du système. Ce type d'approches est déjà communément utilisé dans d'autres domaines de la physique comme la physique atomique ou la chimie quantique [2, 3]. L'adaptation de cette méthode au traitement des systèmes nucléaires présente cependant quelques difficultés additionnelles. En particulier, contrairement à l'interaction Coulombienne, la force agissant entre les nucléons est à l'heure actuelle toujours mal connue. De plus, la présence de deux types de particules (protons et neutrons) fait du noyau atomique un système très collectif. La prise en compte d'un grand nombre de configurations à N-corps est donc nécessaire pour le décrire, ce qui rend les applications numériques plus difficiles. Le développement de la méthode de mélange de configuration multiparticulesmultitrous a démarré à CEA,DAM,DIF au début des années 2000. Jusqu'à présent les applications effectuées n'ont pas utilisé le formalisme complet de la méthode. Par exemple, une étude systématique des noyaux de la couche sd a été effectuée en considérant des orbitales Hartree-Fock gelées [4, 5]. Un travail plus ancien a appliqué le formalisme de la méthode mp-mh à la description des corrélations d'appariement dans les noyaux d'étain en effectuant une approximation drastique sur l'équation déterminant les orbitales [6]. Le but de ce travail de thèse est de continuer le développement de la méthode de mélange de configurations mp-mh afin de pouvoir appliquer le formalisme complet à la description des noyaux. Après développements formels et numériques nous sommes maintenant capables d'appliquer la méthode complètement autocohérente à quelques noyaux légers. Les applications faites ici se concentrent sur la description de noyaux des couches p et sd, utilisant l'interaction de Gogny D1S [7] dépendante de la densité.

Cette synthèse est organisée de la façon suivante. Dans un premier temps, nous rappelons le formalisme de la méthode de mélange de configurations mp-mh dans le cas où le Hamiltonien contient une interaction à deux corps dépendant de la densité du système. Nous présentons ensuite les méthodes employées afin de résoudre les équations. Finalement nous présentons quelques résultats associés à la description de la structure des noyaux de la couche sd, ainsi que des premières applications à l'étude des réactions.

2 Formalisme de la méthode de mélange de configuration multiparticules-multitrous

Dans la méthode mp-mh, la fonction d'onde $|\psi\rangle$ décrivant l'état du noyau est prise comme une superposition de déterminant de Slater $|\phi_{\alpha}\rangle$,

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} A_{\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle \equiv \sum_{\alpha_{\pi} \alpha_{\nu}} A_{\alpha_{\pi} \alpha_{\nu}} |\phi_{\alpha_{\pi}}\rangle \otimes |\phi_{\alpha_{\nu}}\rangle , \qquad (1)$$

où chaque configuration $|\phi_{\alpha}\rangle$ est un produit de déterminants proton et neutron $|\phi_{\alpha\pi}\rangle \otimes |\phi_{\alpha\nu}\rangle$, et représente une excitation multiparticules-multitrous (mp-mh) construite à partir d'un état de référence $|\phi\rangle$ obtenu en remplissant les orbitales les plus basses avec les A = Z + N nucléons du système (cf Fig. (1)). C'est-à-dire,

$$|\phi_{\alpha}\rangle = \prod_{i}^{M_{\alpha}} \left(a_{p_{i}}^{\dagger} a_{h_{i}} \right) |\phi\rangle \qquad \text{où}, \qquad |\phi\rangle = \prod_{i=1}^{A} a_{i}^{\dagger} |0\rangle .$$
(2)

Dans l'eq. (2), les indices h (resp. p) dénotent les états "hole" (trous) (resp. "particule") qui sont les états occupés (resp. vides) dans la configuration $|\phi\rangle$. L'état occupé le plus haut est le niveau de Fermi. $M_{\alpha} = M_{\alpha_{\pi}} + M_{\alpha_{\nu}}$ est appelé l'ordre d'excitation de la configuration $|\phi_{\alpha}\rangle$ et correspond au nombre d'excitations mp-mh à appliquer à $|\phi\rangle$ pour obtenir la configuration



 $|\phi_{\alpha}\rangle$. La figure (1) montre des exemples de configurations de 0p-0h (ϕ) à 2p-2h.

FIGURE 1: Exemples d'excitations multiparticules-multitrous.

Puisque les applications de la méthode sont effectuées avec l'interaction de Gogny D1S, nous dérivons les équations de la méthode mp-mh en partant d'un Hamiltonien à deux corps dépendant de la densité ¹. On a donc,

$$\mathcal{E}[\Psi] = \langle \Psi | \hat{H}[\rho] | \Psi \rangle - \lambda (\langle \Psi | \Psi \rangle - 1) , \qquad (3)$$

où λ est un multiplicateur de Lagrange associé à la condition de normalisation de $|\Psi\rangle$, ρ est la densité à un-corps du système, et $\hat{H}[\rho]$ est le "Hamiltonien" à deux-corps,

$$\hat{H}[\rho] = \hat{T} + \hat{V}[\rho] = \sum_{ij} T_{ij} a_i^{\dagger} a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij|V[\rho]|\tilde{kl}\rangle a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_l a_k , \qquad (4)$$

où \hat{T} est l'énergie cinétique du système, et $\langle ij|V[\rho]|\tilde{k}l\rangle = \langle ij|V[\rho]|kl\rangle - \langle ij|V[\rho]|lk\rangle$ est un élément anti-symétrisé de l'interaction.

La minimisation de $\mathcal{E}[\Psi]$ par rapport aux coefficients du mélange et des orbitales individuelles,

¹En physique nucléaire, le fait de considérer les nucléons comme ponctuels et sans structure interne génère l'apparition de forces à A-corps $V^{2N} > V^{3N} > V^{4N}$..., où V^{IN} dénote une force à I-corps. La force de Gogny est une interaction phénoménologique à deux corps dépendant de la densité du système. Cette dépendance en densité permet de simuler l'effet de forces à *M*-corps ($M \ge 3$).

mène au système d'équations couplées suivant,

$$\begin{cases} \delta \mathcal{E}[\Psi]_{\{A_{\alpha}^{*}\}} = 0\\ \delta \mathcal{E}[\Psi]_{\{\varphi_{i}^{*}\}} = 0 , \end{cases}$$

$$(5)$$

où $\delta \mathcal{E}[\Psi]_{\{A^*_{\alpha}\}}$ et $\delta \mathcal{E}[\Psi]_{\{\varphi^*_i\}}$ sont les variations au premier ordre de l'énergie par rapport aux coefficients et orbitales respectivement.

2.1 Première équation variationnelle : les coefficients du mélange

La première équation du système (5) mène à l'équation aux valeurs propres suivante,

$$\sum_{\beta} A_{\beta} \langle \phi_{\alpha} | \hat{H}[\rho] + \hat{\mathcal{R}}[\rho] | \phi_{\beta} \rangle = \lambda A_{\alpha} , \qquad (6)$$

représentant la diagonalisation d'une matrice Hamiltonienne "effective" $\mathcal{H}[\rho] = H[\rho] + \mathcal{R}[\rho]$ dans l'espace des configurations à A-corps. Les termes de réarrangements,

$$\hat{\mathcal{R}}[\rho] = \int d^3 r \langle \Psi | \frac{\delta V[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} | \Psi \rangle \hat{\rho}(\vec{r}) , \qquad (7)$$

émergent de la dépendance en densité de l'interaction et font de l'équation (6) une équation non-linéaire.

Si toutes les configurations possibles (respectant la conservation des symétries) sont incluses dans l'équation (1), la diagonalisation de $\widetilde{\mathcal{H}}[\rho]$ est numériquement infaisable pour la plupart des noyaux. On est donc obligé de restreindre les configurations à un sous-espace \mathcal{P} de l'espace à A-corps $\mathcal{S} = \mathcal{P} + \mathcal{Q}$. Plusieurs critères de sélection des déterminants de Slater sont en principe possibles. Ces derniers peuvent par exemple être sélectionnés en fonction de leur ordre d'excitation, leur énergie d'excitation ou être restreints à un certain espace de valence comme en modèle en couches. Il faut cependant être prudent à la conservation de la symétrie sphérique qui *a priori* n'est pas assurée avec une troncation en énergie d'excitation. Dans tous les cas, la diagonalisation de $\widetilde{\mathcal{H}}[\rho]$ dans \mathcal{P} laisse \mathcal{Q} complètement ignoré. Dans le but de compenser en partie cette troncation, nous résolvons la seconde équation variationnelle.

2.2 Seconde équation variationnelle : les orbitales individuelles

Minimisons maintenant la fonctionnelle énergie $\mathcal{E}[\Psi]$ par rapport aux états individuelles. Imposer la variation $\delta \mathcal{E}[\Psi]_{\{\varphi_i^*\}}$ de l'enérgie d'être égale à zéro, mène à l'équation de champ-moyen généralisée suivante,

$$\left[\hat{h}[\rho,\sigma],\hat{\rho}\right] = \hat{G}[\sigma] . \tag{8}$$

Dans l'eq. (8), ρ est la matrice densité à un corps construite avec l'état corrélé,

$$\rho_{ij} = \langle \Psi | a_j^{\dagger} a_i | \Psi \rangle , \qquad (9)$$

et σ est la matrice de corrélation à deux-corps,

$$\sigma_{ijkl} = \langle \Psi | a_i^{\dagger} a_k^{\dagger} a_l a_j | \Psi \rangle - \rho_{ji} \rho_{lk} + \rho_{jk} \rho_{li} .$$
⁽¹⁰⁾

Le Hamiltonien de champ-moyen,

$$h[\rho,\sigma]_{ij} = T_{ij} + \sum_{kl} \langle ik|V[\rho]||\tilde{j}l\rangle \rho_{lk} + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle kl| \frac{\partial \hat{V}[\rho]|}{\partial \rho_{ji}} |\tilde{mn}\rangle \rho_{mk} \rho_{nl} + \frac{1}{4} \sum_{klmn} \langle kl| \frac{\partial \hat{V}[\rho]|}{\partial \rho_{ji}} |\tilde{mn}\rangle \sigma_{km,ln} , \qquad (11)$$

représente le champ-moyen le plus général qui puisse être construit à partir d'une interaction à deux corps dépendant de la densité. Il est en effet construit avec la densité à un corps corrélée ρ et dépend également explicitement des corrélations à deux corps σ via les termes de réarrangements. Il est en ce sens complètement cohérent avec les corrélations introduites dans la fonction d'onde et constitue en ce sens une généralisation du champ moyen Hartree-Fock construit avec une densité de déterminant Slater.

Enfin, le terme source,

$$G_{ij}(\sigma) = \frac{1}{2} \sum_{klm} \left[\langle km | V[\rho] | \widetilde{jl} \rangle \sigma_{ki,ml} - \langle ki | V[\rho] | \widetilde{ml} \rangle \sigma_{jl,km} \right] , \qquad (12)$$

contient l'effet des corrélations (dynamiques) allant au-delà de ce champ-moyen.

Il est en fait possible de montrer que cette équation peut être obtenue à partir du formalisme des fonctions de Green dans la limite des temps égaux. Notons que l'eq. (8) serait automatiquement satisfaite si $|\Psi\rangle$ était la fonction d'onde exacte du système. Cependant, la restriction des configurations à A-corps au sous-espace \mathcal{P} ne permet à la fonction d'onde $|\Psi\rangle$ de n'explorer qu'une partie de l'espace de Hilbert. Il devient alors nécessaire de résoudre l'équation (8), qui permettra de trouver les meilleures orbitales à utiliser dans cet espace restreint et ainsi de compenser en partie cette troncature. Cet argument est illustré dans ce qui suit.

3 Méthode de résolution

Étant donné que les coefficients $\{A_{\alpha}\}$ dépendent du choix d'orbitales individuelles $\{a_i^{\dagger}\}$, et vice-versa, les deux équations variationnelles (5) sont couplées et peuvent être résolues en utilisant la procédure itérative suivante. Partant d'un ensemble d'orbitales issues d'un calcul Hartree-Fock, on construit la base de configurations à A-corps et résout numériquement la première équation variationnelle (6). Les coefficients du mélange de la fonction d'onde qui en résultent sont utilisés pour calculer la densité ρ ainsi que la matrice de corrélation σ . Il est ensuite possible de résoudre la seconde équation variationnelle (8) pour en déduire les états à une particule optimaux. Ces nouvelles orbitales sont ensuite utilisées pour construire les nouveaux déterminants de Slater et résoudre l'équation (6), etc... Ce processus est répété jusqu'à convergence des états individuels et des coefficients du mélange (ou de façon équivalente des densités à un et deux corps).

Si la résolution de l'équation (6) est non ambigüe (diagonalisation avec algorithme de Lanczos), la résolution de l'équation (8) est moins évidente. On montre en fait que cette dernière équation peut se réécrire sous la forme d'une équation homogène,

$$\left[h[\rho,\sigma] - Q[\rho,\sigma],\rho\right] = 0 , \qquad (13)$$

dans laquelle le champ-moyen $h[\rho, \sigma]$ est contraint par un "champ de corrélations" $Q[\rho, \sigma]$ relié directement au terme source $G[\sigma]$ et à la densité à un corps ρ via,

$$Q_{\mu\nu} = \begin{cases} \frac{G_{\mu\nu}[\sigma]}{n_{\nu} - n_{\mu}} & \text{si } n_{\nu} \neq n_{\mu} \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$
(14)

où n_{μ} désigne les valeurs propres de ρ . La résolution de (13) revient alors à chercher la base diagonalisant simultanément $\tilde{h}[\rho, \sigma] \equiv h[\rho, \sigma] - Q[\rho, \sigma]$ et ρ . L'équation aux orbitales constitue ainsi elle-même un problème auto-cohérent à résoudre au sein de la procédure itérative globale. Le processus de convergence devient donc doublement itératif et est illustré sur la figure (2).



FIGURE 2: Procédure de convergence globale.

4 Application à la description des noyaux de la couche sd

On applique maintenant le formalisme de la méthode mp-mh à la description des noyaux de la couche sd pairs-pairs, caractérisés par un nombre de protons et neutrons $10 \leq (Z, N) \leq 18$. On s'intéresse d'abord à la description de l'état fondamental en prenant la chaîne des Néons comme exemple typique, puis on présente quelques résultats systématiques associés à la description des états excités. Dans cette étude, les déterminants de Slater inclus dans la fonction d'onde (1) sont sélectionnés en définissant un coeur d'¹⁶O complètement occupé et un espace de valence correspondant à la couche sd (voir figure 3). Toutes les excitations possibles de nucléons dans cet espace de valence sont considérées. Il est important de rappeler que la résolution de la seconde équation variationnelle va permettre de coupler l'espace de valence au reste de la base d'orbitales. Le coeur et les orbitales initialement occupées ne restent ainsi pas inertes, et leur probabilités d'occupation s'écartent de la valeur initiale 0 et 1.



FIGURE 3: Séparation de la base d'orbitales individuelles. La figure illustre le case du ²⁸Si.

4.1 Propriétés de l'état fondamental

Les propriétés de déformation des noyaux de la couche *sd* prédites par les approches de type champ-moyen sont très variées. Par exemple, la figure (4) montre les courbes et surfaces d'énergie potentielle (PEC et PES) pour les différents isotopes de Néon obtenus avec l'approche Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB) utilisant la même interaction de Gogny D1S. Notons la transition de forme sphérique à déformée lorsque le nombre de neutrons diminue. En effet les Néons les plus lourds ($^{28-26}$ Ne) sont prédits sphériques alors que les plus légers sont prédits déformés (24 Ne) oblate ou prolate ($^{20-22}$ Ne).

Matrices de corrélation

Les propriétés de déformation des noyaux de la couche sd devraient se refléter dans l'intensité



FIGURE 4: Surfaces et courbes (en noir) d'énergie potentielle obtenues par calcul HFB pour les isotopes de Néon. On observe une évolution de la forme sphérique vers des formes déformées lorsque le nombre de neutrons diminue.

de leur matrice de corrélation à deux corps σ . La figure (5) montre les corrélations calculées pour trois isotopes de Néon (à l'itération globale N = 1). La matrice de corrélations entre neutrons apparait beaucoup plus fragmentée lorsque le nombre de neutrons diminue. Ceci est en accord avec l'évolution de la forme des noyaux précédemment discutée. D'autre part, les corrélations entre protons en neutrons apparaissent très importantes dans les Néons les plus légers, où le nombre de protons et de neutrons deviennent similaires. En effet dans les noyaux N = Z les deux types de nucléons occupent des orbitales identiques et donc ont un recouvrement spatial plus important.



FIGURE 5: Corrélations proton σ^{π} (à gauche), neutron σ^{ν} (au centre) et proton-neutron $\sigma^{\pi\nu}$ (à droite), pour ²⁸Ne, ²⁴Ne et ²⁰Ne. Les matrices de corrélations sont calculées à l'itération globale N = 1.

Terme source $G[\sigma]$

Le terme source $G[\sigma]$ introduit des couplages entre les états individuels de l'espace de valence et ceux du reste de la base, caractérisés par les mêmes moment angulaire j et parité π . Comme nous utilisons $N_0 = 9$ couches majeures d'oscillateurs pour développer les états individuels, la sous-couche $0d_{5/2}$ peut se coupler aux sous-couches vides $1d_{5/2}$, $2d_{5/2}$ et $3d_{5/2}$. Il en est de même pour les sous-couche $d_{3/2}$. En plus des orbitales vides 2s, 3s et 4s la sous-couche 1speut se coupler aux états 0s du coeur complètement occupés. On obtient ainsi un total de 10 couplages non-nuls pour chaque type de nucléons. Les valeurs obtenues sont montrées dans le tableau (1) pour trois isotopes de Néon.

Sous-couches (α_k, α_l)	$^{28}\mathrm{Ne}$	24 Ne	20 Ne
$(0d_{\frac{5}{2}}, 1d_{\frac{5}{2}})$	0.0643	0.0328	0.0432
$(0d_{\frac{5}{2}}, 2d_{\frac{5}{2}})$	0.253	0.439	0.593
$(0d_{\frac{5}{2}}, 3d_{\frac{5}{2}})$	0.299	0.272	0.405
(1s, 0s)	0.263	0.281	1.248
(1s, 2s)	0.0839	0.0830	0.526
(1s, 3s)	0.0337	0.0314	0.194
(1s, 4s)	0.0523	0.0414	0.244
$(0d_{\frac{3}{2}}, 1d_{\frac{3}{2}})$	0.0463	0.0795	0.277
$(0d_{\frac{3}{2}}, 2d_{\frac{3}{2}})$	0.0198	0.0205	0.308
$(0d_{\frac{3}{2}}, 3d_{\frac{3}{2}})$	0.0303	0.0748	0.340

(a) Couplages proton $|G_{\alpha_k,\alpha_l}^{\pi}|$ (en MeV).

Sous-couches (α_k, α_l)	$^{28}\mathrm{Ne}$	²⁴ Ne	²⁰ Ne
$(0d_{\frac{5}{2}}, 1d_{\frac{5}{2}})$	0.0267	0.0681	0.0247
$(0d_{\frac{5}{2}}, 2d_{\frac{5}{2}})$	0.00578	0.177	0.610
$(0d_{\frac{5}{2}}, 3d_{\frac{5}{2}})$	0.0128	0.265	0.391
(1s, 0s)	0.304	1.411	1.239
(1s, 2s)	0.111	0.573	0.454
(1s, 3s)	0.0447	0.0143	0.219
(1s, 4s)	0.0430	0.350	0.230
$\overline{(0d_{\frac{3}{2}}, 1d_{\frac{3}{2}})}$	0.293	0.247	0.235
$(0d_{\frac{3}{2}}, 2d_{\frac{3}{2}})$	0.0613	0.144	0.319
$\overline{(0d_{\frac{3}{2}}, 3d_{\frac{3}{2}})}$	0.252	0.276	0.331

(b) Couplages neutron $|G^{\nu}_{\alpha_k,\alpha_l}|$ (en MeV).

TABLE 1: Terme source proton (en haut) et neutron (en bas) $|G_{\alpha_k,\alpha_l}^{\tau}|$ ($\tau = \pi, \nu$) (en MeV) à l'itération globale N = 1.

Clairement certaines valeurs du terme source sont non négligeables. En particulier, le couplage entre les couches 1s et 0s (en gras) apparaît systématiquement élevé. Les corrélations dynamiques au-delà du champ-moyen ont donc tendance à vouloir mélanger ces couches de façon drastique. Le terme source proton apparaît généralement plus fort lorsque le nombre de neutron N diminue. Ceci est en accord avec le comportement des matrices de corrélations protons et proton-neutron observé précédemment. Concernant le terme source neutron, l'interprétation est moins claire. Par exemple, le couplage entre la $0d_{3/2}$ et la $1d_{3/2}$ apparaît plus important dans les Néons les plus lourds. Cela laisse suggérer que $G[\sigma]$ pourrait dépendre de l'occupation des couches. En effet, les orbitales $0d_{3/2}$ sont davantage occupées dans le ²⁸Ne que dans par exemple le ²⁰Ne. Comme le champ de corrélations $Q[\rho, \sigma]$ est obtenu en divisant le terme source par la différence des occupations des couches cette tendance devrait être compensée. En effet les valeurs de e.g. $|Q_{0d_{3/2},1d_{3/2}}|$ s'élèvent à 0.550, 4.09 et 3.66 pour le ²⁸Ne, ²⁴Ne et ²⁰Ne respectivement.

Energie de corrélation

Le tableau (2) montre l'énergie de corrélation, définie comme la différence de l'énergie E_0 de l'état de corrélé avec l'énergie d'un état Hartree-Fock sphérique E_{HF} ,

$$E_{corr} = E_{HF} - E_0 . aga{15}$$

Afin de quantifier l'effet de l'optimisation des orbitales, on montre les résultats à deux niveaux : après avoir résolu la première équation variationnelle i.e. en itérant la diagonalisation de $\mathcal{H}[\rho,\sigma] = H[\rho] + R[\rho,\sigma]$ jusqu'à convergence des poids des configurations construites sur des orbitales Hartree-Fock; et après avoir résolu le problème complètement auto-cohérent, lorsque les deux équations variationnelles sont satisfaites, et les orbitales reflètent l'effet des corrélations du système.

	1^{ere} équation seule	auto-cohérence complète
²⁰ Ne	11.54	13.30
²² Ne	10.90	12.12
²⁴ Ne	6.23	6.98
²⁶ Ne	0.88	1.55
²⁸ Ne	1.28	1.58

TABLE 2: Energie de corrélation $E_{corr} = E_{HF} - E_0$ pour les isotopes de Néon, en MeV.

Comme attendu du comportement de σ et $G[\sigma]$, l'énergie de corrélation des Néons les plus légers est drastiquement plus élevée que celle des Néons les plus lourds. L'optimisation des orbitales permet de gagner jusqu'à 1.76 MeV dans le ²⁰Ne.

Composition de la fonction d'onde

Afin d'obtenir une description précise du contenu en corrélation de l'état fondamental, il est nécessaire d'analyser la composition de la fonction d'onde en termes de poids des différentes configurations. Le tableau (3) contient les composantes principales de l'état fondamental. Lorsque l'équation aux orbitales n'est pas résolue (troisième colonne), les configurations sont construites sur des orbitales Hartree-Fock. Lorsque l'équation aux orbitales est résolue (quatrième colonne) les poids indiqués sont ceux des configurations construites sur la base optimisée finale.

Avant optimisation des orbitales, l'état Hartree-Fock 0p-0h apparaît toujours comme la composante majeure, et absorbe presque la totalité de la fonction d'onde dans les noyaux pauvres en corrélations (> 86% in ²⁸Ne). Le reste est distribué sur des configurations de type 1p-1h et 2p-2h en majorité. La transformation des états à une particule en fonction des corrélations du système modifie considérablement la structure de la fonction d'onde. La configuration 0p-0h de référence subit la variation la plus importante. Cette composante décroît de quelques pourcents dans les isotopes de Néon les plus lourds. La réduction est plus drastique dans les isotopes les plus légers comme le ²⁰Ne pour lequel le poids de l'état de référence passe de ~ 43 à ~ 33%. Enfin, notons que le poids restant après cette réduction systématique ne semble pas être transféré vers une autre configuration particulière, mais semble plutôt être réparti de manière équitable sur un grand nombre de composantes, suggérant une augmentation de la collectivité de la fonction d'onde.

Noyau	Configuration	Eq. 1	auto-cohérence
		seule	complète
	0p-0h	84.11	83.63
28 Ne	$(1p-1h)_{\pi} (0d_{5/2} \to 1s)$	3.19	2.85
	$(1p-1h)_{\nu} \ (1s \to 0d_{3/2})$	4.04	4.50
	0p-0h	70.88	69.62
$^{26}N_{ m O}$	$(1p-1h)_{\nu} (1s \to 0d_{3/2})$	7.28	7.59
ne	$(1p-1h)_{\nu} \ (0d_{5/2} \to 0d_{3/2})$	4.87	5.20
	$(2p-2h)_{\pi\nu} (1s^{\nu} \otimes 0d^{\pi}_{5/2} \to 0d^{\nu}_{3/2} \otimes 1s^{\pi})$	2.75	2.38
	0p-0h	53.45	49.41
^{24}No	$(1p-1h)_{\nu} \ (0d_{5/2} \to 1s)$	17.48	17.81
116	$(1p-1h)_{\nu} \ (0d_{5/2} \to 0d_{3/2})$	6.27	6.34
	$(2p-2h)_{\nu} \ (0d_{5/2} \to 1s)$	6.56	7.54
	0p-0h	43.05	33.05
	$(2p-2h)_{\pi\nu} (0d^{\pi}_{5/2} \otimes 0d^{\nu}_{5/2} \to 1s^{\pi} \otimes 1s^{\nu})$	6.80	8.86
	$(1p-1h)_{\pi} (0d_{5/2} \to 0d_{3/2})$	8.26	8.65
^{20}Ne	$(1p-1h)_{\nu} \ (0d_{5/2} \to 0d_{3/2})$	8.30	8.58
110	$(1p-1h)_{\pi} \ (0d_{5/2} \to 1s)$	4.44	5.08
	$(1p-1h)_{\nu} \ (0d_{5/2} \to 1s)$	4.50	5.13
	$(2p-2h)_{\pi} (0d_{5/2} \otimes 0d_{5/2} \rightarrow 1s \otimes 1s)$	1.89	$2.\overline{46}$
	$(2p-2h)_{\nu} \ (0d_{5/2} \otimes 0d_{5/2} \to 1s \otimes 1s)$	1.95	2.52

TABLE 3: Composantes principales de l'état fondamental des Néons, exprimées en pourcents(%).

4.2 Description des états excités

On présente ici quelques résultats concernant la description des états excités. Lorsque seule la première équation variationnelle est résolue, on itère la diagonalisation de la matrice Hamiltonienne $\mathcal{H}[\rho_{gs}, \sigma_{gs}] = H[\rho_{gs}] + R[\rho_{gs}, \sigma_{gs}]$, où ρ_{gs} et σ_{gs} sont les densités de l'état fondamental corrélé. Une fois que cette procédure a convergé, on extrait plusieurs états propres de $\mathcal{H}[\rho_{gs}, \sigma_{gs}]$ qui correspondent aux états excités du noyau. Lorsque les deux équations variationnelles sont résolues, on applique le processus de convergence décrit dans la section (3) pour l'état fondamental. Les orbitales sont donc optimisées en tenant compte des corrélations de l'état fondamental σ_{gs} . Une fois la convergence atteinte, on extrait de même plusieurs états propres de $\mathcal{H}[\rho_{qs}, \sigma_{qs}]$.

Energies d'excitation Les énergies d'excitation E_N^* sont définies comme la différence entre l'énergie de l'état excité N et l'énergie de l'état fondamental 0. C'est-à-dire,

$$E_N^* = E_N - E_0 = \langle \Psi_N | H[\rho_{gs}] | \Psi_N \rangle - \langle \Psi_0 | H[\rho_{gs}] | \Psi_0 \rangle \quad . \tag{16}$$

La figure (6) montre les énergies d'excitation du premier état excité (2_1^+) avant et après optimisation des orbitales, en comparaison avec les résultats expérimentaux. Dans le premier cas, un bon accord entre théorie et expérience est obtenu pour la plupart des noyaux même si une sous-estimation systématique semble apparaître. Une surestimation d'environ 760 et 590

keV apparaît pour les noyaux de ²⁸Si et ³²S respectivement. Concernant les noyaux miroirs ³⁰S et ³⁰Si, leur spectre d'excitation théorique est globalement surestimé d'environ $\sim 1.5 - 2$ MeV. Ce comportement a déjà été identifié dans une étude antérieure [4]. Une analyse a montré que ce décalage global est en fait dû à des éléments incontrôlés de la force de Gogny utilisée. Cette interaction a en effet été introduite au départ pour effectuer des calculs de type champmoyen, et éventuellement quelques extensions raisonnables. Elle n'a donc pas été contrainte pour le traitement de tous types de corrélations comme introduit par la méthode mp-mh. Cependant, comme illustré dans la section précédente, l'optimisation des orbitales modifie le spectre des énergies individuelles et en particulier la taille des gaps autour du niveau de Fermi. La résolution de la seconde équation variationnelle devrait donc modifier la valeur des éléments de matrice apparaissant dans la matrice Hamiltonienne à diagonaliser, et donc avoir un impact sur la spectroscopie de basse énergie. En effet, les énergies d'éxcitations des noyaux $^{28}\mathrm{Si}$ et $^{32}\mathrm{S},$ obtenues après transformation des états à une particule, sont abaissées de ~ 570 et ~ 760 keV respectivement, ce qui amène à un bon accord avec l'expérience. De même, les énergies d'excitation des noyaux ³⁰S et ³⁰Si sont abaissées de $\sim 600 - 700$ keV. Cet effet est très encourageant mais reste insuffisant pour atteindre les valeurs expérimentales. Le reste de l'écart peut maintenant être plus sûrement attribué à l'interaction de Gogny utilisée. Les résultats concernant les autres noyaux de la couche sd sont également améliorés et apparaissent plus centrés autour de l'expérience. Globalement la différence moyenne à l'expérience varie de 373 à 235 keV après optimisation des orbitales, et la déviation standard est modifiée de 517 à 323 keV.



FIGURE 6: Energies d'excitation des états 2_1^+ comparées à l'expérience. Les données expérimentales sont extraites de [8]. Les résultats sont exprimés en MeV.

Probabilités de transitions quadripolaires électriques Intéressons-nous maintenant aux propriétés électromagnétiques des noyaux de la couche sd. En particulier, nous avons calculé les probabilités de transition $2_1^+ \rightarrow 0_1^+$ par émission d'un photon de type E2. Celles-ci sont représentées sur la figure (7) avant et après optimisation des orbitales et comparées à l'expérience.



FIGURE 7: Comparaison des probabilités de transition quadripolaires électriques $B(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$ exprimées en e^2 .fm⁴. Les données expérimentales (en noir) proviennent de [8]. Les résultats avant et après transformation des orbitales apparaissent en vert et bleu respectivement.

Avec des orbitales Hartree-Fock pures, les probabilités de transition calculées avec mp-mh (ronds verts) sont très largement sous-estimées par rapport aux valeurs expérimentales. Ce comportement est bien connu des études de modèle en couches [9] et est dû à la restriction des configurations à la couche sd qui n'est pas capable de reproduire toute la collectivité quadripolaire du système. On note cependant que, quelques cas particuliers mis à part, les tendances expérimentales sont globalement bien reproduites.

Un des buts de cette étude était de quantifier l'effet de l'équation aux orbitales sur les probabilités de transition B(E2). En effet, en couplant l'espace de valence au reste de la base d'orbitales, la résolution de cette équation permet en principe de prendre en compte des configurations construites sur l'ensemble de la base d'états Hartree-Fock initiale. Les probabilités de transition résultantes sont montrées en bleu sur la figure (7). Comme espéré, on note une augmentation systématique des B(E2). Cette augmentation reste cependant faible pour la majorité des noyaux. L'effet le plus conséquent apparaît dans le ³⁰Si où un facteur ~ 1.7 est gagné. Les noyaux ²⁸Si et ³²S sont affectés d'un facteur ~ 1.3.

Afin de comprendre ce comportement il est important de déterminer quelles sont les configurations manquantes de la fonction d'onde pour une bonne description des B(E2). L'action de l'opérateur de transition E2 sur un état J^{π} est capable de générer des excitations caractérisées par une différence de nombre quantique principal $\Delta N_{shell} = 0, 1, 2 \ (0, 1, 2\hbar\omega)$. Les excitations $0\hbar\omega$ sont explicitement traitées dans la couche sd et les excitations $1\hbar\omega$ (1p-1h entre sd et les couches voisines) sont interdites par les règles de sélection. Les excitations $2\hbar\omega$ sont cependant clairement manquantes lorsque le mélange de configurations est restreint à la couche sd. De telles excitations peuvent être de différents types :

- Excitations 1p-1h entre couches différant par $\Delta N_{shell} = 2$.
 - Les plus importantes étant les excitations de sd vers sdg ou de 0s vers sd. Comme constaté précédemment, les couches 0s et sdg sont largement influencées par le terme source G[σ]. De plus les excitations 1p-1h sont des excitations à un-corps qui peuvent donc être générées complètement par la transformation des orbitales. L'effet de cette dernière sur la prise en compte de telles configurations doit donc être maximal.
 - Les excitations 1p-1h de p à fp peuvent aussi jouer un rôle. Le terme source ne couple pas à de telles couches de parité négative. Elles sont cependant mélangées via l'équation $[h(\rho, \sigma), \rho] = 0$, produisant ainsi un (faible) effet de polarisation du coeur.
- Excitations 2p-2h entre couches $\Delta N_{shell} = 1$. Les plus importantes étant des excitations de sd vers fp et de p vers sd. En fait, à cause de la conservation explicite de la parité les états de la couche sd ne se mélangerons jamais avec des états des couches p ou fp. Il est donc impossible de générer des excitations 2p-2h entre ces couches via l'équation aux orbitales. Ceci explique sans doute le faible impact de cette dernière sur les probabilités de transitions B(E2).

5 Premières applications aux réactions

Pour finir, nous utilisons les résultats de structure obtenus via la méthode mp-mh comme ingrédients de base pour des calculs de réactions. En particulier, nous nous intéressons à la diffusion inélastique d'électrons et de protons sur des noyaux de la couche sd, excités depuis leur état fondamental.

5.1 Diffusion inélastique d'électrons vers états discrets de la cible

Les électrons sont des particules ponctuelles qui interagissent électromagnétiquement avec les noyaux cibles. La diffusion d'électrons peut donc fournir une information claire et directe sur la distribution en charge des noyaux. L'étude formelle de ce mécanisme est largement discutée dans la littérature. Nous nous plaçons ici dans le cadre usuel de l'onde plane à l'approximation de Born [10] (Plane Wave Born Approximation ou PWBA) dans laquelle la section efficace de diffusion d'électron est donnée par,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}} R\left[|F_L(q)|^2 + \left(1 + \tan^2\frac{\theta}{2}\right)|F_T(q)|^2\right] , \qquad (17)$$

où $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}}$ et R sont respectivement la section efficace de Mott et le facteur de recul du noyau cible, dont les expressions sont données dans [10]. $|F_L(q)|^2$ est le facteur de forme longitudinal résultant de l'interaction de l'électron avec la distribution en charge du noyau,

$$|F_L(q)|^2 = |F_{C,\lambda=J}(q)|^2 = \frac{4\pi}{Z^2} \sqrt{\frac{2J_f+1}{2J_i+1}} \int_0^\infty \rho_{tr}(r) j_\lambda(qr) r^2 dr .$$
(18)

Enfin, le facteur de forme transverse $|F_T(q)|^2$, résultant de l'interaction de l'électron avec les courants électriques et magnétiques du noyau, est négligé ici.

Utilisant les densités de transition $\rho_{tr}(r)$ calculées dans le cadre de la méthode mp-mh, on calcule les facteurs de forme $|F_{C,\lambda=J}(q)|^2$ que l'on compare à l'expérience. La figure (8) montre les résultats obtenus avant et après optimisation des orbitales pour la diffusion d'électrons sur cible de ²⁸Si. On étudie la transition $0_1^+ \rightarrow 2_1^+$. Les densités de transition correspondantes sont également représentées.

Les résultats sont accord avec l'étude des probabilités de transition B(E2) faite précédemment. Avant l'optimisation des orbitales, un manque important de magnitude est observé (un facteur 4 est nécessaire pour atteindre les valeurs expérimentales). On observe une augmentation importante du pic à $r \sim 3$ fm dans la densité de transition de charge, causée par la transformation des orbitales individuelles. En effet sa valeur passe de ~ 0.13 fm⁻³ à ~ 0.16 fm⁻³. Cette augmentation à la surface est contrebalancée par une diminution de la composante de volume à $r \sim 1.2$ fm. Ces changements se reflètent dans le calcul du facteur de forme pour lequel un gain de magnitude global est observé (facteur ~ $\frac{4}{2.5} \sim 1.6$), en accord avec les résultats de B(E2) (facteur ~ 1.3). Un resserrement du facteur de forme est également observé, menant à un meilleur accord avec les valeurs expérimentales à haut moments q. Ces effets sont très encourageants.



FIGURE 8: Densité de transition et facteur de forme Coulombien pour la diffusion d'électron $\lambda = 2$ sur cible de ²⁸Si.

5.2 Diffusion inélastique de protons vers états discrets de la cible

Contrairement à la diffusion d'électrons, la diffusion de hadrons fournit des informations sur la distribution des deux types de nucléons. A cause de la complexité de la force nucléaire, l'opérateur de transition \hat{T} nécessaire pour calculer les probabilités de transition $\langle \Psi_i | \hat{T} | \Psi_f \rangle$ d'un état initial vers un état final, n'est pas connu. Le modèle utilisé ici pour approcher cette quantité est celui décrit dans [11] et utilise l'approximation de la DWBA (Distorted Wave Born Approximation) qui décrit les ondes incidente et diffusée du projectile comme distordue par le champ du noyau, lui-même pris comme un potentiel optique qui simule l'interaction entre le projectile et la cible. Les calculs de sections efficaces sont faits en collaboration avec Marc Dupuis (CEA,DAM,DIF). La figure (9) montre les résultats obtenus pour la diffusion de protons sur ²⁸Si avec les densités de transitions résultants de la méthode mp-mh, avant et après optimisation des orbitales.

Qualitativement, les tendances des résultats théoriques (courbe noire) sont en légers désaccords avec les tendances expérimentales (points) à angles élevés. Ceci peut être dû au modèle de réaction. En accord avec les études précédentes, l'optimisation des états à une particule permet de gagner un facteur ~ 1.25 global.



FIGURE 9: Section efficace de diffusion de proton (d'énergie incidente E = 65 MeV) sur ²⁸Si pour la transition $0_1^+ \rightarrow 2_1^+$.

6 Conclusion et perspectives

Ce travail de thèse s'inscrit dans le cadre du développement de la méthode de mélange de configurations multiparticules-multitrous (mp-mh). Basée sur un principe variationnel déterminant à la fois les coefficients d'expansion de la fonction d'onde ainsi que les orbitales individuelles, cette méthode établit un lien naturel entre les approches basées sur la théorie de champ-moyen auto-cohérent et le modèle en couches. Les premières applications concernant la description des noyaux de la couche sd sont encourageantes. Une étude précise des corrélations présentes dans l'état fondamental de quelques noyaux tests a été menée, et le rôle de la renormalisation des états individuels sur différentes observables a été étudié en détails. L'étude des énergies d'excitation a mené à un très bon accord global avec l'expérience. La surestimation globale des spectres d'excitations des noyaux ³⁰Si et ³⁰S a cependant confirmé que l'interaction de Gogny D1S utilisée n'est pas complètement adaptée au traitement explicite de tous types de corrélations comme introduites par la méthode mp-mh. Ceci confirme le besoin de développer une interaction de Gogny qui soit davantage contrainte dans le canal proton-neutron T=0. Des travaux dans cette direction sont en cours [12, 13]. L'étude des probabilités de transition B(E2) a révélé, comme attendu, un manque de collectivité important de la fonction d'onde, dû à la restriction des configurations dans un espace de valence réduit (couche sd). Si une amélioration systématique de ces résultats est induite par l'optimisation des orbitales, elle reste cependant largement insuffisante dans la plupart des noyaux étudiés. Ce comportement a été compris comme dû à la conservation explicite de symétries qui empêche la transformation des orbitales de générer des excitations 2p-2h implicites de couches de parité positive vers celles de parité négative. Ce résultat suggère qu'une troncature des configurations en terme d'espace de valence n'est sans doute pas le meilleur critère de sélection à utiliser afin d'exploiter au maximum l'effet potentiel de l'équation aux orbitales. Un critère en terme d'ordre d'excitation des configurations construites sur la base d'orbitales entière serait peut être plus prometteur.

De nombreuses perspectives peuvent être envisagées. Par exemple, l'application de la méthode mp-mh à la description d'états collectifs tels que les résonances géantes et Pygmées serait

extrêmement enrichissante. Une comparaison à la méthode RPA (Random Phase Approximation ou approximation de la phase aléatoire) qui utilise des orbitales Hartree-Fock pures ainsi qu'un état fondamental non corrélé pour calculer les éléments de matrice (approximation de quasi-bosons), pourrait être menée. Une telle étude permettrait de quantifier l'effet de la renormalisation des orbitales ainsi que l'importance des corrélations dans l'état fondamental. Des extensions du formalisme de la méthode mp-mh sont également envisagées. Notamment, dans l'optique d'un traitement unifié de tous les noyaux, et motivé par les récents progrès expérimentaux effectués dans la production de systèmes exotiques, il apparait nécessaire d'étendre le formalisme de la méthode pour prendre en compte de manière précise le continuum d'états non liés. Une telle extension permettrait de traiter les systèmes fermés et ouverts sur un pied d'égalité, et contribuerait ainsi à l'unification des aspects de structure et de réaction.

Références

- P. Ring and P. Schuck, The Nuclear Many-Body Problem (Springer-Verlag, New-York, 1980).
- [2] C. Froese-Fischer, Comp. Phys. Comm. 1, 151 (1969). J.C. Morrison and C. Froese-Fischer, Phys. Rev. A 35, 2429 (1987).
- [3] D.L. Yeager and P. Jørgensen, J. Chem. Phys. 71, 2 (1979). H.J. Werner and W. Meyer, J. Chem. Phys. 74, 10 (1981).
- [4] N. Pillet et al. Phys. Rev. C 85, 044315 (2012).
- [5] J. Le Bloas et al., Phys. Rev. C (R) 89, 011306 (2014).
- [6] N.Pillet, J.-F. Berger, and E. Caurier, Phys. Rev. C 78, 024305 (2008).
- [7] J.F. Berger, M. Girod and D. Gogny, Comput. Phys. Comm. 63, 365 (1991).
- [8] National Nuclear Data Center, Evaluated Nuclear Structure Data File, http://www.nndc.bnl.gov/ensdf.
- [9] B.A. Brown and B.H. Wildenthal, Ann. Rev. Nucl. PArt. Sci. 38, 29, 1988.
- [10] J. Heisenberg et al., Phys. Rev. C 25, 2292 (1982).
- [11] M. Dupuis, Modèles de réactions directes et de pré-équilibre quantique pour la diffusion de nucléons sur des noyaux sphériques, thèse de l'Université de Bordeaux I-Talence, 2006.
- [12] F. Chappert, N. Pillet et al., submitted to Phys. Rev. C.
- [13] D. Peña Arteaga and N. Pillet, work in progress.